

1972-1973

CO_2 ; CS_2 ; Na_2O ; OCS ;
 HCN ; SO_2 ; O_3 ; H_2O (cum. n.) $\overline{\text{X}} 3210$ 1972
11 11

Anderson A. B.,
J. Chem. Phys., 1972, 57, 1110, 4143-
- 4152 (amu.)

Theoretical approach to
potential energy functions
for linear AB_2 and ABC and
bent AB_2 triatomic molecules.

Be'Xuei, 1973, 7594 10



H_2S , H_2Se , H_2O ; SO_2 ; ClO_2 , N_2O , O_3
(м. н. проект) XI 3029 1972

Alice H., Bernard L.,
L. Natwilschen. a, 1972, 27,
N 4, 593-97

не в б-бах
и в ф. н. н.
12, 136

ЕСТЬ ф. н. н. н.

10

N_2O

1972

Andrews, J. C.

(снелкуп.)

"Austral J. Phys."

1972, 25, N3, 283-292.

сч. III каті.
/ CO, /

N_2O

Bahr J. L. et al. 1972

γ

η_i

J. Quant. Spectrosc. and
Radiat. Transfer, 12(1),
59.

(Coll. NO) III

N₂O

CHF₃

XIII - 2306

1972

(vi). 170770h Far-infrared absorption in nitrous oxide and fluoroform and its molecular interpretation. Baise, A. I. (Edward Davies Chem. Lab., Univ. Coll., Aberystwyth, Wales). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1972, 68(11), 1904-13 (Eng). A high pressure cell for spectroscopic studies was constructed with 7 mm z-cut cryst. quartz windows, to contain gas at ≤ 100 bar pressure, and to provide a variable sample thickness of ≤ 1.4 cm. The far-ir spectra ($\nu < 100 \text{ cm}^{-1}$) of N₂O and CHF₃ in the gaseous and liq. phases were obtained by Fourier spectroscopy using Michelson and lamellar grating interferometers. Spectral contours and integrated intensities in the gas phase agreed with theoretical calcns. In the liq. phase, the spectra indicated that the N₂O mols. undergo libratory motion, while the CHF₃ mols. show essentially free rotation.

C.A. 1972, 77, 126

N_2O

XIII - 2306

1972

CH_3F

4 Д448. Длинноволновое ИК-поглощение закиси азота и хлороформа и его молекулярная интерпретация. Baise A. I. Far-infrared absorption in nitrous oxide and fluoroform and its molecular interpretation. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1972, Part 2, 68, № 11, 1904—1913 (англ.)

спир

Получены ИК-спектры поглощения газообразных и жидких N_2O и CH_3F в области $8-100\text{ см}^{-1}$ с помощью фурье-спектрометров на базе интерферометров Майкельсона и с ламеллярной решеткой. Описана конструкция кюветы, рассчитанной на давл. ~ 100 атм с переменной толщиной оптич. слоя в интервале $0-1,39$ см. Наблюдаемая на спектре структура, связанная с интерференцией излучения, отраженного от поверхностей окон, сглажена при обработке результатов. Максимум полосы газообразного N_2O совпадает с рассчитанным для свободных ротаторов. Увеличение ее полуширины

(+1)

☒

ф. 1972

№ 4

связано с наложением индуцированного в столкновениях молекул спектра, максимум которого расположен выше. При переходе к жидкости максимум смещается на ~ 30 см^{-1} , наблюдается заметное поглощение выше 100 см^{-1} , что альтернативно отнесено либо к индукции спектра перекрыванием электронных оболочек, либо к поглощению за счет либрационного движения молекул. Отступление интенсивности полосы от квадратичного закона отнесено к влиянию тройных соударений. В случае CHF_3 изменения контура при переходе газ—жидкость незначительны, что указывает на сохранение свободного вращения молекул в жидкой фазе при комнатной т-ре. Небольшое отклонение зависимости интенсивности от линейного закона связано с наложением индуцированного спектра. Библ. 33. М. В. Тонков

N_2O

XIII - 2306

1972

9 Б237. Поглощение закиси азота и фтороформа в длинноволновой инфракрасной области и его интерпретация. Baise A. I. Far-infrared absorption in nitrous oxide and fluoroform and its molecular interpretation. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1972, Part 2, 68, № 11, 1904—1913 (англ.)

(v₁)

В области $8-100\text{ см}^{-1}$ методом Фурье-спектроскопии измерены ИК-спектры поглощения N_2O и CHF_3 в газ. и жидк. фазах. Для газ. фазы эксперим. контуры и интегральные интенсивности хорошо согласуются с теор. Для жидк. состояния полученные результаты в случае N_2O указывают на существование либрац. движений; в случае CHF_3 молекулы претерпевают в значительной степени свободное вращение. Б. В. Рассадин

Х. 1973. № 9

(+1)



N₂O

1972

✓ 90862v Infrared absorption bands of nitrous oxide. Burch, Darrell E.; Gryvnak, David A.; Pembroke, John D. (Aeronutronic Div., Philco-Ford Corp., Newport Beach, Calif.).

U.S. Nat. Tech. Inform. Serv., AD Rep. 1972, No. 749879, 87 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Govt. Rep. Announce. (U.S.)* 1972, 72(23), 67. All the ir absorption bands of N₂O that are significant in the earth's atm. are summarized. The information required to calc. the positions of most of the absorption lines is tabulated along with the intensities of the band systems. The required data on line positions that are not yet available are pointed out. Spectral plots of transmittance and of the absorption coeff. are included for several bands in the 530-760 and 1585-4000-cm⁻¹ ranges.

Chimp

C.A. 1973. 78 N14

N_2O

1972.

Спектр.

3 Д208. Теоретическая интерпретация оптических и электронных спектров многоатомных молекул. Ч. III. N_2O и обнаружение резонансных явлений в В-области при 6,8 эв. Chutjian Ara, Segal Gerald A. Theoretical interpretation of the optical and electron scattering spectra of polyatomic molecules. III. N_2O and the discovery of resonant phenomena in the В region at 6.8 eV. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 8, 3069—3082 (англ.)

В рамках вариационно-формализма вычислены волн. функции и потенц. кривые нижних электронно-возбужденных состояний молекулы N_2O . Подчеркивается, что хотя расчеты могут содержать определенные неточности, их коррекция с помощью эксперим. данных может привести к детальному пониманию локализации и свойств симметрии электронных состояний N_2O и их роли в процессах

ф. 1973. № 3.

возбуждения и распада этой молекулы. Для этой цели представлен и подробно исследован обширный эксперим. материал, касающийся спектров оптич. поглощения, данных по рассеянию электронов и фотолизу молекулы N_2O . Совместный анализ теоретич. и эксперим. результатов позволил установить локализацию $1^3\Pi$ состояния, ответственного за термич. разложение N_2O и интерпретировать слабые диффузные колебательные полосы в V -области поглощения (около 6,8 эв), наложенные на $1^1\Pi$ континуум. Эти полосы являются следствием резонансов между уровнями континуума $1^1\Pi$ состояния и связанными состояниями $1^1\Sigma^-$ терма, в который вложен $1^1\Pi$ терм. Электронное смешивание $1^1\Pi$ и $1^1\Sigma^-$ состояний обязано деформационным колебаниям молекулы N_2O . Рассмотрено также поведение электронных термов и их связь с моно- и бимолекулярными реакциями с участием N_2O для других областей спектров поглощения. Для дальнейшего подтверждения полученных результатов предложены различные эксперим. тесты. Ч. II РЖФиз, 1971, 11D226.

А. Воронин

№20

1972

7 Б24. Теоретическая интерпретация оптических спектров и спектров рассеяния электронов для многоатомных молекул. III. N_2O и резонансные явления в В-области вблизи 6,8 эв. Chutjian Ara, Segal Gerald A. Theoretical interpretation of the optical and electron scattering spectra of polyatomic molecules. III. N_2O and the discovery of resonant phenomena in the В region at 6.8 eV. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 8, 3069—3082 (англ.)

Спектр

Сопоставлены опытные данные по различным электронным состояниям N_2O с результатами расчетов 17 состояний (при различных конфигурациях ядер) в рамках метода ССП МО ЛКАО в валентном приближении ЧПДП. Расчет возбужденных состояний выполнен с параметрами для основного состояния. В случае вырождения расчет проводился для изогнутой конфигурации с послед. экстраполяцией на линейную конфигурацию. Для состояний $2^1\Pi$, $2^3\Pi$ и $2^1\Sigma^+$ не была достигнута сходимость процедуры ССП и расчеты выполнялись методом учета взаимодействия со всеми однократно возбужденными конфигурациями. Приведены вертикальные энергии переходов, а для части переходов — силы осцилляторов. Представлена зависимость энер-

Х. 1973.

№7

гий МО и полных энергий различных состояний от вращательного угла NNO. Дана качеств. картина потенциальных кривых, причем соотв.щие диссоциац. пределы вычислялись из спектроскопич. данных. Показано, что известный набор опытных данных может быть объяснен на основе полученных расчетных результатов. Напр., образование N_2O при р-ции NO и N включает запрещенный (по спинну) переход $^3\Pi \rightarrow ^1\Sigma^+$ и поэтому маловероятно, слабое поглощение при 4,28 эв обусловлено переходом в $^1\Delta$ -состояние; поглощение при 4,54 эв обусловлено вибронно-разрешенным переходом $^1\Sigma^- \leftarrow ^1\Sigma^+$ и т. п. Непрерывное поглощение в области $\sim 9,5$ эв связывается с переходом в рассчитанное состояние $2^1\Sigma^+$. Предположено сильное вибронное взаимодействие $1^1\Pi$ - и $^1\Sigma^-$ -состояний, объясняющее резонансные эффекты в В-области ($\sim 6,8$ эв): уровни непрерывного спектра несвязанного состояния $^1\Pi$ резонируют с колебательными уровнями связанного состояния $^1\Sigma^-$. Для обнаружения ненаблюдавшихся состояний (в том числе $^1\Sigma^-$) предложено использовать эксперименты по рассеянию электронов. Сообщ. II см. РЖХим, 1971, 21В164.

Н. Ф. Степанов

CH_4 ; H_2O ; Na_2O ; CH_3Br (схемы с высо-
ким разрешением) 1972

Guelachvili G., VI 3903

New. Rev. Opt. Appl., 1972, 3, N6, 317-36
(франц.)

Fourier spectroscopy with 10^6 point
transformations. II. Vacuum and
automation. 9

10 (Ф) ~~(англ. оригинал)~~ СА, 1973, 78, N18, 117504и

N₂O

(11)

2 Д430. ИК-спектры изолированной в матрице закис азота. Hisatsune I. C. Infrared spectrum of matrix-isolated nitrous oxide. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 7, 2631—2636 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения N₂O в матрицах KCl, KBr, KJ, NaCl, NaBr и NaJ при т-рах 90—320° K в области основных колебаний N₂O. Образцы приготовлены температурным разложением запрессованных в матрицу нитрата аммония или гидрохлорида гидроксиламмония. Произведена идентификация полос. При комнатной т-ре полосы одиночные, их частоты близки частотам газовой фазы. С понижением т-ры полосы сужаются и сдвигаются к высоким частотам. Полоса ν_3 при 90° K состоит из трех компонент, связанных с множественностью центров захвата молекулы N₂O матрицей. При повышении т-ры интенсивности полос перераспределяются, изменения интенсивности обратимы. По температурной зависимости интенсивности определены разность энергий молекулы в двух центрах и изменение энтропии при перестройке. Библ. 11.

М. В. Тонков

Ф. 1973. №2

1972

XIII-2243

N₂O

XIII - 2243

1972

(u.n)
132832x Infrared spectrum of matrix-isolated nitrous oxide. Misatsune, I. C. (Dep. Chem., Pennsylvania State Univ., University Park, Pa.). *J. Chem. Phys.* 1972, 57(7), 2631-6 (Eng). N₂O, generated by the in situ thermal decompn. of HONH₂.HCl or NH₄NO₃, was isolated in some pressed alkali halide matrixes. Its 3 ir-active fundamentals appeared at room temp. as single

peaks and without the gas-phase rotational structures. Cooling of the host matrix caused these bands to sharpen and to shift to higher frequencies. At any given temp., however, the peak frequencies were essentially independent of the host matrix. The temp. dependence of the most intense ν_3 fundamental was examd. in detail, and the results indicated that there were 2 dominant trapping sites for N₂O in pressed KCl, KBr, and KI matrixes. Furthermore, the relative concns. of N₂O occupying these sites changed reversibly as the temp. was varied from $\sim 90^\circ\text{K}$, the lower limit, to $>200^\circ\text{K}$. From these concn. changes, it was deduced that the transfer of a N₂O mol. from the low-temp. trapping site to the high-temp. site was an endothermic process by 1.2 ± 0.2 kcal/mole and was accompanied by a large increase in entropy of 9.0 ± 1.0 entropy units in all 3 K halide matrixes.

C.A. 1972, 47, N20

N_2O

(ν_i)

7 Б265. Спектр инфракрасного поглощения закиси азота, изолированной в матрице. Hisatsune I. C. Infrared spectrum of matrix-isolated nitrous oxide. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 7, 2631—2636 (англ.)

Измерены спектры ИК-поглощения N_2O , изолированной в матрицах KBr , KCl , KJ , $NaCl$, $NaBr$ и NaJ . В спектрах обнаружены все активные колебания N_2O : ν_1 , ν_2 и ν_3 (1294, 589 и 2240 cm^{-1} в матрице KCl). Показано, что при понижении т-ры полуширины полос поглощения уменьшаются и сами полосы сдвигаются в область высоких частот. Отмечено, что природа матричного в-ва не влияет на частоты основных колебаний. По данным измерений т-рой зависимости полосы ν_3 обнаружено наличие двух основных положений молекулы N_2O в крист. решетках KCl , KBr и KJ . Относит. содержание молекул, занимающих эти положения обратимо изменяется при понижении т-ры от 200° до 90° K. Этот процесс экзотермичен с выделением $1,2 \pm 0,2$ ккал/моль.

Г. Кузьянц

1972.

XIII - 2243

X. 1973. № 7

N₂O

2 Д370. «Запрещенный» характер переходов в N₂ и OCS, проявляющихся в поглощении вблизи 2000 Å. In: K. K. Inference of «forbidden character» in the 2000 Å transitions of the N₂O and OCS molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 42, № 3, 575—576 (англ.)

1972

В спектрах поглощения молекул N₂O и OCS в области 2000 Å существуют слабые диффузные полосы, интенсивность которых существенно зависит от т-ры. В рамках теории Герцберга—Теллера явление роста интенсивности полос запрещенных переходов с увеличе-

нием т-ры объясняется перемешиванием электронных состояний с участием колебательных уровней. Показано, что увеличение интенсивности полосы 2250 Å OCS на 50% для температурного интервала 295—577° К и полосы 1850 Å N₂O на 100% для 293—773° К обусловлено влиянием деформационных колебаний ν_2 на перемешивание основного $^1\Sigma$ и возбужденного $^1\Pi$ состояний. В. Александров

Библ. 13.

Ф. 1973. N2

(1/1)

6600-2099
III



N₂O

2 Б170. Влияние «запрещенного характера» на переходы молекул N₂O и OCS в области 2000 Å. In-
nes K. K. Inference of «forbidden character» in the
2000 Å transitions of the N₂O and OCS molecules. «J.
Mol. Spectrosc.», 1972, 42, № 3, 575—576 (англ.)

Обсуждены причины больших т-рых эффектов в значениях интенсивностей запрещенных электронных переходов в молекулах N₂O и OCS, наблюдавшихся в районе 1850Å и 2250Å соотв. Увеличение интенсивностей полос для OCS на 50% при повышении т-ры от 295 до 577°K и для N₂O на 100% при повышении т-ры от 293 до 773°K объяснено на основе теории Герцберга—Теллера. Сделан вывод о том, что интегральная интенсивность всей системы полос может зависеть от т-ры в том случае, когда появляются активные колебания в смешанных электронных состояниях. При этом часть интегральной интенсивности, индуцированная колебаниями, будет зависеть от длины волны (но не степени вырождения) активного колебания и абс. т-ры T , т. е. $f(T) = f_0 + f_1 \cdot \text{cth}(hc\bar{\nu}/2KT)$, здесь f_1/f_0 представляет отношение при 0°K колебательной интенсивности к чисто элек-

1972.

6602-2099
XIII

(+1)

☒

эл. перех

X. 1973.
N2.

тройной интенсивности. На примере нафталина ($f_0 = 0$, $\bar{\nu} = 506 \text{ см}^{-1}$) показано, что при $f_1/f_0 = 3,4$ наблюдается хорошее соответствие с теорией, и она может быть использована применительно к более сложному случаю — молекулам N_2O и OCS , в к-рых отношение f_1/f_0 достаточно велико при очень небольшой чисто электронной интенсивности. Поскольку электронные переходы в этих соединениях являются запрещенными, то либо должна заметно измениться геометрия, либо произойти смещение двух электронных переходов с появлением одной полсы в спектре. В соответствии с теорией, в принципе, активными могут быть любые формы колебаний, однако, поскольку они не поддаются идентификации, то невозможно установить природу геометрич. изменений. Тем не менее, предсказание теории относительно колебательно-индуцированной природы интенсивностей полос в молекулах N_2O и OCS качественно подтверждено обнаружением сдвига максимумов полос в этих соединениях к более низким частотам с повышением т-ры. Так, у OCS при 295°K максимум находится при 2225 A , а при 577°K при 2275 A . Сделано заключение о том, что указанный эффект должен приводить к переоценке эксперим. значений интенсивностей при т-рых измерениях, в к-рых исследуется только длинноволновая часть спектра.

Е. С. Ефремов

N_2O

1972

11726g Band intensity and line half-width measurements in nitrous oxide near 4.5μ . Lowder, J. E. (Dep. Aerosp. Mech. Eng. Sci., Univ. California, La Jolla, Calif.). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1972, 12(5), 873-80 (Eng). Integrated band intensities of the N_2O ν_3 fundamental and the overlapping ($\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$) band were measured as 1285 and $176 \text{ cm}^{-2} \text{ atm}^{-1}$, resp. at 300°K . N-broadened half-widths of rotational lines in the ν_3 fundamental were measured and are compared with previous measurements and theoretical calcns.; agreement with the calcns. of Hirono (which are based on the Anderson-Tsao-Curnutte theory) is within the limits of exptl. error up to a rotational quantum no. of ~ 40 .

C.A. 1972 74 2

N₂O

1972

/ 10 Д305. Измерения интенсивности и полуширины линий ($00^{\circ}2-00^{\circ}0$) полосы N₂O. Margolis Jack S. Intensity and half width measurements of the ($00^{\circ}2-00^{\circ}0$) band of N₂O. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1972, 12, № 4, 751—757 (англ.)

(у)

Произведены измерения интенсивности и полуширины линий ($00^{\circ}2-00^{\circ}0$) полосы N₂O в поглощении. Выбранная полоса N₂O лежит вне области поглощения атмосферных газов, что позволяет использовать ее для изучения окиси азота, находящейся в атмосфере. Измеренные значения сил осцилляторов линий использованы для определения параметров дипольного момента перехода между состояниями молекулы. Измерения полуширины линий проведены как в собств. газе, так и в атмосфере азота. Измеренные величины уширения при столкновениях хорошо совпадают с результатами расчетов, проведенных предыдущими исследователями. Библ. 8. А. П.

Р. 1972.10

NO, He, Ne, H₂, CO, NO, CO₂, H₂O, NH₃, e (Kp) 1972
XI 2985 NO₃ (Ac-) 2 13 14

McFarland M., Drunkin D. B.

Fehsenfeld F. C., Schmelz köpf A. Z.,
J. Chem. Phys., 1972, 56, 15, 2358-

-2364 (atm.)

Collisional detachment
studies of NO⁻

Biekmann, 1972, 165256

W. D.

(up)

20711.8210

Ch1.1.1, Ph

HCP; HCN; NNO (ст. 11)
XIII 2109 6615
ссыл.
ностр.
раскр.)

Mohan N.; Müller A. A note on the
Green's function analysis of substituted
and perturbed molecules. Application to
some linear XYZ type molecules. "J.
Mol. Struct.", 1972, 12, N 2, 275-281
(англ.)

646 647

6 5 3

0000

ВНИИТ

1972

XIII - 2071

N₂O, CO₂, COS, CS₂ & gp. (can. user.)

Smith D. F., Overend J.,
J. Chem. Phys., 1972, 57, n1, 523-529

10



cc17 apr

N₂O

XIII - 20, 44

1972

5 Д344. Ангармонические силовые постоянные N₂O, определенные по ИК-спектрам в матрицах. Smith D. Foss, Jr, Overend John, Spiker Robert C. Andrews Lester. Anharmonic force constants of N₂O from matrix infrared spectra. «Spectrochim. acta», 1972, A28, № 1, 87—93 (англ.)

(сн.п.)

Получены ИК-спектры N₂O различного изотопного состава в матрице из азота при t-ре 15° K в области 500—3500 см⁻¹. По наблюдаемым частотам определены энергии колебат. уровней и вычислены ангармонич. силовые постоянные при кубич. членах и членах четвертой степени в разложении потенц. энергии по норм. координатам. Сравнение с данными по спектрам газа показывает, что для учета взаимодействия N₂O с матрицей достаточно изменить только гармонич. часть выражения для потенц. энергии. Библ. 11. М. В. Тонков.

Ф. 1972.5D

Ni. 20

XII - 20 Feb

1972

(Vi)

(Cu nact)

(65952a) Anharmonic force constants of nitrogen oxide [N_2O] from matrix infrared spectra. Smith, D. Foss, Jr.; Overend, John; Spiker, Robert C.; Andrews, Lester (Sch. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, Minn.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1972, 28(1), 87-93 (Eng). Infrared spectra of $^{14}N_2^{16}O$, $^{15}N_2^{16}O$, $^{14}N^{15}N^{16}O$, $^{15}N^{14}N^{16}O$ and $^{14}N_2^{18}O$ were measured with the mol. isolated in a solid N_2 matrix. The wavenos. of the obsd. fundamentals, overtones and combinations were used to det. the force const. in an anharmonic force field which included cubic and quartic force const. The force const. detd. from the matrix data were compared with the corresponding ones detd. from the gas-phase spectra including rotational const. The effect of the matrix cage may be represented by small (a few per cent) perturbations on the intramol. force const. detd. from the isolated mol. in the gas phase.

C.A. 1972. 76. 12

N_2O

9 Д912. Спектроскопия высокой точности излучения лазера N_2O при переходе $00^0_1-10^0_0$ с помощью смешивания частот на ИК-точечном контактном диоде. Sokoloff D. R., Javan A. Precision spectroscopy of the N_2O , $00^0_1-10^0_0$ laser band by frequency mixing in an infrared, metal-metal oxide-metal point contact diode. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 8, 4028—4031 (англ.)

(ν_c , см.)

Измерены частоты генерации лазера N_2O на колебательно-вращательных линиях P - и R -перехода $00^0_1-10^0_0$ путем сравнения с известными частотами линий лазера CO_2 . Смещение излучения лазеров производилось на точечном контактном диоде, разностная частота измерялась радиотехнич. методом. Приведены частоты линий N_2O с точностью не хуже ± 25 Мгц. Определены частота колебательного перехода с точностью 10^{-4} и вращательные постоянные молекулы В и D для уровней изученного перехода. Постоянная H не превышает

М. В. Тонков

Ф. 1972. 99

1972

1972-2049
XIII

N₂O

XIII-2072

1972

18 Б238. Точное измерение частот линий лазерной полосы 00°1—10°0 N₂O по смещению частот в инфракрасном диоде типа металл — окись металла — металл с точечным контактом. Sokoloff D. R., Javan A. Precision spectroscopy of the N₂O, 00°1—10° laser band by frequency mixing in an infrared, metal—metal oxide—metal point contact diode. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 8, 4028—4031 (англ.)

Построена установка (приведена принципиальная схема) для измерения частот ИК-переходов молекул методом смещения двух лазерных частот (одна из лазерных частот известна) в ИК-диоде типа металл — окись металла — металл с точечным контактом, и сравнения разностной частоты с частотой клистрона. Измерены абсолютные частоты 27 линий P- и R-ветвей колебательного перехода.

X. 1972. 20¹⁸

да $00^{\circ}1-10^{\circ}0$ N_2O -лазера: частоты N_2O -лазера смешивались с известными частотами CO_2 -лазера, а разности лазерных частот сравнивались с частотами клистрона К-полосы в основной моде и во 2-й и 3-й гармониках. Относит. ошибка измерений составляет $\sim 10^{-6}$, частота центра полосы $00^{\circ}1-10^{\circ}0$ равна $28\,146\,139 \pm 30$ Мгц (ИК-измерения дают $28\,145\,990 \pm 188$ Мгц). Из полученных частот вычислены значения вращательной и центробежной постоянных N_2O : $B_{001} = 12458,20 \pm 0,08$ Мгц, $B_{100} = 12508,88 \pm 0,10$ Мгц, $D_{001} = 5,42 \pm 0,17$ Кгц, $D_{100} = 5,28 \pm 0,21$ Кгц.

М. Р. Алнев

N_2 ; CO; CO_2 ; N_2O (сложная молекула) 1972

Streets D.G., Potts A.W., Price W.C.,

Int. J. Mass Spectrom. and Ion

Phys., 1972, 10, N_2 , 123-131 (англ.)
XIII 2055

Electron-molecule interactions
in photoelectron spectroscopy.



Ref. 1973, 3D397

10



1972

NO
2

13 F229. Радиационные свойства в инфракрасной области закиси азота. Tien C. L., Modest M. F., McCreight C. R. Infrared radiation properties of nitrous oxide. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1972, 12, № 2, 267—277 (англ.)

В области основных колебаний ν_3 (4,5 мк) и ν_1 (7,8 мк) измерено поглощение газ. закиси азота N_2O при t -рах 295° и 500° К. С использованием эльзассеровской модели получены спектральные параметры для полос ν_3 и ν_1 ; отмечено, что эта модель дает лучшее совпадение с эксперим. данными, нежели статистич. модель. Измерены



X. 1972. 13

также интегральные интенсивности, на основании к-рых рассчитаны параметры полос в приближении экспоненциальной широкополосной модели Эдвардса: для полосы ν_3 $C_1[\text{см}^{-2}\text{атм}^{-1}] = 2035 (T_0/T)$; $C_2[\text{см}^{-3/2}\text{атм}^{-1/2}] = 161$; $C_3[\text{см}^{-1}] = 22 (T_0/T)^{1/2}$; $n=0,6$; $B=1,12$; для ν_1 соотв. $270(T_0/T)$; 67 ; $18,5(T_0/T)^{1/2}$; $0,6$; $1,12$ ($T_0=273^\circ\text{K}$). Построены теор. кривые суммарной испускающей способности N_2O при 300° и 500°K для оптич. длин пути от $0,01$ до $10 \text{ см} \cdot \text{атм}$.

Б. В. Рассадин

N₂O

1972

106302j Relative intensity calculations for nitrous oxide. Young, L. D. Gray (Jet Propul. Lab., California Inst. Technol., Pasadena, Calif.). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1972, 12(3), 307-22 (Eng). A tabulation of calcd. rotational line intensities, relative to the integrated intensity of a vibration-rotation band, is given for $\Sigma-\Sigma$, $\Pi-\Sigma$, $\Sigma-\Pi$, $\Pi-\Pi$, and $\Delta-\Pi$ transitions of $^{14}\text{N}_2^{16}\text{O}$. These calcns. were made for a temp. of 250°K (typical for the earth's atm.) and for 300°K (representative of lab. conditions). A summary of band-intensity measurements is also given.

C.A. 1972 76-18

CH_4 ; H_2O ; CO ; CO_2 ; C_3O_2 ; CH_2O ; N_2 ; NH_3 ; 1973
 N_2O ; CH_3CN (2i, I, parei) xi 3468

Aarons L. J., Guest M. F., Hall M. B.,
Hiller I. H.,

J. Chem. Soc. Faraday Trans.,
1973, Part 2, 69, N4, 563-68

10 (CP)

8

PX 73

40125.8196

Ch, TE

№20

1973

30066

3178

Austin J.M., Smith A.L.S. Decomposition
of N_2O in a glow discharge. "J. Phys. D:
Appl. Phys.", 1973, 6, N 18, 2236-2241

(англ.)

0030

015 0170

ВИНИТИ

LiH ; BH ; BH_3 ; BF ; CH_4 ; CH_2NH ; HCN ;
 CO ; N_2 ; HN_2^+ ; N_2O ; HF ; Li_2 ; BeH_2 ; BH_4^- ;
 BH_3 ; B_2H_6 ; CH_3^+ ; C_2H_6 ; C_2H_4 ; C_2H_2 ;
 C_3H_6 ; H_2CO ; HCOOH ; HCOF ; NH_3 ; H_2O ; H_2O_2

1973
 вед. ст. р. р.

Avdeef S., Fackler J. P., Jr. 18 4216
 Inorg. Chem., 1973, 12, N3, 713-716

(arise)
 Computer generation of cubic
 molecular symmetry orbitals.

J. Chem. Phys., 1973, 16514

10. ③ 3 10-10-73

30905.6116
Ex-AR/KP-2,
Ph, MGU, TE

N₂O

38100

23-1673

Bernard D.J., Benson R.C., Walker R.E.
N₂O pure chemical cw flame laser.

"Appl. Phys. Lett.", 1973, 23, N2, 82-84

(англ.)

0957 МИК

938

939

0950

ВИНИТИ

№20

[Оммука 12692]

1973

Бернзеб В.В. и др.

и.р. череп

в-п-рах

Да и др.

Д.

Оммука и черепов,.

1973, 35, том 2,

277-82.

N₂O

1973.

large
high
precision

142008t. Laser source spectroscopy. iv. Application of the Anderson theory to the line width calculations of the $10^0 0-00^0 1$ transition of nitrous oxide. Influence of octupole on the determination of the quadrupole moment of nitrous oxide. Boulet, C.; Lacombe, N.; Isnard, P. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris VI, Orsay, Fr.). *Can. J. Phys.* 1973, 51(6), 605-9 (Fr). From the anal. of the available exptl. results, a vibrational dependence of N₂O line widths was shown, which can be explained, by applying the Anderson-Tsao-Curnutte theory. But no dependence on v of any of the mol. parameters was deduced. The effect in the detn. of the quadrupole moment of assuming a nonvanishing octupole moment for N₂O was shown.

C.A. 1973. 78 v. 22

N₂O

1973

17 Б259. Спектроскопия с использованием лазерного источника. IV. Применение теории Андерсона к вычислению ширины линий перехода 10^0-0-00^1 N₂O. Влияние октуполя на определение квадрупольного момента N₂O. Boulet C., Lacombe N., Isnard P. Spectroscopie par source laser. IV. Application de la théorie d'Anderson au calcul des largeurs des raies de la transition 10^0-00^1 de N₂O. Influence de l'Octupôle sur la détermination du moment quadrupolaire de N₂O. «Can. J. Phys.», 1973, 51, № 6, (франц., рез. англ.)
На основании анализа лит. данных для переходов 10^0-00^1 , 00^0-02^1 и 00^0-00^2 N₂O (I) установле-

X. 1973 N 17

на зависимость от колебательных квантовых чисел V ширины линий вращательной структуры I . Отмечено, что эта зависимость может быть объяснена с использованием теории Андерсона — Цао-Кэрнатта, однако простая колич. зависимость молек. параметров от V , по-видимому, установлена быть не может. Исследовано влияние принятого октупольного момента Ω I на определяемую величину квадрупольного момента θ и обнаружена следующая зависимость величины $(0 \times 10^{26}$ эл. ст. ед.) I от принятой величины $\Omega(DA^2)$: $\Omega=0$, $\theta=3,5$; $\Omega=6$; $\theta=3,3$; $\Omega=12$, $\theta=3$. А. П. Александров

N₂O

1973

Brown R.D., Williams G.R.

"Austral. J. Chem." 1973, 26, N5, 921-925.

исслед.
по азоту-
оксиду.

● (см. CO; III)

H_2O ; NH_3 ; HCN ; H_2CO ; CO_2 ; N_2O ; OF_2 ; O_3 ; ONF (м.п., реол. см'рукт. рачеи) 1973
Burden F.R., Hart B.T. XI
3666

Austral. J. Chem., 1973, 26; N7, 1381-
- 1393 (англ.)

Small Gaussian basis sets for
molecular calculations. II. Effect
of basis set size of the calcula-
ted wavefunction and a useful
GTO basis set.

Pot. Lum., 1974, 4530

10 9

1973

10 B972. Одновременное или селективное испускание N_2O и CO_2 в лазере на газовом потоке. Capitani Robert, Garnier Jean-Pierre. Emission simultanée ou sélective de N_2O et CO_2 dans un laser à flux gazeux. «C. r. Acad. sci.», 1973, 277, № 24, B715—B718 (франц.)

Изучали спектры лазерного испускания газовых потоков $CO_2-N_2O-N_2-He$, возбуждаемых электрич. разрядом (10 кв; 25 ма) в оптич. резонаторе длиной 2,4 м. Длина разрядной трубки 2,1 м, расстояние между Э $\sim 1,9$ м. Во всех газовых смесях доля N_2 составляла 80%, отношение $r = [N_2O]/([N_2O] + [CO_2])$ варьировали от 0 до 100%. Регистрировали интенсивности линий от $P(12)$ до $P(24)$ полосы $00^0_1 \rightarrow (10^0_0 - 02^0_0)_1$ CO_2 ($940,80 - 951,44$ см $^{-1}$) и линий от $P(13)$ до $P(25)$ полосы $00^0_1 \rightarrow (10^0_0 - 02^0_0)$ N_2O ($917,17 - 927,93$ см $^{-1}$). При $r = 0 - 18,4\%$ наблюдаются только линии CO_2 , при $r > 65,3\%$ только линии N_2O , а при $r = 25,5 - 64,3\%$ одновременно наблюдаются линии и CO_2 , и N_2O . Таким образом, испускание CO_2 может отсутствовать даже в

N₂O

Di; m.m.

X. 1974
N 10

смесях, где его парц. давл. превышает давл. N_2O .
 Предположено, что эффект связан с процессом переноса энергии типа $CO_2(X) + N_2O(00^00) \rightleftharpoons CO_2(00^00) + N_2O(X) + \Delta E$, где X — уровень (00^01) или (10^00) . Отмечено, что присутствие N_2O в смесях, где генерирует только CO_2 , повышает интенсивность и стабилизирует линию $P(16)$ спектра CO_2 , а присутствие CO_2 в смесях, богатых N_2O , стабилизирует линию $P(16)$ N_2O . Эффект объясняется переносом вращательной энергии

между сильно связанными уровнями $[10^00-02^00]_1$ молекул CO_2 и N_2O : $CO_2 (J=16) (v_1) + N_2O (J=16) (v_2) \rightleftharpoons CO_2 (J=4) (v_3) + N_2O (J=22) (v_4) + 0,69 \text{ см}^{-1}$, где $v_1=1494,32$; $v_2=1397,85$; $v_3=1395,99$; $v_4=1495,49 \text{ см}^{-1}$. Таким образом, в зависимости от τ может наблюдаться как суммарное, так и селективное лазерное испускание компонентов газовой смеси; причем на испускание данного компонента влияет присутствие другого компонента. Одно из условий этого эффекта — перекрывание вращательно-колебательных уровней, участвующих в лазерном эффекте.

В. Е. Скурат

N₂O

1973

7 B1203. Передача колебательной энергии в закиси азота, возбужденной на колебательный уровень (0,0°,1). Chakroun Annie, Muer, Margottin-Maclou Monique, Gueguen Henri, Doyennette Lucien. Transferts d'énergie vibrationnelle dans le protoxyde d'azote excité sur le niveau de vibration (0,0°,1). «C. r. Acad. sci.», 1973, 277, № 15, B423—B426 (франц.)

передача
колебательной
энергии

Путем лазерного возбуждения колебательного уровня (0, 0°, 1) молекул N₂O и послед. регистрации флуоресценции со всех состояний ($m, n^I, 1$), за исключением состояния (0, 0°, 1), исследована кинетика заселения этих состояний в результате квазирезонансного обмена энергии при столкновениях $N_2O(m, n^I, 1) + N_2O(m', n'^I, 0) \rightleftharpoons N_2O(m, n^I, 0) + N_2O(m', n'^I, 1)$. Для уменьшения дезактивации на стенках в кач-ве буферного газа использовался Kr, а отфильтрование компоненты (0, 0°, 1) → (0, 0°, 0) в спектре флуоресценции осуществлялось путем пропускания излучения через

X. 1974 N 7

кювету с N_2O . Во всем исследованном интервале t -р (500—900° K) интенсивность флуоресценции приближается к асимптотич. значению экспоненциального с характеристическим временем, отрицательно зависящим от t -ры. Интегрирование системы кинетич. уравнений для процессов указанного выше типа с константами скорости, рассчитанными в предположении диполь-дипольного $V-V$ -обмена, дает также приблизительно экспоненциальную кинетику с характеристич. временем, близким к эксперим. величине. Е. И. Дашевская



N_2O

Оттиск 1319

1973

2 Д403. Длинноволновое ИК-поглощение закиси азота. Copeland T. G., Cole R. H. Far infrared absorption and quadrupole moment of nitrous oxide. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 21, № 2, 289—290 (англ.)

Выполнен анализ получения величины квадрупольного момента Q N_2O из квадратич. члена в зависимости интенсивности длинноволн. поглощения от плотности. Расчет проведен с учетом квадрупольных взаимодействий, не учтенных ранее в ф-ции парного распределения, основанной на потенциале Леннарда-Джонса. Полученный результат $Q=5,17$ лучше согласуется с результатами других измерений. Отмечена возможная ошибка в определении квадратичного члена интенсивности; ее учет дает еще лучшее согласие. Библ. 8.

М. В. Тонков

И.Р. Ноглаш

ф 1974 № 2

N_2O

1973

(ν_i)

71818q Vibrational luminescence of nitrous oxide excited by an electric discharge. Farrenq, Robert; Gaultier, Daniel (Lab. Infrarouge, Univ. Paris VI, Orsay, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1973, 276(23), 859-62 (Fr). The spontaneous emission spectra ($2171-2193\text{ cm}^{-1}$) of N_2O-N_2 gas mixts. excited by a continuous elec. discharge were recorded and analyzed. The intensities of 15 vibrational bands of N_2O were measured and allowed calcn. of the populations of the rotational-vibrational levels involved in the transitions. Results confirmed a Boltzmann distribution of rotational levels with a rotational temp. (T_R) of 350°K . For each mode, the populations of the lowest vibrational levels follow the classic scheme: a Boltzmann equil. in the ν_1 mode defining a vibrational temp. of 1320°K ; an equil. in the ν_1 and ν_2 modes with a vibrational temp. of 350°K such that $T_R = T$ (translational). For levels involving 4 vibrational quanta, populations were much larger than predicted by extrapolation of previous results.

C. H. 1973 YGN/12

N₂O

Halogen w.g. 1973

элементар
соединения

"J. Chem. Phys."
1973, 58, N4, 1569-1591

(Li-Ham III)

40207.60 71

Ph, TE, MGU

N₂O

30063

1973

1693

Hall Richard I., Chutjian Ara, Trajmar
Sandor. Electron impact excitation and
assignment of the low-lying electronic
states of N₂O. "J.Phys.B: Atom. and Mol.
Phys.", 1973, 6, N12, L365-L368.

(англ.)

0039 БМК

025

026

032

ВИНИТИ

№ 20

оттиски 1693

1973

($T; \epsilon_i$)

ф. 1974
N 5

5 Д301. Возбуждение электронным ударом и отождествление низколежащих электронных состояний N_2O . Hall Richard I., Chutjian Ara, Trajman Sandor. Electron impact excitation and assignment of the low-lying electronic states of N_2O . «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1973, 6, № 12, L365—L368 (англ.)

Получены энергетич. спектры рассеяния электронов на молекулах N_2O в области потерь 5—10 эв при углах рассеяния 20, 30, 90 и 130° и остаточной энергии электронов 7 эв, а также при угле рассеяния 90° и остаточной энергии электронов 10, 2, 1, 0,6 и 0,2 эв. Варьирования энергии и угла рассеяния позволили увеличить чувствительность регистрации запрещенных переходов, напр. по спину или правилам симметрии. Помимо наблюдавшихся ранее оптич. переходов из основного состояния с энергиями 6,7, 8,5 и 9,6 эв в области 5—10 эв обнаружены новые переходы ${}^1\Delta-\tilde{X}{}^1\Sigma^+$ (5,6 эв), ${}^1\Sigma^--\tilde{X}{}^1\Sigma^+$ (6,2 эв) и $2{}^3\Pi-\tilde{X}{}^1\Sigma^+$ (8 эв). Отнесение проведено на основании полуэмпирич. расчетов для энергии вертикальных переходов в N_2O по методу ЧПДП МО. Библ. 16.

В. А.

30906.8211

TE, Ch, Ph

N₂O

40892

23-1560

Hemsworth R.S., Rundle H.W., Bohme
D.K., Schiff H.I., Dunkin D.B., Fehsen-
feld F.C. Determination of proton affi-
nity from the kinetics of proton trans-
fer reactions. III. The measurement of
the equilibrium constant at various
см. прод.

937 938

9 8 9 0955 ЕИИ ВИНТИ

30906.8211

TE, Ch, Ph

40892

прод.

temperatures. "J. Chem. Phys.", 1973,
59, N, 1, 61-69
(англ.)

0955 0111

937 938

ВИНИТИ

31004.8740
TEL, Ch, Ph

ВНИИИ 1218
96201
N. O

1973

Hollas J. M., Sutherley T. A.

The geometries of the $\tilde{X}$ and $\tilde{A}$ states of
 $N_2 O^+$ from photoelectron spectroscopy

2
compared with those derived from the
emission spectrum.

"Chem. Phys. Lett.", 1973, 21, N 1,
167-169 (англ.)

0975 ВНИИ

962 963

968

ВНИИТИ

30419.1243

Ph, Ch, TE

CO_2^+ ; CO_2^+ ; N_3 ; CCN ;

N_2O ; NCO 30526 кв. метр.
рас.

Horsley J.A... Hall J.A. Non-empirical calculation of spin-orbit coupling constants for some linear triatomic molecules.

"Mol. Phys.", 1973, 25, N 2, 483-488

(англ.)

840

846

0848

(+5)



0856-55-55

ВИНИТИ

N₂O

1973

104061x Laser source spectroscopy. III. Intensities and line widths of the $00^{\circ}1-10^{\circ}0$ transition of nitrous oxide. Deviation from the Lorentz form. Lacome, Nelly; Boulet, Christian; Arie, Eric (Lab. Infrarouge, Univ. Paris VI, Orsay, Fr.). *Can. J. Phys.* 1973, 51(3), 302-10 (Fr). Intensities and half-widths of self-broadened N₂O were measured in the $00^{\circ}1-10^{\circ}0$ band by a spectroscopic method using a stabilized, single line, single mode laser source. On the other hand, line overlap has permitted pointing out a deviation from Lorentz line shape for pressures greater than atm. An attempt to interpret this difference by a semiempirical formalism is proposed, proceeding from super Lorentz line shape recently introduced by Varanasi.

unrecub.

C. A. 1973. 78 v 16

N2C

3-244

1973

Laurelaine Nels

(Chap)

"Appl. Opt." 1973, 12

N13, 617

N₂O

1973

Lee L.C., Carlson R.W.,
et al^a

"J. Quant. Spectrosc. and
Radiat. Transfer."

1973, 13, N10, 1023-1031.

chemp
norming.

(see. N₂; III)

N_2O

Сил. отзеты

1973

Mc. Clatchey R.A. et al.

Air Force Cambridge

Res Labor. TR-73-0096

26 Jan 1973 (N 434)

Atmospheric Absorption line

Parameters Compilation.

и.п.

интен. линии
таблицы

NNO

Nakatsuji Hiroshi

1973

геом.
структ.

"J. Amer. Chem. Soc"

1973, 95, N2, 354-61.

и форма молекул в основн.
и возб. состояниях.

(см. Bell2; III)

NO, NO₂, N₂O (Aē). XIII-2480 1973

Kalley S.G., Compton R.N., Schweinler
H.C., Anderson V.E.,

J. Chem. Phys., 1973, 59 (8), 4125-39.

Molecular electron affinities from
collisional ionization of cesium. I.

Nitric oxide, nitrogen dioxide, and
nitrous oxide.

Om. 4-3169

21

C.A. 1974, 80. N2O. 112975e.

10



41031.6666

TC, MGU, Ch

96615

геометр.

 N_2O (газ)

Di 02

1973

2644

Nemes L. An approximate correlation between bending force constants and electronegativities for molecules isoelectronic with CO_2 . "J. Mol. Struct.", 1973, 19, N 2, 807-810

(англ.)

0224 пик

198 199

216

ВИНИТИ

N₂O

1973

Sanche L., Schulz G. I.

стр. 479-493
J. Chem. Phys., 1973, 58, N2,

● (cm Cl₂) III

N₂O

1973

Sinanoglu Oktay, Petuk: H. Onder.

"J. Amer. Chem Soc.", 1973, 95, NT7, 5435-5442.

неприме
вещи

(см. ВН; III)

N_2O

W.Sroka ~~AND~~ and

I973
R.Zietz

Z.Naturforsch. 28^a, 794 (I973)

Dissociation and ionization excitation in ~~the~~

N_2O with synchrotron radiation

XIII-2280

1973

№20

22 Б177. Уширение инфракрасных линий поглощения при низких температурах. III. Закись азота. Tubbs Lloyd D., Williams Dudley. Broadening of infrared absorption lines at reduced temperatures. III.

Nitrous oxide. «J. Opt. Soc. Amer.», 1973, 63, № 7, 859—863 (англ.)

Методом кривой роста измерены ширины и силы около 100 линий вращательной структуры ИК-полосы 000—001 и ряда линий горячей полосы 010—011 молекулы N_2O при t -рах 300 и 204° К. Показано, что параметр самоуширения γ_0 в пределах ошибок измерений не зависит от t -ры и от колебательного состояния. Ранее такая же закономерность была установлена для молекул CO и CO₂. Для матричного элемента дипольного момента перехода 000—001 (или 010—011) получено значение $|R|=0,2320 D$, а для полной силы полос переходов 000—001 и 010—011 получены значения 1181 и 142 см⁻¹/атм. см, соответственно.

М. Р. Алиев

Спектр

X. 1973 №22

N₂O

XIII - 2380

1973

47365u Broadening of infrared absorption lines at reduced temperatures. III. Nitrous oxide. Tubbs, Lloyd D.; Williams, Dudley (Dep. Phys., Kansas State Univ., Manhattan, Kans.). *J. Opt. Soc. Amer.* 1973, 63(7), 859-63 (Eng). The strengths and self-broadening parameters for lines in the R branch of the ν_3 fundamental of N₂O were measured for gas samples at 300 and 204°K. The results indicate that the collision cross sections at the 2 temps. are nearly the same. Differences between values for total band strength of ν_3 based on the present high-resoln. measurements and values based on earlier low-resoln. studies are discussed. The results obtained for self-broadening parameters agreed well with recent results of Toth and Margolis.

u.k. експ

C. A. 1973. 79 N 8

№20
11 Д635. Уширение линий ИК-поглощения при пониженных температурах. Ч. III. Закись азота. Tubbs Lloyd D., Williams Dudley. Broadening of infrared absorption lines at reduced temperatures. III. Nitrous oxide. «J. Opt. Soc. Amer.», 1973, 63, №7, 859—863 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения газообразной закиси азота в области колебания ν_3 при t -рах 204 и 300°K и в области $\nu_1 + \nu_3$ при 300°K. Определены интенсивности и коэф. самоуширения колебательно-вращательных линий. Суммарная интенсивность полосы ν_3 сильно отличается от полученных ранее величин; для $\nu_1 + \nu_3$ согласие лучше. Коэф. уширения для этих полос близки. По упрощенной теории вычислены поперечники соударения молекул σ для исследованных t -р. Различия в величинах σ составляют ~1%, что отличается от результатов для CO и CO₂, где поперечники соударений заметно зависят от t -ры. Ч. II см. РЖФиз, 1972, 7Д364. Библ. 10.

М. В. Тонков

1973

XIII - 2380

х. 1973 №11

420

3 Д363. ИК-спектр высокого разрешения закиси азота $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$. Исследование полосы ν_3 . Wal-
rand J., Blanquet G., Courtoy C. P. Spectres
infrarouges à haute résolution du protoxyde d'azote

$^{14}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$. Étude de la bande ν_3 . «Ann. Soc. sci. Bruxel-
les. Sér. 1», 1973, 87, № 3, 409—419 (франц.)

Получен ИК-спектр газообразной закиси азота в области $2100\text{--}2200\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,03\text{--}0,04\text{ см}^{-1}$ на спектрометре Жирара в слое 25 см при давл. 2—8 мм рт. ст. Наблюдаемые линии колебательно-вращательного спектра связаны с колебанием ν_3 и соответствующим горячим переходом с уровня $\nu_{1/2}$. Приведены спектры и таблицы частот. Определены колебательные частоты и изменения вращательных постоянных при колебательном возбуждении. Для горячего перехода отмечено l -удвоение для высоких J . Определены параметры l -удвоения q' и q'' . Библ. 6.

М. В. Тонков

Р 1974/113

XIII-2383

N₂O

XIII-2383

1973

(21)

65250c High resolution infrared spectra of nitrous(nitrogen-14, nitrogen-15) oxide(oxygen-16). The μ_2 band. Walrand, J.; Blanquet, G.; Courtoy, C. P. (Dep. Phys., Fac. Notre-Dame de la Paix, Namur, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. I* 1973, 87(3), 409-19 (Fr). The high resolu. ir spectrum of $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ (99%) was measured at 2100-2200 cm^{-1} . The ν_2 (2177 cm^{-1}) and the $\nu_2' + \nu_2 - \nu_2'$ (2164 cm^{-1}) bands were analyzed. The centrifugal distortion const. $D_0 = 18.0 \times 10^{-8} \text{ cm}^{-1}$ was detd. The l splitting of the hot band was obsd. from $J = 22$ for the R branch and $J = 17$ for the P branch. Splitting of the ν_2' level $-82.01 \times 10^{-8} \text{ cm}^{-1}$ was detd.

C.A. 1974.80. N12

$N_2O (v_i)$

XIII - 2383

1973

(122)

65250c High resolution infrared spectra of nitrous (nitrogen-14, nitrogen-15) oxide (oxygen-16). The μ_2 band. Walrand, J.; Blanquet, G.; Courtoy, C. P. (Dep. Phys., Fac. Notre-Dame de la Paix, Namur, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. I* 1973, 87(3), 409-19 (Fr). The high resolu. ir spectrum of $^{14}N^{15}N^{16}O$ (99%) was measured at 2100-2200 cm^{-1} . The ν_2 (2177 cm^{-1}) and the $\nu_2^1 + \nu_2 - \nu_2^1$ (2164 cm^{-1}) bands were analyzed. The centrifugal distortion const. $D_0 = 18.0 \times 10^{-8} cm^{-1}$ was detd. The l splitting of the hot band was obsd. from $J = 22$ for the R branch and $J = 17$ for the P branch. Splitting of the ν_2^1 level $-82.01 \times 10^{-3} cm^{-1}$ was detd.

C.A. 1974.80.N12.65250c

10

(Φ)

N₂O

1 Д171. Определение ангармонических потенциальных постоянных линейных молекул типа XYZ. Wang Victor K., Goplen Thomas G., Overend John. Determination of anharmonic potential constants in linear XYZ molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 46, № 3, 509—512 (англ.)

м.п.:

Рассмотрено применение графич. метода Лайда для вычисления кубич. коэф. ангармоничности K_{122} и K_{322} линейных молекул XYZ из значений параметров резонанса Ферми между ν_1 и $2\nu_2$ и между ν_3 и $2\nu_2$, из значений вращательной постоянной для уровней ν_1 , ν_3 , $2\nu_2$ и из значения постоянной колебательно-вращательного взаимодействия α_2 . Построены кривые зависимости эксперим. параметров от K_{122} и K_{322} для молекул N₂O, OCS, CICN и BrCN и показано, что эти кривые не пересекаются в одной точке, соответствующей истинным значениям K_{122} и K_{322} . Отсутствие точек пересечения авторы объясняют неучитываемой (в графич. методе) зависимостью параметров резонанса Ферми от вращательного состояния.

М. Р. Алиев

1973

м.п. 12.01

(+3)

⊗

Ф. 1974 № 1

N2O

1973

Chem. Abstr.

f 36594s Determination of anharmonic potential constants in linear XYZ molecules. Wang, Victor K.; Goplen, Thomas G.; Overend, John (Sch. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, Minn.). *J. Mol. Spectrosc.* 1973, 46(3), 509-12 (Eng). The anharmonic normal-coordinate force consts. k_{112} and k_{122} of the dominant isotopic species of N_2O , $ClCN$, $BrCN$, and OCS were calcd. in the framework of the quartic force field (Morino, Y.; Nakagawa, T.; 1968) by using the formalism of D. R. Lide, Jr. (1970) modified to account for the J -dependence of the Fermi-resonance operator (Amart, G.; Pimbert, M.; 1965).

Chem. Abstr. 1281

C.A. 1973, 79 N6

(+3) N

1973

№20
3 Б209. Определение ангармонических потенциальных постоянных линейных молекул типа XYZ. Wang Victor K., Goplen Thomas G., Overend John. Determination of anharmonic potential constants in linear XYZ molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 46, № 3, 509—512 (англ.)

Рассмотрено применение графич. метода Лайда для вычисления кубич. коэф. ангармоничности k_{122} и k_{322} ли-

нейных молекул XYZ из значений параметров резонанса Ферми между ν_1 и $2\nu_2$ и между ν_3 и $2\nu_2$, из значений вращательной постоянной для уровней ν_1 , ν_3 , $2\nu_2$ и из значения постоянной колебательно-вращательного взаимодействия α_2 . Построены кривые зависимости экспе-
рим. параметров от k_{122} и k_{322} для молекул N_2O , OCS , $CISN$ и $BrCN$ и показано, что эти кривые не пересекаются в одной точке, соотв-щей истинным значениям k_{122} и k_{322} . Отсутствие точек пересечения объясняют неучитываемой (в графич. методе) зависимостью параметров ферми-резонанса от вращательного состояния.

М. Р. Алиев

101 м.т.с.с.с.

N

+3

М.К.

x. 1974

N3

N₂O

Смесь
напав.

C. A. 1974.
80. N4

20908g Estimation of equilibrium molecular structures from zero-point rotational constants. Watson, James K. G. (Dep. Phys., Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *J. Mol. Spectrosc.* 1973. 48(3), 479-502 (Eng). The approx. equation $I_e = 2I_0 - I_s$, where I_e , I_s , and I_0 are, resp. the equil., substitution and zero-point moments of inertia of a mol., can be derived from a 1st order treatment of isotope effects, and is valid for linear, sym. or asym. tops. By means of this equation, it is possible to est. the equil. structure of a mol. from the zero-point rotational constns. of several isotopes. The advantage of this mass-dependence (r_m) method over the conventional r_e method is that it is insensitive to the perturbations and resonances that frequently affect excited vibrational states. The main disadvantages are that a large no. of isotopic mols. may be necessary and that the above equation is not sufficiently accurate for H-D isotope effects. A detailed comparison between r_m and r_e of CO shows that the slight difference of $\sim 2 \times 10^{-4}$ Å between the 2 bond lengths is due mainly to the difference in the contributions of the electrons. The r_m method was also applied to the triat. mols. N₂O, OCS, SO₂ and HCN. For N₂O and SO₂ the results are in excellent agreement with the most recent r_e structures. For OCS there is a significant difference between the r_m structure and the present r_e structure. This difference is as yet unexplained. The poor results for HCN confirm the general expectation that the r_m method cannot be applied to hydrides without further modification.

1973

166-44-3917
(+3)
X

40306.8437

Ch, TE, Ph

N₂O

41125

1973

4-3917

(см. 10; III)

Watson James K. G.

The estimation^a of equilibrium molecular structures from zero-point rotational constants. "J. Mol. Spectrosc.", 1973, 48, N 3, 479-502 (англ.)

0057

045 046

0050

ВИНИТИ

30913.8161

TE, Ph

N₂O

25071

1973

4-1671

Zahradnik R., Čásky P. CNDO treatments
on electronic spectra of small molecules.
"Collect. Czech. Chem. Commun", 1973,
38, N 7, 1876-1885. (англ.)

0961 61K

943 946

954

ВМННТИ