

Ca-N

IX 2557

1952

$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$, $\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7$ (0i)

Трое Е.Р., Колесово В.А.,

Памяти С.И. Завинова, и, и-во
АН СССР, 1952, 231-238

ЕСТЬ Ф. 10

can

Margrave Y.L.,
Staphitanonda P.

1955

32

J. Phys. Chem., 59, N12, 1231

Do

A-469

оттиски

Газообразное всепригодное
металлов. I. теория.
расчетная энергия диссо-
циации двухатомных
металлов.

(См. SiN) III

$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ Bp-1924-1x 1962

Buijs K., Schutte C. J. H.

"Spectrochim. acta"

1962 18 March, 307-13

(2i)

IX 2245

1964



Hester R.E., Plane R.A.

J. Chem. Phys. 1964, 40, 2411-414

10 E.C. & R.

PX. 1965 165119

Ca-ND₃

Burrow R. F.,
Lagowski J. J.

1965

Solvated Electron, Washing-
ton, D. C., Amer. Chem. Soc.,
125-137.

Антипроксимия растворенных
растворов метана-ND₃
(см. Li-ND₃).

A-573

1965

Ca(NO₃)₂, Sr(NO₃)₂, Ba(NO₃)₂, AgNO₃,
 LiNO₃, NaNO₃, KNO₃, Pb(NO₃)₂,
 Mn(NO₃)₂, Nd(NO₃)₃, Cd(NO₃)₂ & gr.
 (Di).

Ferraro J. R., Walker A.,

J. Chem. Phys., 1965, 42, 1273-1277

Presp, 1966, 10281 10

$\text{Ca}(\text{NH}_2)_2$

1966

10 Б188. Исследование амидов щелочно-земельных металлов методом инфракрасной спектроскопии. Bouc-lier Patrick, Novak Alexandre, Portier Josik, Hagenmüller Paul. Etude par spectroscopie infrarouge, des amidures alcalino-terreux. «C. r. Acad. sci.», 1966, C263, № 15, 875—878 (франц.)

Исследованы в области $4000-200 \text{ см}^{-1}$ спектры твердых амидов $\text{Ca}(\text{NH}_2)_2$, $\text{Sr}(\text{NH}_2)_2$ и $\text{Ba}(\text{NH}_2)_2$. В полученных спектрах, в отличие от амидов Li и Na , обнаружено дуплетное расщепление полос, соответствующих внутренним колебаниям $\nu(\text{асим.})$ и $\nu(\text{сим.})$ и деф. кол. δ иона NH_2^- . По мнению авторов, это явление связано с влиянием кристаллич. решетки. Подобное расщепление полос наблюдалось и в спектрах частично дейтерированного

2. 1967. 10



продукта и $\text{Ca}(\text{ND}_2)_2$. Кроме того, обнаружены интенсивные полосы при 3260 и 1340 см^{-1} , отнесенные соотв. колебаниям $\nu(\text{NH})$ иона NHD^- и колебаниям $\delta(\text{NHD})$. Наблюдаемые в спектрах полосы при 600—640 и 480 см^{-1} соответствуют колебаниям свободных ионов NH_2^- и ND_2^- , а при 350 см^{-1} — колебаниям решетки. Авторы отмечают уменьшение средней частоты колебаний $\nu(\text{NH})$ в ряду Ca , Sr , Ba с увеличением катионного радиуса молекул и отсутствие Н-мостиков в амидах щелочно-земельных металлов.

Е. Визен

1966

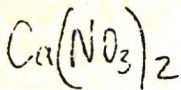
$\text{Ca}(\ddot{\text{N}}\text{H}_2)_2$

6 Д272. Исследование аминов щелочноземельных элементов методом ИК-спектроскопии. Bouclier Patrick, Novak Alexandre, Portier Josik, Hagenmuller Paul. Etude par spectroscopie infrarouge, des amidures alcalino-terreux. «C. r. Acad. sci.», 1966, C263, № 15, 875—878 (франц.)

Исследованы ИК-спектры ($4000-200 \text{ см}^{-1}$) твердых $\text{Ca}(\text{NH}_2)_2$, $\text{Ca}(\text{ND}_2)_2$, $\text{Sr}(\text{NH}_2)_2$ и $\text{Ba}(\text{NH}_2)_2$. Наблюдаемое удвоение полос внутренних колебаний ионов NH_2^- и ND_2^- объяснено расщеплением в поле кристалла. Центр тяжести полос вал. кол. $\nu(\text{NH})$ смещается в сторону низких частот с увеличением радиуса катиона. Свободное вращение иона NH_2^- в кристалле представляется маловероятным. Библ. 6. Э. Броун

оп. 1967. 6D

IX



ИК-спектр

12 Д294) Колебательные спектры расплавов солей. I. ИК-спектры нитрата кальция в растворах нитратов щелочных металлов. Hester R. E., Krishnan K. Vibrational spectra of molten salts. I. Infrared spectra of calcium nitrate in alkali-metal nitrate solutions. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 9, 3405—3409 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ($4000\text{--}200\text{ см}^{-1}$) тонких пленок $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ (I), растворенных в расплавах KNO_3 (II) и NaNO_3 . Изменения, наблюдаемые в спектрах в зависимости от содержания Ca, свидетельствуют об асимметричном возмущении иона нитрата ионом Ca. Сравнение исследованных растворов с концентрированными водными растворами I показывает, что во всех случаях имеет место образование контактных комплексов пар ионов. Полоса 332 см^{-1} в спектрах расплавов, содержащих Ca^{2+} , отнесена к вал. кол. $\text{Ca}\text{--}\text{ONO}_2$. Добавление KCl в расплав II/I приводит к восстановлению спектра чистого II. Приведены спектры и таблицы частот. Библиограф. 10.

Э. В. Б.

1967

00. 1967. 12

1969

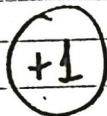
Ca(NH₂)₂

9 Д552. Радиокристаллографические, ИК-спектроскопические и ЯМР-исследования амидов кальция и стронция. Bouclier Patrick, Portier Josik, Turgell Georges, Dufourcq Jean, Hagenmuller Paul. Etude par radiocristallographie, spectrometrie infrarouge et resonance magnetique nucleaire des amidures de calcium et de strontium. «C. r. Acad. sci.», 1969, C268, № 2, 175—177 (франц.)

сил. коэф.
структура

Исследованы аллотропные модификации Ca(NH₂)₂ (I) и Sr(NH₂)₂ (II). Проведен анализ ИК-колебаний NH₂-групп с учетом кристаллографич. данных по симметрии и получены силовые постоянные для NH₂-групп. На основе ИК, ЯМР и радиокристаллографич. данных получены следующие значения молекулярных парамет-

ров: $r_{H-H}=1,64\text{\AA}$ (I) и $1,66\text{\AA}$ (II), $r_{N-H}=1\text{\AA}$ и $\widehat{H-N-H}=100-116^\circ$ (I) и $103-116^\circ$ (II). Э. В. Б.



ф. 1969. 99

$\text{Ca}(\text{NH}_2)_2$
(крист.)

ИК-спектр,
сильн. погл.

Л. 1970.5

1969
5 Б289. Структурные исследования амидов щелочно-земельных металлов. I. Инфракрасные спектры амида кальция. Bouclier Patrick, Portier Josik, Turrell Georges. Structural studies of alkaline—Earth amides. I. IR spectra of calcium amide. «J. Molec. Struct.», 1969, 4, № 1, 1—13 (англ.)

Исследованы рентгеновские и ИК-спектры $\text{Ca}(\text{NH}_2)_2$ в двух кристаллич. формах. Форма α получается при взаимодействии металлич. Ca с жидк. NH_3 при 20° и имеет тетрагон. элемент. ячейку, пространственная группа $D_{4h}^{19}(I4_1/amd)$. Форма β получается при взаимодействии Ca с газообразным NH_3 при 0° и имеет малоупорядоченную кубич. структуру. Проведен фактор-групповой анализ колебаний $\text{Ca}(\text{NH}_2)_2$ в обеих крист. формах. Табулированы данные по положению, относит. интен-

сивности и отнесению полос в спектрах $\text{Ca}(\text{NH}_2)_2$, $\text{Ca}(\text{ND}_2)_2$ и частично дейтерированных продуктов. Проведен приближенный расчет колебательных спектров исследованного в-ва с целью определения значений силовых постоянных. В спектре β -формы наблюдается расщепление полос нормальных колебаний NH_2^- , связанное с диполь-дипольным взаимодействием аннонов.

Ю. В. Киссин

1970

 $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$

ИК-спектр

и
спектр КР

2 Б278. Ионные взаимодействия в кристаллах. Инфракрасные спектры и спектры комбинационного рассеяния порошкообразных $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ и $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$. Brooker M. H., Irish D. E., Boyd G. E. Ionic interactions in crystals: infrared and raman spectra of powdered $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$, and $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$. «J. Chem. Phys.», 1970, 53, № 3, 1083—1087 (англ.)

Описана методика измерения колебательных спектров центратов Ca, Sr, Ba и Pb. Полученные ИК-спектры методом многократного внутреннего отражения соответствуют спектрам пропускания порошков, осажденных на AgBr, измеренным в области $700-1100 \text{ см}^{-1}$. Исследованы КР-спектры с лазерным возбуждением. Предложена

X. 1971. 2

+3



интерпретация наблюдаемых частот. Отличие полученных спектров от ожидаемых на основании фактор-группового анализа связано с различием в крист. структурах. Это особенно заметно в случае $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$, отсутствие сходства в ИК- и КР-спектрах к-рого подтверждает характерную для него T_h^{6-} -пространственную группу, а не T . Найдено, что величина расщепления, вызываемая крист. полем составляет 50 см^{-1} в области антисимм. вал. кол. и 2 см^{-1} в области остальных основных частот.

Л. Леонтьева

$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ (кристаллиз.)

1974

6 Б291. Температурная зависимость частот в спектрах комбинационного рассеяния кристаллических нитратов кальция, стронция, бария и свинца. Ахтирський В. Г., Присяжний В. Д., Кирилов С. О., Чернишова С. П. Температурна залежність частот у спектрах комбінаційного розсіювання полікристалічних нітратів кальцію, стронцію, барію та свинцю. «Доповіді АН УРСР», 1974, Б, № 10, 899—900, 955 (укр.; рез. англ., рус.)

Изучена т-рная зависимость ($T=25-441^\circ$) частот линий, относящихся к колебаниям ν_1 и ν_4 , в спектрах КР $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ ($\nu_1=1065$ и $\nu_4=740 \text{ см}^{-1}$), $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$ (1057 и 740 см^{-1}), $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ (1045 и 732 см^{-1}) и $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ (1047 и 734 см^{-1}). Найдено, что частоты ν_1 и ν_4 (симметрия всех исследованных кристаллов $T_h^{6-}P_a^3$) не зависит от т-ры, а плавно уменьшается по мере роста радиуса катиона. Исключение составляет лишь $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ (а также AgNO_3)₂ что может быть связано с ковалентным вкладом в потенциал взаимодействия между ионами.

А. Бобров

ж. 1975. №6

(+2)

ⓧ

41231.9058

Ch-z, TC

48536 03

$\text{Ca}(\text{NH}_2)_2$, $\text{Ca}(\text{NH})$

1974

X4-7724

Linde G., Juza R.

IR-Spektren von Amidon und Imiden
zwei- und dreiwertiger Metalle.

"Z. anorg. und allg. Chem.", 1974,
409, N 2, 199-214

(нем., рез.англ.)

0262 пик

248 249 - 2 54

ВИНИТИ

CaN_2O_3

num 5230 / 1977

(u.k. - chem)
2i

Hughes M.N., et al
Spectrochim. acta,
1977, 33A, 243-4

$\text{Ca}^+ \text{NO}^-$

оттиски 5283

1974

$\text{Ca}^+ \text{NO}_2^-$

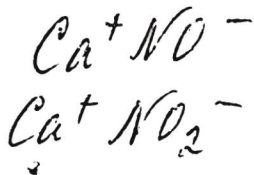
(Vi)

11 Д572. ИК-спектры $\text{Ca}^+ \text{NO}^-$ и $\text{Ca}^+ \text{NO}_2^-$ в твердом аргоне при 15° K. Tevault David E., Andrews Lester. Infrared spectra of $\text{Ca}^+ \text{NO}^-$ and $\text{Ca}^+ \text{NO}_2^-$ in solid argon at 15° K. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 48, № 1, 103—106 (англ.)

По ИК-спектрам поглощения (200—2000 cm^{-1}) изучена реакция атомов Ca, а также Ba и Sr с NO и NO_2 при соосаждении с высоким разбавлением в матрицу из Ar при 15° K. Полосы 1357 и 455 cm^{-1} , показывающие значительные сдвиги при изотопном замещении по ^{15}N , ^{18}O и ^{44}Ca , отнесены к колебаниям $(\text{NO})^-$ и $\text{Ca}^+-(\text{NO}_2)^-$ в изолированной в матрице молекулы $\text{Ca}^+ \text{NO}^-$. В спектре комплекса $\text{Ca}^+ (\text{NO}_2)^-$ интенсивная полоса при 1244 cm^{-1} отождествлена с колебанием $\nu_3 \text{NO}_2^-$. Библ. 15.

С. Ф. Б.

Ф. 1974 № 11



in muck 5283 1977

(Di)

87: 60302f Infrared spectra of $\text{Ca}^+ \text{NO}^-$ and $\text{Ca}^+ \text{NO}_2^-$ in solid argon at 15 K. Tevault, David E.; Andrews, Lester (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). Chem. Phys. Lett. 1977, 48(1), 103-6 (Eng). Ca atoms were reacted with NO and NO₂ on condensation at high diln. in Ar at 15 K. IR absorptions at 1357 and 455 cm⁻¹ show appropriate isotopic shifts to be due to (N-O)- and Ca⁺-(NO) vibrations in the $\text{Ca}^+ \text{NO}^-$ species. A strong band at 1244 cm⁻¹ is due to ν_3 of NO₂ in the $\text{Ca}^+ \text{NO}_2^-$ complex.

C.A. 1977, 87 N 8

$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$

номер 4954

1979

Брокет М.М.

Раман
спектр

J. Solid State Chem,
1979, 28, 29-39

$\text{Ca}(\text{NO}_2)_2$

$\text{Mg}(\text{NO}_2)_2$

NaNO_2

спектры

К. Р.

(+2)

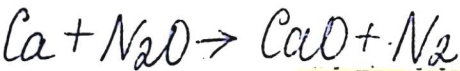
ф. 1980, № 12

1980

12 Д389. Измерение констант стабильности водных нитритов кальция и магния методом комбинационного рассеяния света. Measurement of the stability constants for aqueous calcium and magnesium nitrite by Raman spectroscopic methods. Brooker M. H., De-Young B. S. «J. Solut. Chem.», 1980, 9, № 4, 279—288 (англ.)

Изучены спектры комб. рас. ($300-1400 \text{ см}^{-1}$) водных растворов $\text{Ca}(\text{NO}_2)_2$ (I), $\text{Mg}(\text{NO}_2)_2$ (II) и NaNO_2 при возбуждении лазерной линией $488,0 \text{ нм}$, а также ИК-спектры I и II. Проведен детальный анализ полос колебаний ν_2 нитритного аниона в спектрах I и II в предположении, что свободные ионы NO_2^- обладают симметрией C_{2v} . Зарегистрированы полосы свободных ионов NO_2^- и ионов, участвующих в образовании комплексов с катионами Ca^{2+} , Mg^{2+} и Na^+ . Полосы в обла-

сти 350—400 см⁻¹ приписаны колебаниям гидратированных катионов. Отмечено, что конц-ия комплексов типа I сильно зависит от величины $\mu_i \sim C_i \cdot Z_i$, где C_i — молярная конц-ия каждого иона и Z_i — заряд иона, причем увеличение значений μ_i приводит к росту числа связанных нитратных групп. Определены константы стабильности β_1 и β_2 комплексов I и II в растворе. Величины β_1 и β_2 при т-ре 25° С и $\mu=5,8$ для I составляют 0,52 и 0,18 соответственно, тогда как для II при $\mu=8,2$, $\beta_1=0,061$ и слабо меняется при вариации т-ры раствора. Библ. 15. И. В. А.



Омтиск
12540

1981

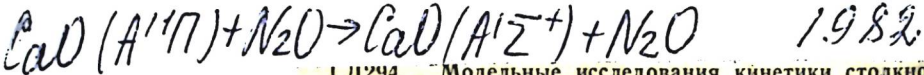
спектр
Хемилюми-
несценции

12 Д796. Исследование реакций $\text{Ca}(^1\text{S}, ^3\text{P}^0 \text{ и } ^1\text{D}) + \text{N}_2\text{O}$ при условиях однократных столкновений и высоких давлениях. Поперечные сечения хемилюминесценции, квантовые выходы и столкновительная передача энергии CaO^* от N_2O . A study of the reactions $\text{Ca}(^1\text{S}, ^3\text{P}^0, \text{ and } ^1\text{D}) + \text{N}_2\text{O}$ under single-collision conditions and at higher pressures: Chemiluminescence cross sections, photon yields, and collisional energy transfer in CaO^* by N_2O . Irvin John A., Dagdigan Paul J. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 11, 6178—6187 (англ.)

Пучок атомов Ca в основном ($4s^2 ^1\text{S}$) или возбужденных метастабильных ($4s4p^3\text{P}^0$ и $4s3d^1\text{D}$) состояниях через коллимирующее отверстие диаметром 200 мкм направлялся в реактор с потоком N_2O при давлении до 0,3 мм рт. ст. По спектрам хемилюминесценции, регистрируемым в интервале 300—890 нм, определялись величины поперечных сечений хемилюминесценции и квантового выхода для различных состояний CaO^* при реакции $\text{Ca}(^1\text{S}, ^3\text{P}^0, ^1\text{D}) + \text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{CaO}^* + \text{N}_2$.

Е. Антонов

Ф. 1981, 18, N 12.



1 Д294. Модельные исследования кинетики столкновительной передачи заселенности между неизлучающим и излучающим возбужденными электронными состояниями: $\text{CaO}(A'^1\Pi) + \text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{CaO}(A^1\Sigma^+) + \text{N}_2\text{O}$. Model studies of the kinetics of collisional population transfer between dark and radiating excited electronic states: $\text{CaO}(A'^1\Pi) + \text{N}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CaO}(A^1\Sigma^+) + \text{N}_2\text{O}$. Alexander

Millard H., Osmolovsky Michael G. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 2, 839—853 (англ.)

С помощью кинетич. ур-ния исследован поток заселенности из ровибронного многообразия ($v=6, J$) $A'^1\Pi$ состояния молекулы CaO в ровибронное многообразие ($v'=0, J'$) $A^1\Sigma^+$ состояния, индуцированный столкновением с молекулами N_2O . Вероятности неупругих переходов рассматриваются как результат связи постоянного дипольного момента N_2O и дипольного момента перехода между неизлучающим $A'^1\Pi$ и излучающим $A^1\Sigma^+$ состояниями CaO . Дипольный момент перехода, в свою очередь, обязан взаимодействию орбита — вращение между ровибронными многообразиями состояний $A'^1\Pi$ и $A^1\Sigma^+$. Кинетич. ур-ние решено в пределе ста-

сп. 1983, 18,
N1

III

дионарных конц-ий. Полученные заселенности использованы для анализа зависимости от давления (0—0) полосы спектра $A^1\Sigma-X^1\Sigma^+$ перехода и вариации характеристик спектра от условий образования и ухода из зоны реакции возбужденных состояний CaO.

А. Воронин

$\text{Ca} + \text{NF}_3$

1983

Engelke Friedrich.

Nachr. Chem., Techn. und
Lab., 1983, 31, N5, 368-372.

(Cer. $\text{Ca}^{\bullet}-\text{F}$; II)

$\text{Ca}(\text{NH}_2\text{SO}_3)_2 \cdot \frac{1}{2} \text{H}_2\text{O}$ Om. 17492

1983

Muthusubramanian P.
Sundara Raj A.,

Раман. и ИК
спектр

Y. Raman Spectrosc.
1983, 14, N 4, 221-
224.

Моноамиды Ca 10m. 16233 1983

[98: 80891c Chemiluminescent reactions of alkaline-earth metals with water and hydrazine. Wormsbecher, Richard F.; Trkula Mitchell; Martner, Cecilia; Penn, Robert E.; Harris, David O (Dep. Chem., Univ. California, Santa Barbara, CA 93106 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 97(1), 29-36 (Eng). The monoamides of Ca, Sr, and Ba were obsd. for the 1st time as products of low-pressure chemiluminescent reactions of the metal atom vapors with a hydrazine oxidant. The monoamide chemiluminescence spectra were assigned by comparison with the isoelectronic alk.-earth monohydroxides and monofluorides, formed with water and SF₆ oxidants. These comparisons also allow the amide's position in the spectrochem. series for monovalent alk.-earth compds. to be established as follows: F⁻ > OH⁻ > NH₂⁻ > Cl⁻ > Br⁻ > I⁻. Dynamical aspects of the reactions along with prospects for the generation and study of other polyat alk.-earth compds. by similar gas-phase reactions are discussed.

спектр.
химизмом.

(+2) X

C. A. 1983, 98, N10.

ка об.

1) Мотоманида . Sr.

2) — . — . — . Ba

CaNH_2

От. 16/69

1983

Г 14 Б153. Лазерная спектроскопия высокого разрешения CaNH_2 . Анализ системы $\tilde{C}^2A_1-X^2A_1$. High-resolution laser spectroscopy of CaNH_2 : analysis of the $\tilde{C}^2A_1-X^2A_1$ system. Wormsbecher Richard F., Penn Robert E., Harris David O. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 97, № 1, 65—72 (англ.)

Измерена вращательная структура параллельной подполосы $K_{-1}=1$ полосы $0-0$ перехода $\tilde{C}^2A_1-\tilde{X}^2A_1$ в спектре лазерного возбуждения флуоресценции высокого разрешения молекулы CaNH_2 , образующейся при взаимодействии паров кальция с гидразином или аммиаком. Молекула рассматривалась как слабо асим. волчок с $A' \sim A''$. Приведено положение и отнесение около 140 линий. Значения молек. постоянных CaNH_2 (cm^{-1}): состояние $\tilde{X}^2A_1-B=0,30079$, $C=0,29319$; состояние $\tilde{C}^2A_1-T_{K_{-1}=1}=17375,129$, $B=0,30562$, $C=0,29789$, спин-вращательных постоянных Райна (μ , k , b) и Лина (ϵ_{aa} , ϵ_{bb} , ϵ_{cc}) соотв. $-0,0404$; $-0,62$; $0,0049$; $-0,66$; $-0,0356$; $-0,0453$. Структурные параметры молекулы

м.п., геометр.
структура

Х. 1983, 19, № 14

(в предположении, что молекула плоская и при фиксированном расстоянии r (N—H) = 1,02 Å): состояние $\tilde{X}^2A_1$ — r (H—H) = 1,698 Å, r (Ca—N) = 2,132 Å, $\text{HNH} = 112,7^\circ$; состояние $\tilde{C}^2A_1$ соотв. 1,686 и 2,112 Å и $111,5^\circ$. Полученные результаты сопоставлены с данными по изоэлектронной молекуле CaF (при анализе спектров постоянные центробежного искажения и спин-вращательного взаимодействия в основном электронном состоянии CaNH_2 принимались равными значениями соотв-щие параметров CaF , $X^2\Sigma^+$). В. М. Ковба

CaNH

DM. 16169

1983

7 Д490. Лазерная спектроскопия высокого разрешения молекул CaNH: анализ системы $\tilde{C}^2A_1 - \tilde{X}^2A_1$. High-resolution laser spectroscopy of CaNH₂. Analysis of the $\tilde{C}^2A_1 - \tilde{X}^2A_1$ system. Wormsbecher Richard F., Penn Robert E., Harris David O. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 97, № 1, 65—72 (англ.)

В области 16 362—16 397 см⁻¹ получен спектр возбуждения флуоресценции газофазных молекул CaNH₂. Для возбуждения использовалось излучение многомодового лазера. Спектральная ширина возбуждающего излучения не превышала 0,01 нм. В спектре отождествлено ~140 линий, отнесенных авторами к системе переходов $\tilde{C}^2A_1 - \tilde{X}^2A_1$ (CaNH₂). По эксперим. данным рассчитаны основные постоянные молекулы CaNH₂ (в см⁻¹): $B=0,30079$; $C=0,29319$ для состояния $\tilde{X}^2A_1$ и $T_{k-1}=17375,1$; $B=0,30562$; $C=0,29789$ для состояния $\tilde{C}^2A_1$. Обсуждены электронная структура и параметры спин-вращательного взаимодействия молекул CaNH₂ в сопоставлении с ее изоэлектронным аналогом CaF.

М. Т.

л.п., Vi;

фр. 1983, 18,
N 7

CaNH₂

Om. 16969,

1983

98: 80893e High-resolution laser spectroscopy of calcium monoamide: analysis of the $C^2A_1-X^2A_1$ system. Wormsbecher, Richard F.; Penn, Robert E.; Harris, David O. (Dep. Chem., Univ. California, Santa Barbara, CA 93106 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 97(1), 65-72 (Eng). Laser excitation spectra of the $C^2A_1-X^2A_1$ system of CaNH₂ are reported. Due to the spectral d., individual lines could only be resolved and measured using a filtered fluorescence excitation technique, with a monochromator acting as an optical bandpass filter; 140 line positions were measured in this way and assigned to the parallel $K-1 = 1$ subband of what is believed to be the vibrational 0-0 band. The mol. consts. were detd. from a weighted nonlinear least-squares fit of the line positions.

($C^2A_1-X^2A_1$)

камерой.

чекмп,

М.П.

C. A. 1983, 98, N10.

CaNH_2

1983

Wormsbecher R. F.,
Trkula M., et al.

спектр

J. Mol. Spectrosc.,
1983, 97, N1, 29-36.

( CaOH ; III)

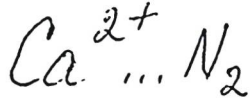
La²⁺-N₂ (OM. 21399)

1985

Ykuta S.,

Measuring
cross
ab initio
reaction.

Chem. Phys., 1985, 95,
N2, 235-242.



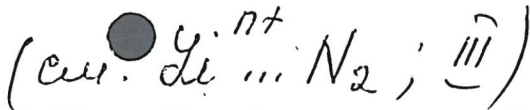
1985

Pirchuk V. M.

мор.
раств.
структур
комплекса

Zh. Strukt. Khim.

1985, 26 (3), 38-42.



CaNH_2

(DM-26798)

1987

21 Б1210. Лазерная спектроскопия моноалкиламинов стронция и кальция. Laser spectroscopy of strontium and calcium monoalkylamides. Вореде-га А. М. Р. Р., Brazier С. ., Bernath Р. FR. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 11, 2779—2781 (англ.)

С применением лазеров на красителе получены спектры возбуждения для моноалкиламинов CaNHR и SrNHR ($\text{R}=\text{H}$, CH_3 , C_2H_5 , $\text{изо-C}_3\text{H}_7$, $\text{трет-C}_4\text{H}_9$), образующихся в результате взаимодействия паров Ca и Sr с перв. аминами. Обнаружены электронные переходы, $\tilde{\text{C}}^2\text{A}_1(2\text{A}')-\text{X}^2\text{A}_1(2\text{A}')$, $\text{B}^2\text{B}_1(2\text{A}'')-\text{X}^2\text{A}_1(\text{A}')$ и $\tilde{\text{A}}^2\text{B}_2(\text{A}_2\text{A}')-\text{X}^2\text{A}_1(2\text{A}')$. По спектрам электронных переходов сделано отнесение нек-рых колебат. частот связей $\text{Ca}-\text{N}$ и $\text{Sr}-\text{N}$. А. М. Сахаров

М.П.

Х. 1987, 19, №21

не рецензировано

CaN₃

29385

1988

17 Б1243. Лазерная спектроскопия свободных радикалов моноазидов кальция и стронция. Laser spectroscopy of calcium and strontium monoazide free radicals. Brazier C. R., Bernath P. F. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 4, 2112—2116 (англ.)

Путем прямого газофазного взаимодействия паров металла с HN₃ синтезированы молекулы CaN₃ (I) и SrN₃ (II). Измерены их спектры хемилюминесценции, спектры лазерной флуоресценции (Фл) (переходы $\tilde{A}^2\Pi - \tilde{X}^2\Sigma^+$ и $\tilde{B}^2\Sigma^+ - \tilde{X}^2\Sigma^+$), а также спектр возбуждения Фл SrN₃ (система $\tilde{A}^2\Pi - \tilde{X}^2\Sigma^+$). Выполнен анализ колебат. структуры переходов и анализ вращат. структуры полосы 0—0 системы $\tilde{A} - \tilde{X}$ III. Начала переходов $\tilde{B} - \tilde{X}$, $\tilde{A}^2\Pi_{1/2} - \tilde{X}$, $\tilde{A}^2\Pi_{3/2} - \tilde{X}$: I — 17 079, 16 217 и 16 293 см⁻¹; II — 15 872, 14 933 и 15 243 см⁻¹. Частоты колебаний (в см⁻¹): I, состояние $\tilde{X}^2\Sigma^+$, $\nu_1(\Sigma)$ (сим. вал. N₃) = 2114, $\nu_2(\Sigma)$ (антисим. вал. N₃) = 1364, $\nu_3(\Sigma)$ (вал. Ca—N) = 396. $2\nu_4 = 86$ ($\nu_5(\Pi)$ — деф.

29385

011

(72) 

X. 1988, 19, N 17 SrN₃, SrN, CaN

колебание Ca—N—N): состояние $\bar{A}^2\Pi - \nu_3 = 389$,
 состояние $B^2\Sigma^+ - \nu_3 = 384$, $2\nu_5 = 85$; III, состояние
 $X^2\Sigma^+$, $\nu_3 = 316$, $2\nu_5 = 82$, состояния $\bar{A}^2\Pi$ и $B^2\Sigma^+ - \nu_3 =$
 $= 321$ и 306 соотв. Значения (в см^{-1}) молек. посто-
 янных II полученные из анализа вращат. структуры:
 $X^2\Sigma^+ - B = 0,044864$, $D = 3,46 \cdot 10^{-9}$, $\gamma = 4,86 \cdot 10^{-4}$,
 $\gamma_D = 1,2 \cdot 10^{-9}$; $\bar{A}^2\Pi - T_{00} = 15057,6929$, $A = 296,4317$,
 $A_D = -5,64 \cdot 10^{-5}$, $B = 0,045331$, $D = 3,32 \cdot 10^{-9}$, $q = -6,7 \cdot$
 $\cdot 10^{-6}$, $p = -0,058692$, $P_D = 4,5 \cdot 10^{-9}$. Длина связи SrN
 составляет 2,26 А. В. М. Ковба



CaN_3

От 29385

1988

9 Л1203. Лазерная спектроскопия свободных радикалов моноазидов кальция и стронция. Laser spectroscopy of calcium and strontium monoazide free radicals. Brazier C. R., Bernath P. F. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 4, 2112—2116 (англ.)

Исследованы спектры лазерно-индуцированной флуоресценции радикалов CaN_3 и SrN_3 в газовой фазе. Синтез радикалов осуществлялся при реакции паров металлов с HN_3 . Идентифицированы и определены положения максимумов полос, а также ряд колебательных постоянных основного и возбужденных состояний. Проведен вращательный анализ структуры O—O полосы перехода $\tilde{A}^2\Pi \leftarrow \tilde{X}^2\Sigma^+$ молекулы SrN_3 . Показано, что исследованные молекулы имеют линейную структуру. Для молекулы SrN_3 длина связи Sr—N составила 2,26 Å. Библ. 32. М. Ю. Н.

спектр
лазерно-индуц.
флуоресц.

(41)
A

ср. 1988, 18, № 9

CaN₃

Am. 29385

1988

109: 118682w Laser spectroscopy of calcium and strontium monoazide free radicals. Brazier, G. R.; Bernath, P. F. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(4), 2112-16 (Eng). The gas-phase metal azides CaN₃ and

SrN₃ were synthesized. These ionic metal monoazides were found to have linear geometries. The positions of the A²Π-X²Σ⁺ and B²Σ⁺-X²Σ⁺ electronic transitions were detd. as well as several vibrational frequencies. The 0-0 band spectroscopy yielding a Sr-N bond length of 2.26 Å.

(B²Σ⁺-X²Σ⁺

A²Π-X²Σ⁺)

(4) ⊗ SrN₃ ●

C.A. 1988, 109, N14

CaN

(Am. 29385)

1988

Brazier C.R., Bernath

P.F.

J. Chem. Phys., 1988,
88, N 4, 2112-2116.

●
(em. CaN_3 ; III)

CaH_2N
(CaNH_2)

om. 30490 1988

Jacobs M.E.,

Ti, Di; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 356.

CaN_3

[om. 30490]

1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi,
J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 386.

Ca²⁺ NH₃

(DM-30303)

1988

Цевардзиева Л. Б.,

Иерния - Литерук В. М.

связи, Ж. Сіерукий. Версия,

Же

1988, ● 29, N 4, 37-42.

CaNH_2

OM-34726

1990

Ortiz J.V.,

J. Chem. Phys. 1990, 92,
N 11, 6728-6731.

Ground and excited states of
 CaCH_3 , CaNH_2 , ● CaOH and

CaF through electron propa-
gator calculations.

CaNH_2

(OM 34966) 1990

Whitham C.F., Soep B.,
et al.,

J. Chem. Phys. 1990, 93,
N2, 991-1000.

Observation and spectroscopy
of metallic • Free radi-

icals produced by reactive collisions during a supersonic expansion.

CaNH₂

DM 34967

1990

113: 122950g Laser-induced fluorescence spectroscopy of the $\tilde{B}-\tilde{X}$ and $\tilde{A}-\tilde{X}$ transitions of calcium amide (CaNH₂). Whitham, C. J.; Jingen, C. (Lab. Photophys. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(2), 1001-8 (Eng). Laser-induced fluorescence spectra of the $\tilde{B}^2B_1-\tilde{X}^2A_1$ and $\tilde{A}^2B_2-\tilde{X}^2A_1$ transitions of the CaNH₂ radical, produced in a pulsed supersonic expansion, were recorded. The $\Delta K_a = \pm 1$ rotational subbands showed an intensity alternation revealing the mol. to be planar or quasipolar. The excited A and B states exhibit unusually large spin splittings which are shown to arise from the coupling between the electronic orbital motion and the a-axis nuclear rotation. This interaction is successfully modeled in terms of a-axis rotation-orbital and spin-orbital interactions of an electron localized in a $p\pi$ orbital on the calcium atom.

$\tilde{B}-\tilde{X}$,
 $\tilde{A}-\tilde{X}$ reperi-
xogre

C.A. 1990, 113, N 14

CaNH_2

От 34967

1990

5 Б1151. Спектроскопия индуцированной лазером флуоресценции переходов $\tilde{B}-\tilde{X}$ и $\tilde{A}-\tilde{X}$ CaNH_2 . Laser-induced fluorescence spectroscopy of the $\tilde{B}-\tilde{X}$ and $\tilde{A}-\tilde{X}$ transitions of CaNH_2 / Whitham C. J., Jungen Ch. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 2.— С. 1001—1008.— Англ.

Для радикала CaNH_2 , полученного в импульсном сверхзвуковом пучке, исследована вращат. структура переходов $\tilde{B}^2B_1-\tilde{X}^2A_1$ и $A^2B_2-X^2A_1$ в спектрах индуцир. лазером ФЛ. Вращат. подполосы $\Delta K_a = \pm 1$ обнаруживают чередование интенсивностей, что указывает на плоское или квазиплоское строение молекулы. Для возбужденных состояний $\tilde{A}$ и $\tilde{B}$ наблюдается необычно большое спиновое расщепление, к-рое, по-видимому, обусловлено вз-ием между электронным орбитальным движением и вращением ядер вокруг оси симметрии. Такая интерпретация успешно промоделирована в терминах вращательно-орбитального и спин-орбитального вз-ий электрона, локализованного на рл-орбитали атома кальция. Б. С. Авербух

М.П.

X. 1991, N 5



$n = 1-3$

DM-37806

1992

Baenschlicher Ch. W., Jr.,
Lodige M., et al.,

супергруппа,
группа
свободна

J. Chem. Phys., 1992,
96(6), 4453-63.

$\text{Ca}(\text{NH}_2)_2$

1992.

Kaupp Martin,
Schleyer Paul R.

структура,
модель.
расчет

J. Amer. Chem. Soc. 1992.
114, N 2. C. 491-497.

(ср. ● CaLi_2 ; III)

$\text{Ca}^{2+}(\text{NH}_3)_m$

$m = 1 \div 3$

сер. 36833

1992

Kaupp M., Schleyer

P. R.

J. Phys. Chem.

1992, 96, 7316-7323.

структура,
энергия
связи

$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$

1994

Rossi V., Sadun C.,
et al.

инор.
патент.

THEOCHEM 1994, 120,
(3), 247-60.

(с. 247-260) $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$, III

CaNH₂

OT 38146

1995

123: 209380b A⁺ study of the $\tilde{A}^2B_2 - \tilde{X}A^2A_1$ band system of CaNH₂ employing molecular beam optical Stark spectroscopy. Marr, A. J.; Tanimoto, M.; Goodridge, D.; Steimle, T. C. (Dep. Chem. Biochem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 103(11), 4466-75 (Eng). The $0_0^0 \tilde{A}^2B_2 - \tilde{X}A^2A_1$ visible band system of a supersonic mol. beam sample of calcium amide, CaNH₂, recorded in the presence of a variable static elec. field has been studied using high resolu. laser induced fluorescence spectroscopy. The detd. spectroscopic parameters are (in cm⁻¹), origin = 15 464.366 9(8); $A'' = 13.057\ 4(9)$; $B'' = 0.300\ 47(5)$; $C'' = 0.292\ 88(5)$; $\epsilon_{bb}'' = 0.001\ 1(3)$; $\epsilon_{aa}'' = 0.001\ 1(3)$; $A' = 11.448\ 7(2)$; $B' = 0.307\ 1(1)$; $C' = 0.299\ 2(1)$; $\epsilon_{aa}' = 8.238(2)$; $\epsilon_{bb}' = 0.005\ 2(6)$; $\epsilon_{cc}' = 0.055\ 7(6)$; $\Delta_E = -0.060\ 8(5)$. The rotational parameters are interpreted to give an approx. r₀ structure. The large spin-rotation parameter for the $\tilde{A}^2B_2$ state is discussed in terms of a second order spin-orbit interaction with other low-lying electronic states. Stark splitting of the $P_{11}(1.5) + P_{12}(0.5)$ branch feature was analyzed to produce a ground state permanent elec. dipole moment, μ'' , of 1.74(1) D. A comparison of μ'' with other monovalent calcium compds. is given.

($\tilde{A}^2B_2 - \tilde{X}A^2A_1$)

M.A.

C.A. 1995, 123, N 16

Ca + HN₃

1996

ab initio
reaction

/ 125: 97072k Ab initio study on gas-phase reaction of Ca with HN₃. Zhu, Rong Shun; Dai, Shu Shan (Dep. of Chem., Yunnan Univ., Kunming, Peop. Rep. China 650091). *Chin. Chem. Lett.* 1996, 7(6), 581-584 (Eng). The reaction of Ca with HN₃ has been investigated theor. by an ab initio MO method with electron correlation being taken into account by second-order Moeller-Plesset(MP2) perturbation theory. Two possible product channels, CaN₃ + H, CaNH + N₂, on the potential energy surfaces (PESs) have been examd. and the reaction mechanism discussed. Values of the HN-N₂, H-N₃, Ca-N₃ and Ca-NH bond dissocn. energy are also calcd., which are in good agreement with equipment.

C.A. 1996, 125, N 8

CaNH₂

MANUSCRIPT
38730

1997

Li-N.

Zulfikar Morti, Chien Feng
Zhao et al.,

J. Chem. Phys., 1997, 106(12),
4860-4868 ●

CaNH₂

1997

($\tilde{C}^2A_1 - \tilde{X}^2A_1$)

127: 182455y A high-resolution analysis of the $\tilde{C}^2A_1 - \tilde{X}^2A_1$ transition of CaNH₂: pure precession in polyatomic molecules. [Erratum to document cited in CA126:335924]. Morbi, Zulfikar; Zhao, Chunfeng; Bernath, Peter F. (Center Mol. Beams Laser Chemistry, University Waterloo, Waterloo, ON Can. N2L 3G1). *J. Chem. Phys.* 1997, 107(4), 1297 (Eng), American Institute of Physics. In Table I, the centrifugal distortion consts. were reported as D_K , D_N . It is customary in the A-reduced Hamiltonian limit to report these consts. as Δ_K and Δ_N , resp. In Table VII, the $\theta_{\text{HNH}}=127.2^\circ$ angle should read $\theta_{\text{HNH}}=105.6^\circ$. The quoted angle from the DFT calcn. of Ref. 59 is actually the Ca-N-H angle.

c. A. 1997, 127, N 13

1995

F: CaNH₂

P: 3

6B1252. Исследование системы полос $A\{2\}B[2]-X\{2\}A[1]$ CaNH₂ с использованием оптической штарковской спектроскопии молекулярных пучков. A study of the $A\{2\}B[2]-X\{2\}A[1]$ band system of CaNH₂ employing molecular beam optical Stark spectroscopy / Marr A. J., Tanimoto M., Goodridge D., Steimle T. C. // J. Chem. Phys. - 1995. - 103, N 11. - С. 4466-4475. - Англ.

С помощью высокоразрешенной спектроскопии при лазерном возбуждении в присутствии изменяемого статич. электрич. поля исследована система видимых полос $0[0]\{0\}A\{2\}B[2]-X\{2\}A[1]$ в сверхзвуковых молек. пучках амида кальция CaNH₂. Определены спектроскопич. и вращат. параметры, которые обсуждены с привлечением спин-орбитального взаимодействия 2-ого порядка. Проанализированы особенности штарковского расщепления и найден электрич. дипольный момент, равный 1,74 Д. Библ. 34.



РМХ 1997

CaNH₂

DA. 39573

1998

Wai To Chan I.P. Hamilton,

compr.
napam
etc,
Di

Chem. Phys. Lett.,

1998, 297, 217-224

CaNCO

[OM. 39573]

1998

структур.
параметры, то л.

Wai To Chan, I.P. Hamil-

Di Chem. Phys. Lett.,

1998, 297, 217-224

CaNNN

DM-39573

1998

смысл.
названия,
и

Wai To Chan; I.P. Hamil-
ton,
Chem. Phys. Lett. 1998,
297, 217-224.

CaCN

[Om. 39573]

1998

смысл
параметр,
Di

Wai To Chan; I-P. Ha-
milton,

Chem. Phys. Lett. 1998,
297, 217 - 224

1998

 Ca^+-N $\text{Ca}^{2+}-\text{N}_2$

129: 335999x Theoretical investigation of the Ca^+-N_2 and $\text{Ca}^{2+}-\text{N}_2$ complexes. Kirschner, K. N.; Ma, B.; Bowen, J. P.; Duncan, M. A. (Department of Chemistry, Computational Center for Molecular Structure and Design, University of Georgia, Athens, GA 30602-2556 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1998, 295(3), 204-210 (Eng), Elsevier Science B.V.. The structures, harmonic frequencies and binding energies for the ground states of Ca^+-N_2 and $\text{Ca}^{2+}-\text{N}_2$ are computed at several theor. levels, including Moller-Plesset second-order perturbation with full electron correlation and d. functional theory. The charge-quadrupole interaction yields linear geometries as min. for both complexes, while the C_{2v} geometries are transition states. At the MP2 level, Ca^+-N_2 has a dissocn. energy (D_0) of 5.3 kcal/mol and a Ca^+-N bond distance of 2.78 Å. $\text{Ca}^{2+}-\text{N}_2$ has a dissocn. energy (D_0) of 23.8 kcal/mol and a shorter metal-ligand bond of 2.48 Å.

смыкка, Di,
 free
 charge,
 mol. param

C.A. 1998, 129, N 25

CaNH₂

1998

✓ 129: 60052k High-resolution visible laser spectroscopy of the $\tilde{B}^2B_1-X^2A_1$ transition of CaNH₂. Morbi, Zulfikar; Zhao, Chunfeng; Hepburn, John W.; Bernath, Peter F. (Department of Chemistry, Center for Molecular Beams and Laser Chemistry, University of Waterloo, Waterloo, ON Can. N2L 3G1). *J. Chem. Phys.* 1998, 108(21), 8891-8898 (Eng), American Institute of Physics. The $0_0^0 \tilde{B}^2B_1-X^2A_1$ band of CaNH₂ was recorded at high resolu. with a laser ablation mol. beam spectrometer. This $\tilde{B}^2B_1$ state is the last of the low-lying electronic states of CaNH₂ to be characterized. The pure precession model, which was previously used to describe the spin-rotation interactions in this family of mols. was used to interpret and correctly assign the spectrum. The detailed anal. of the high resolu. spectrum and energy level structure of the $\tilde{B}^2B_1$ state is presented.

CHKNP
HECOKORO
TAPPULL.

$\tilde{B}_1-X^2A_1$

CN 1998, 129, W5

Ca⁺N₂

1998

128: 223279k Photodissociation spectroscopy of the Ca⁺-N₂ complex. Pullins, S. H.; Reddic, J. E.; France, M. R.; Duncan, M. A. (Department of Chemistry, University of Georgia, Athens, GA 30602 USA). *J. Chem. Phys.* 1998, 108(7), 2725-2732 (Eng), American Institute of Physics. The weakly bound complex Ca⁺-N₂ was prepd. in a pulsed nozzle/laser vaporization cluster source and studied with mass-selected photodissocn. spectroscopy. The chromophore giving rise to the electronic transition is the ²P-²S at. transition of Ca⁺. The appearance of spin-orbit doublets in the vibrationally resolved spectrum, as expected for a ²Π_r-²Σ⁺ transition, confirms that the complex is linear. The electronic transition in the complex lies to the red of the at. resonance line indicating that the complex is more strongly bound in the excited state than in the ground state. The vibrationally resolved spectrum contains progressions in the Ca⁺-N₂ stretching mode and in a combination of this stretch with the N-N stretch. Extrapolation of the Ca⁺-N₂ stretch detcs. the excited state dissocn. energy to be D₀'=6500 ± 500 cm⁻¹, and an energetic cycle detcs. the ground state value to be D₀"=1755 ± 500 cm⁻¹ (5.02 kcal/mol). The ²Π_r(2,0,0)-²Σ⁺(0,0,0) vibronic transition was rotationally resolved yielding the bond lengths: r_{CaN} = 2.75 Å and r_{NN} = 1.15 Å for the ²Σ⁺ ground state; r_{CaN} = 2.48 Å and r_{NN} = 1.17 Å for the ²Π excited state.

$2\Pi_r \leftarrow 2\Sigma^+$

$\sim_{Ca-N},$
 $\sim_{N-N}, D_0$

C.A. 1998, 128, N18

CaNO₂

1998

Rodriguez - Santiago,
1998, et al.,

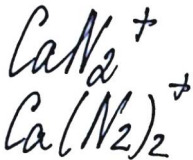
неприм.
распредел.

до;
структур;
д.

g. Phys. Chem. A 1998,
102 (3), 630 - 635

(all. BeNO₂; III)

1999



Электрон-
спектр,
основн. и
возв. состоян.

возв. сост., теор расч

С.А., 1999, 130, №23

130: 318055q The electronic spectra of CaN_2^+ and $\text{Ca}(\text{N}_2)_2^+$. Rodriguez-Santiago, Luis; Bauschlicher, Charles W., Jr. (Department de Quimica, Universitat Autonoma de Barcelona, Barcelona, Spain 08193). *Spectrochim. Acta, Part A* 1999, 55A(3), 457-466 (Eng), Elsevier Science B.V.. The ground and low-lying electronic states of CaN_2^+ were studied at several levels of theory. The results for the $X^2\Sigma^+$ state and the excited $(2)^2\Pi$ state, arising from occupying the Ca 4p orbital, are in good agreement with expt. The analogous states of $\text{Ca}(\text{N}_2)_2^+$ were studied using the same theor. approaches and predictions are made as to the changes caused by the addn. of the second N_2 ligand.

F: CaNH₂

P: 3

133:327018 The pure rotational spectrum of
CaNH₂ and CaND₂ (X 2A₁): Additional proof of
planarity. Brewster, M. A.; Ziurys, L. M.

Department of Chemistry, Department of
Astronomy, and Steward Observatory Tucson, AZ
85721, USA J. Chem. Phys., 113(8), 3141-3149
(English) 2000.

The pure rotational spectrum
of CaNH₂ in its X 2A₁ ground electronic state was
recorded using millimeter/submillimeter direct
absorption methods in the frequency range 320-537
GHz as well as that of CaND₂. The species were
created by Broida-Oven techniques. Eleven

2000

rotational transitions were obsd. arising from the $v = 0$ and $v_6 = 1$ states of CaNH_2 , and eight transitions were recorded for the $v_3 = 1$ and $v_4 = 1$ levels. For CaND_2 , eight transitions ($v = 0$) were also measured. For the majority of these transitions, K_a doublets corresponding to $K_a = 0-5$ were obsd. and fine structure splittings were resolved in every component. These spectra were analyzed using an S-reduced Hamiltonian; rotational, centrifugal distortion, and spin-rotation parameters were detd. for CaNH_2 , CaND_2 , and the three obsd. vibrationally excited states. An r_0 structure also was calcd. The data are consistent with Ca amide being a planar mol. with C_{2v} symmetry and having predominately ionic bonding, as indicated by previous optical studies.

F: CaNH₂

2000

P: 3

133:327018 The pure rotational spectrum of
CaNH₂ and CaND₂ (X 2A₁): Additional proof of
planarity. Brewster, M. A.; Ziurys, L. M.

Department of Chemisry, Department of
Astronomy, and Steward Observatory Tucson, AZ
85721, USA J. Chem. Phys., 113(8), 3141-3149
(English) 2000.

The pure rotational spectrum
of CaNH₂ in its X 2A₁ ground electronic state was
recorded using millimeter/submillimeter direct
absorption methods in the frequency range 320-537
GHz as well as that of CaND₂. The species were
created by Broida-Oven techniques. Eleven
rotational transitions were obsd. arising from the
 $v = 0$ and $v_6 = 1$ states of CaNH₂, and eight

transitions were recorded for the $v_3 = 1$ and $v_4 = 1$ levels. For CaND₂, eight transitions ($v = 0$) were also measured. For the majority of these transitions, Ka doublets corresponding to Ka=0- 5 were obsd. and fine structure splittings were resolved in every component. These spectra were analyzed using an S-reduced Hamiltonian; rotational, centrifugal distortion, and spin-rotation parameters were detd. for CaNH₂, CaND₂, and the three obsd. vibrationally excited states. An r₀ structure also was calcd. The data are consistent with Ca amide being a planar mol. with C_{2v} symmetry and having predominately ionic bonding, as indicated by previous optical studies.

CaN (м.п., D_o, I.P.)

2003

ОТТИСК 41707

M. Pelegriini, O.Roberto-Neto, F. B.C. Machando
Chem. Phys. Lett., 125, 7176-7177

**A theoretical study of the radiative transition
probabilities and lifetimes of the lowest quartet
states of CaN.**