

Г.Ф. Банах, О.К. Войцеховская, Н.Н. Трифонова

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ ПОЛОСЫ ν_5 АЗОТНОЙ КИСЛОТЫ

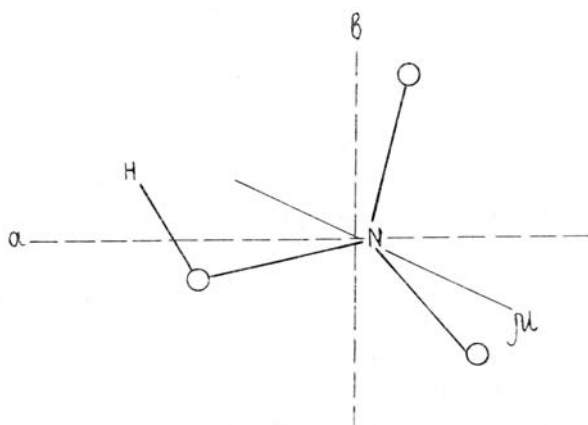
В результате теоретической интерпретации спектра азотной кислоты, зарегистрированного методом одной лазерной спектроскопии, получено значение интегральной интенсивности полосы ν_5 HNO_3 , равное $(202 \pm 40) \text{ см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}$. С найденным значением S ν_5 проведен расчет интенсивностей линий, не участвовавших в обработке, и получено удовлетворительное согласие с экспериментом.

Исследование спектра азотной кислоты стимулировано задачами охраны окружающей среды и важной ролью этого соединения в фотохимии атмосферы [1, 2]. Для уверенной интерпретации результатов аэростатных, баллонных, спутниковых измерений нужны данные по параметрам спектральных линий паров HNO_3 , поэтому необходима разработка соответствующих методик.

Асимметричная молекула HNO_3 обладает только плоскостью симметрии и относится к группе C_s (в ранних работах встречается отнесение к группе C_{2v}). Систему координат, связанную с молекулой, обычно ориентируют [3, 4] по направлениям моментов инерции и обозначают индексами a , b , c , соответствующими наименьшему, среднему и наибольшему моменту.

Регистрация лабораторных спектров HNO_3 представляет значительные трудности из-за высокой реакционной способности молекулы, и известно лишь несколько работ, в которых получены экспериментальные спектры азотной кислоты [3, 5–10], снятые с высоким разрешением ($\sim 10^{-4} \div 10^{-3} \text{ см}^{-1}$). Подробно проанализированы микроволновые спектры пяти изотопических модификаций молекулы в работе [3], и показано, что постоянный дипольный момент в молекуле расположен в плоскости (a, b) (см. рисунок), под углом $23^\circ 57'$ к оси a . В результате измерений штарковского расщепления авторы [3] нашли $\mu_a^0 = 1,9666D$; $\mu_b^0 = 0,822D$ и полное значение $\mu_0 = |\mu_a^2 + \mu_b^2| = 2,17 \pm 0,02D$. Таким образом, молекула HNO_3 , обладая значительным постоянным дипольным моментом, имеет интенсивный вращательный спектр, поэтому ряд работ посвящен анализу чисто вращательных переходов в микроволновом диапазоне и определению спектроскопических констант гамильтониана основного колебательного состояния [7, 9] и гармонического силового поля [9]. Вместе с тем важная характеристика молекулы — функция дипольного момента — в литературе изучена недостаточно. Назовем работу [11], в которой определено значение $\frac{\partial \mu_b}{\partial Q_2}$ первой производной μ_b компоненты дипольного момента по нормальной координате Q_2 , и сообще-

ние [12], авторы которого определили производную $\frac{\partial \mu_a}{\partial Q_2}$ и уточнили значение $\frac{\partial \mu_b}{\partial Q_2}$.

Структура молекулы азотной кислоты (HNO_3)

Целью данной работы является определение интегральной интенсивности полосы ν_5 HNO_3 и колебательных матричных элементов первой производной дипольного момента по нормальной координате Q_5 на основе экспериментальных данных [5]. В этой работе спектр HNO_3 получен методом одной лазерной спектроскопии и приведены положения и интенсивности пиков поглощения. Точность

определения центра линий составляет $\pm 0,005 \text{ см}^{-1}$, интенсивности порядка $\pm 20\%$. Все измерения проведены при температуре 296°К . Эти данные послужили основой для интерпретации спектра и определения спектроскопических констант эффективного вращательного гамильтониана [13, 14], что позволило нам провести идентификацию пиков поглощения.

Интенсивность колебательно-вращательной (КВ) линии рассчитывается по формуле

$$S_{V''R''}^{V'R'} = \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{\nu_{V''R''}^{V'R'}}{\nu_0 Q_{VR}} g_{V''R''} n_0 \exp\left(-\frac{hc}{kT} E_{V''R''}\right) \times \\ \times \left[1 - \exp\left(-\frac{hc \nu_{V''R''}^{V'R'}}{kT}\right)\right] |\langle V'R' | M_z | V''R'' \rangle|^2 \cdot F_{V''R''}^{V'R'}, \quad (1)$$

где h , c , k , n_0 – функциональные физические постоянные; ν_0 , $\nu_{V''R''}^{V'R'}$ – центры колебательной полосы и КВ линии; Q_{VR} – колебательно-вращательная статистическая сумма; $F_{V''R''}^{V'R'}$ – фактор колебательно-вращательного взаимодействия; V'' , V' , R'' , R' – все наборы колебательных и вращательных квантовых чисел нижнего и верхнего состояния перехода; $|\langle V'R' | M_z | V''R'' \rangle|^2$ ($R'' = J''k''m''$) – матричные элементы первой производной дипольного момента находились по соотношению [12]

$$|M_{V'J'\tau', V''J''\tau''}|^2 = \sum_{m''m'} \frac{3(2J''+1)}{2J''+1} |(1J''0m''/J'm')|^2 \times \\ \times \left\{ |\langle V' | \mu_x | V'' \rangle|^2 \cdot \sum_{\kappa''} g_{\kappa''\tau''}^{[V'']} ((1J'' - 1\kappa''/J'\kappa') \cdot g_{\kappa''-1\tau'}^{[V']} - \right. \\ \left. - (1J''1\kappa''/J'\kappa') \cdot g_{\kappa''+1\tau'}^{[V']})^2 + |\langle V' | \mu_y | V'' \rangle|^2 \times \right. \\ \left. \times \left[\sum_{\kappa''} g_{\kappa''\tau''}^{[V'']} ((1J'' - 1\kappa''/J'\kappa') g_{\kappa''-1\tau'}^{[V']} + (1J''1\kappa''/J'\kappa') \cdot g_{\kappa''+1\tau'}^{[V']}) \right]^2 \right\}, \\ \tau = K_A - K_C. \quad (2)$$

Отсутствие оси симметрии приводит, к следующим правилам отбора по вращательным квантовым числам:

$$\Delta K_A = 0, \pm 1, \pm 2 \dots; \Delta K_C = \pm 1, \pm 2, \dots; \Delta J = 0, \pm 1,$$

Где $g_{\kappa''\tau''}^{[V'']}$ – коэффициенты разложения вращательной волновой функции в базе жесткого симметричного волчка; m'' – магнитное квантовое число; $(1J'' - 1\kappa''/J'\kappa')$ и т.д. – коэффициенты Клебша – Гордона. Расчеты величины (1) проводились на базе программного средства [15], в качестве исходных данных для расчета энергетических уровней использовались константы гамильтониана в форме Уотсона [14] до секстичных постоянных включительно. Величину $F_{V''R''}^{V'R'}$ в данном случае можно считать равной 1, так как молекула достаточно тяжелая, и приближение жесткого волчка вполне оправдано. Тогда значения $\langle V'' | \mu_a | V' \rangle$, $\langle V'' | \mu_b | V' \rangle$ можно найти из набора интенсивностей отдельных линий и рассчитать $S_{V''V'}$ для фундаментальной полосы [16]:

$$S_{V''V'} = \frac{8\pi^3}{3hc} \nu_0 \frac{n}{Q_V} \sum_{g=a,b} |\langle V'' | \mu_g | V' \rangle|^2. \quad (3)$$

Наибольшие затруднения в данной работе вызвала задача идентификации пиков поглощения, зарегистрированных в [5], с рассчитанными нами по начальному приближению $\langle \mu_a \rangle$, $\langle \mu_b \rangle$ линиями. Спектр HNO_3 характеризуется значительной плотностью линий и каждый пик представляет собой суперпозицию большого числа КВ переходов. В эксперименте расстояние между пиками порядка $0,01 \div 0,001 \text{ см}^{-1}$, что перекрывалось погрешностью расчета центров. Поэтому критерием выбора линий поглощения для обработки с целью получения значений были переходы, идентифицированные в работе [13], не перекрывающиеся с линиями полосы $2\nu_9$ и представляющие собой одиночные линии, т. е. пики поглощения, которые можно было отнести к одному колебательно-вращательному переходу.

Сравнение экспериментальных и рассчитанных интенсивностей
линий полосы ν_5

| $\nu_{\text{эксп.}}$ | Квантовые числа* | | | | | | $S_{\text{эксп.}}$ см/мол. $\cdot 10^{21}$ | $S_{\text{расч}}$ см/мол. $\cdot 10^{21}$ | $\delta\%$ |
|----------------------|------------------|-----------------|--------------|-----------------|--------------|-----------------|---|--|------------|
| | $J'K_a'K_c'$ | $J''K_a''K_c''$ | $J'K_a'K_c'$ | $J''K_a''K_c''$ | $J'K_a'K_c'$ | $J''K_a''K_c''$ | | | |
| 1 | 2 | | | | | | 3 | 4 | 5 |
| 891,246 | 30 | 0 | 30 | 29 | 0 | 29 | 6,89 | 7,06 | 2,5% |
| 891,258 | 29 | 1 | 28 | 28 | 1 | 27 | 6,85 | 6,607 | 3,5% |
| 891,271 | 28 | 2 | 26 | 27 | 2 | 25 | 6,06 | 6,18 | 2% |
| 891,286 | 27 | 3 | 24 | 26 | 3 | 23 | 6,22 | 5,77 | 7% |
| 891,627 | 31 | 0 | 31 | 30 | 0 | 30 | 7,02 | 6,86 | 2,2% |
| 891,641 | 30 | 1 | 29 | 29 | 1 | 28 | 6,94 | 6,44 | 7% |
| 891,654 | 29 | 2 | 27 | 28 | 2 | 26 | 6,23 | 6,038 | 3% |
| 891,669 | 28 | 3 | 25 | 27 | 3 | 24 | 6,74 | 5,66 | 16% |
| 891,687 | 27 | 4 | 23 | 26 | 4 | 22 | 6,27 | 5,29 | 15% |
| 892,002 | 32 | 0 | 32 | 31 | 0 | 31 | 6,73 | 6,649 | 1% |
| 892,017 | 31 | 1 | 30 | 30 | 1 | 29 | 7,07 | 6,252 | 11% |
| 892,032 | 30 | 2 | 28 | 29 | 2 | 27 | 6,14 | 5,878 | 4% |
| 892,048 | 29 | 3 | 26 | 28 | 3 | 25 | 5,51 | 5,524 | 0,3% |
| 892,064 | 28 | 4 | 24 | 27 | 4 | 23 | 6,72 | 5,186 | 23% |
| 892,090 | 27 | 5 | 22 | 26 | 5 | 21 | 5,74 | 4,86 | 15% |
| 892,376 | 33 | 0 | 33 | 32 | 0 | 32 | 5,72 | 6,42 | 12% |
| 892,390 | 32 | 1 | 31 | 31 | 1 | 30 | 5,38 | 6,05 | 12% |
| 892,405 | 31 | 2 | 29 | 30 | 2 | 28 | 6,35 | 5,70 | 10% |
| 892,420 | 30 | 3 | 27 | 29 | 3 | 26 | 5,55 | 5,374 | 3% |
| 892,438 | 29 | 4 | 25 | 28 | 4 | 24 | 4,36 | 5,06 | 16% |
| 892,459 | 28 | 5 | 23 | 27 | 5 | 22 | 4,47 | 4,76 | 6% |
| 892,756 | 34 | 0 | 34 | 33 | 0 | 33 | 5,38 | 6,185 | 15% |
| 892,775 | 33 | 1 | 32 | 32 | 1 | 31 | 5,11 | 5,839 | 14% |
| 892,788 | 32 | 2 | 30 | 31 | 2 | 29 | 4,84 | 5,515 | 14% |
| 892,803 | 31 | 3 | 28 | 30 | 3 | 27 | 4,48 | 5,21 | 16% |
| 892,821 | 30 | 4 | 26 | 29 | 4 | 25 | 6,44 | 4,92 | 23% |
| 892,842 | 29 | 5 | 24 | 28 | 5 | 23 | 3,88 | 4,64 | 19% |
| 893,135 | 35 | 0 | 35 | 34 | 0 | 34 | 4,92 | 5,93 | 20% |
| 893,150 | 34 | 1 | 33 | 33 | 1 | 32 | 3,35 | 5,60 | 67% |
| 893,166 | 33 | 2 | 31 | 32 | 2 | 30 | 3,21 | 5,31 | 65% |
| 893,181 | 32 | 3 | 29 | 31 | 3 | 28 | 3,40 | 5,03 | 48% |
| 893,197 | 31 | 4 | 27 | 30 | 4 | 26 | 3,07 | 4,76 | 55% |
| 893,217 | 30 | 5 | 25 | 29 | 5 | 24 | 2,94 | 4,51 | 53% |
| 893,243 | 29 | 6 | 23 | 28 | 6 | 22 | 3,25 | 4,26 | 31% |
| 893,500 | 36 | 0 | 36 | 35 | 0 | 35 | 5,10 | 5,68 | 11% |
| 893,517 | 35 | 1 | 34 | 34 | 1 | 33 | 4,99 | 5,38 | 8% |
| 893,533 | 34 | 2 | 32 | 33 | 2 | 31 | 5,39 | 5,108 | 5% |
| 893,549 | 33 | 3 | 30 | 32 | 3 | 29 | 4,24 | 4,84 | 14% |
| 893,566 | 32 | 4 | 28 | 31 | 4 | 27 | 5,00 | 4,60 | 8% |
| 893,585 | 31 | 5 | 26 | 30 | 5 | 25 | 3,38 | 4,36 | 29% |
| 893,609 | 30 | 6 | 24 | 29 | 6 | 23 | 3,33 | 4,139 | 24% |
| 893,646 | 29 | 7 | 22 | 28 | 7 | 21 | 3,41 | 3,70 | 8% |
| 893,872 | 37 | 0 | 37 | 36 | 0 | 36 | 3,60 | 5,42 | 50% |
| 893,889 | 36 | 1 | 35 | 35 | 1 | 34 | 3,96 | 5,14 | 29% |
| 893,905 | 35 | 2 | 33 | 34 | 2 | 32 | 3,97 | 4,89 | 23% |
| 893,922 | 34 | 3 | 31 | 33 | 3 | 30 | 3,31 | 4,65 | 40% |
| 893,939 | 33 | 4 | 29 | 32 | 4 | 28 | 3,79 | 4,426 | 16% |

| 1 | 2 | | | | | | 3 | 4 | 5 |
|---------|-----------|----------|-----------|----|---|----|------|-------|------|
| 893,958 | 32 | 5 | 27 | 31 | 5 | 26 | 3,15 | 4,20 | 33% |
| 893,981 | 31 | 6 | 25 | 30 | 6 | 24 | 4,53 | 4,004 | 11% |
| 894,010 | 30 | 7 | 23 | 29 | 7 | 22 | 2,96 | 3,80 | 28% |
| 894,246 | 38 | 0 | 38 | 37 | 0 | 37 | 6,49 | 5,165 | 20% |
| 894,265 | 37 | 1 | 36 | 36 | 1 | 35 | 6,06 | 4,91 | 19% |
| 894,281 | 36 | 2 | 34 | 35 | 2 | 33 | 6,60 | 4,673 | 29% |
| 894,298 | 35 | 3 | 32 | 34 | 3 | 31 | 4,95 | 4,452 | 10% |
| 894,315 | 34 | 4 | 30 | 33 | 4 | 29 | 4,23 | 4,24 | 0,3% |
| 894,333 | 33 | 5 | 28 | 32 | 5 | 27 | 5,22 | 4,047 | 22% |
| 894,355 | 32 | 6 | 26 | 31 | 6 | 25 | 3,64 | 3,859 | 6% |
| 894,381 | 31 | 7 | 24 | 30 | 7 | 23 | 4,35 | 3,677 | 15% |
| 894,425 | 30 | 8 | 22 | 29 | 8 | 21 | 4,27 | 3,32 | 22% |
| 894,612 | 39 | 0 | 39 | 38 | 0 | 38 | 7,51 | 6,23 | 17% |
| 894,631 | 38 | 1 | 37 | 37 | 1 | 36 | 5,14 | 4,666 | 9% |
| 894,649 | 37 | 2 | 35 | 36 | 2 | 34 | 4,99 | 4,448 | 10% |
| 894,666 | 36 | 3 | 33 | 35 | 3 | 32 | 4,79 | 4,246 | 11% |
| 894,684 | 35 | 4 | 31 | 34 | 4 | 30 | 4,96 | 4,056 | 18% |
| 894,702 | 34 | 5 | 29 | 33 | 5 | 28 | 4,25 | 3,877 | 8% |
| 894,723 | 33 | 6 | 27 | 32 | 6 | 26 | 3,69 | 3,706 | 0,4% |
| 894,748 | 32 | 7 | 25 | 31 | 7 | 24 | 3,53 | 3,54 | 0,3% |
| 894,783 | 31 | 8 | 23 | 30 | 8 | 22 | 3,17 | 3,38 | 6% |
| 894,981 | 40 | 0 | 40 | 39 | 0 | 39 | 4,08 | 4,639 | 13% |
| 895,001 | 39 | 1 | 38 | 38 | 1 | 37 | 4,92 | 4,42 | 10% |
| 895,018 | 38 | 2 | 36 | 37 | 2 | 35 | 4,10 | 4,22 | 3% |
| 895,036 | 37 | 3 | 34 | 36 | 3 | 33 | 5,93 | 4,038 | 32% |
| 895,053 | 36 | 4 | 32 | 35 | 4 | 31 | 4,36 | 3,865 | 11% |
| 895,072 | 35 | 5 | 30 | 34 | 5 | 29 | 3,38 | 3,70 | 9% |
| 895,092 | 34 | 6 | 28 | 33 | 6 | 27 | 3,27 | 3,547 | 8% |
| 895,116 | 33 | 7 | 26 | 32 | 7 | 25 | 4,09 | 3,398 | 17% |
| 895,146 | 32 | 8 | 24 | 31 | 8 | 23 | 3,05 | 3,25 | 6% |
| 895,340 | 41 | 0 | 41 | 40 | 0 | 40 | 4,11 | 4,378 | 6% |
| 895,361 | 40 | 1 | 39 | 39 | 1 | 38 | 5,42 | 4,179 | 22% |
| 895,379 | 39 | 2 | 37 | 38 | 2 | 36 | 4,88 | 3,996 | 18% |
| 895,398 | 38 | 3 | 35 | 37 | 3 | 34 | 4,87 | 3,828 | 21% |
| 895,415 | 37 | 4 | 33 | 36 | 4 | 32 | 4,68 | 3,67 | 21% |
| 899,433 | 36 | 5 | 31 | 35 | 5 | 30 | 5,20 | 3,52 | 32% |
| 895,454 | 35 | 6 | 29 | 34 | 6 | 28 | 4,68 | 3,38 | 27% |
| 895,476 | 34 | 7 | 27 | 33 | 7 | 26 | 3,21 | 3,249 | 1% |

* Квартеты линий.

Применяя принцип метода наименьших квадратов и используя результаты предварительного расчета и данные эксперимента [5], получены значения $\mu_a^{(5)}$, $\mu_b^{(5)}$ равные:

$$\langle V'' | \mu_a^{(5)} | V' \rangle = \pm 0,1035242 D; \quad \langle V'' | \mu_b^{(5)} | V' \rangle = \pm 0,1328900 D.$$

Обращаясь к соотношению (3), находим $S_{V''}^{(5)} = 202,5667 \text{ см}^{-2} \text{ атм}^{-1}$.

Значения Q_V , Q_R рассчитывались по приближенным формулам [17], причем собственные частоты заимствовались из работы [18].

Обсудим полученное значение интенсивности. В работе [19] приводится суммарное значение интегральных интенсивностей полос ν_5 и $2\nu_9$, равное $582 \text{ см}^{-2} \text{ атм}^{-1}$ при $T = 313^\circ\text{К}$. Далее, согласно работе [18] интегральные интенсивности обеих полос близки между собой по величине. Авторы [18]

ввели семь качественных оценок: VVS; VS; S; M; W; VW; VVW и отнесли полосы ν_5 и $2\nu_9$ к одной и той же категории S, что косвенно подтверждает правильность полученного нами значения.

Проверка полученных значений $|\mu_a^{(s)}|^2, |\mu_b^{(s)}|^2$ заключалась в расчете интенсивностей линий, не участвовавших в обработке. Для этой процедуры выбраны линии, центры и квантовая идентификация которых приведены в табл. 2 работы [14], так как согласно указанию авторов [14] эти линии можно отнести к уверенно идентифицированным. Но следует отметить, что в указанной работе представлено отнесение экспериментальной линии к одному переходу, в то время как наши расчеты показывают, что большинство из них представляет собой квартет линий с квантовыми числами

$$\left. \begin{array}{cccc} J'' & K_A'' & K_C'' & J' & K_A' & K_C' \\ J'' & K_A'' \pm \Delta K_A'' & K_C'' & J' & K_A' \pm \Delta K_A' & K_C' \end{array} \right\} (\Delta K', \Delta K'' = 0, \pm 1),$$

так как практически уровни с одинаковыми K_A для молекулы HNO_3 вырождены, что отмечено в работе [13]. Подтверждением этого могут служить также значения вращательных уровней основного колебательного состояния, приведенные в работе [7], которые, начиная с $J \sim 10$, для состояний с одинаковыми K_A совпадают до шестой цифры после десятичного знака. Сравнение рассчитанных и экспериментальных значений интенсивностей линий с найденными значениями $\langle V'' | \mu_{a(b)} | V' \rangle$ приведены в табл. 1.

Проведенный ниже анализ данных показывает, что полученные величины матричного элемента дипольного момента могут служить основой для расчета вращательной структуры полосы ν_5 . Общее число предсказанных линий равнялось 85, для 15 линий величина отклонения $\delta = \left| \frac{S_{\text{экс}} - S_{\text{расч}}}{S_{\text{экс}}} \right| 100\%$ составляла менее 5%, для 45 линий — $5 < \delta < 20\%$, для остальных линий — $\delta > 20\%$. Среднее отклонение $\delta = \sum_i \frac{\delta_i}{N}$ оказалось равным 16,8%, что не превысило погрешности эксперимента (20%). Минимальное и максимальное отклонения — 0,3% и 67% соответственно.

Имеющиеся расхождения (в ряде линий довольно значительные), на наш взгляд, объясняются пренебрежением колебательно-вращательным взаимодействием при расчете интенсивностей. Действительно, состояния ν_5 и $2\nu_9$ связаны резонансом Ферми ($\Delta E \sim 17 \text{ см}^{-1}$) и возможно также Кориолисово взаимодействие. Но эти вопросы представляют собой предмет дополнительного исследования, для которого необходимы спектры HNO_3 , зарегистрированные с более высоким спектральным разрешением.

1. Мак-Ивен М., Филлипе Л. Химия атмосферы — М.: Мир, 1976. — 375 с.
2. Kunde V.G., Brasunas J.C., Coutrath B.J. et al. — Appl Opt., 1987, v. 26, N. 3, p. 545.
3. Cox A.P., Riveros J.M. — J. Chem. Phys., 1965, v. 42, № 7, с. 3106.
4. Таунс Ч., Павлов А. — Радиоспектроскопия. М.: ИЛ, 1959, с. 736.
5. Brockman Ph., Bair C.H., Allario F. — Appl. Opt., 1988, v. 17, N 1, p. 91.
6. Bair C.H., Brockman Ph. — Appl. Opt., 1979, v. 18, N. 24, p. 4152.
7. Cazzohli G., Lucia F.G. — J. Mol. Spectr., 1979, v. 76, p. 131.
8. Chevillard J.-P., Girandel R. — J. Phys., 1978, v. 39, p. 517.
9. Ghosh P.N., Blom C.E., Bauder A. — J. Mol. Spectr. v. 89, p. 159.
10. Maki A.G., Wells J.S. — J. Mol. Spectr., 1980, N. 2, p. 427.
11. Farrow L.A., Richton R.E. — J. Chem. Phys., 1981, v. 74, N. 10, p. 5474.
12. Войцеховская О.К., Конусов Ф.В., Черепанов В.Н. — Изв. вузов, Физика, 1986, N 2, с. 114.
13. Dana V. — Spectrochim. Acta, 1978, v. 34A, p. 1027.
14. Maki A.G., Wells J.S. — J. Mol. Spectr., 1984, v. 108, p. 17.
15. Войцеховская О.К., Макушкин Ю.С., Трифонова Н.Н., Черепанов В.Н. — Программа расчета центров и интенсивностей колебательно-вращательных линий молекул типа асимметричного волчка (имя программы YDIGEL) ГОСФАП, № П004348, 1980. — 53 с.
16. Rao K.N., Rinsland C.P., Smith M.A.H., Fridovich B. Molecular Spectroscopy: Modern Research. — N. Y., 1985, p. 111.
17. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. — М.: ИЛ, 1949. — 647 с.
18. McGraw G.E., Bermitt D.L., Hisatsune I.C. — J. Chem. Phys., 1965, v. 42, N. 1, p. 237.
19. Goldman A., Kyle T.G., Bonomo P.S. — Appl. Opt., 1971, v. 10, N. 1, p. 65.

Институт оптики атмосферы
СО АН СССР, Томск

Поступила в редакцию
31 декабря 1987 г.

G. F. Vanakh, O. K. Voitsekhovskaya, N. N. Trifonova. **Determination of the ν_5 -Band Total Intensity of HNO_3 .**

HNO_3 absorption spectrum measured by diode laser spectroscopy was theoretically interpreted to yield a ν_5 -band total intensity of $202 \pm 40 \text{ cm}^{-2} \text{ atm}^{-1}$. This value was used for calculating of the spectral line intensities not fitted by the least-squares procedure. The resulting data showed reasonable agreement with experiment.