

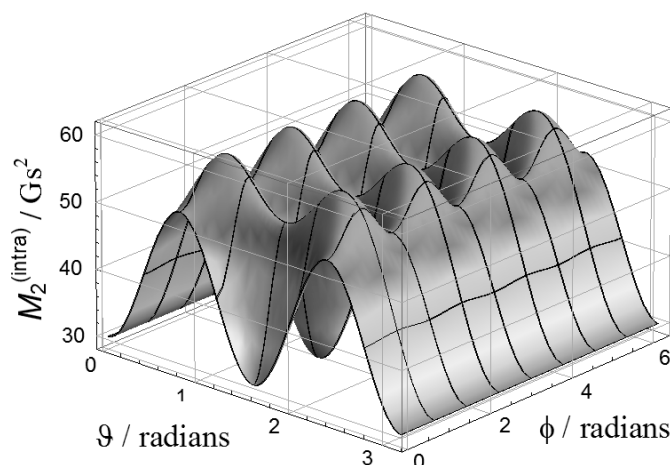
## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИСКАЖЕНИЯ СИММЕТРИИ ПО ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОМУ ВКЛАДУ ВО ВТОРОЙ МОМЕНТ ЛИНИИ ЯМР В КРИСТАЛЛАХ

Ф.И. Баширов<sup>а</sup>, Н.К. Гайсин<sup>б</sup>

<sup>а</sup>Казанский федеральный университет, <sup>б</sup>Казанский технологический университет

Получено аналитическое выражение внутримолекулярного вклада во второй момент линии ямр-поглощения в кристаллах с внутренними движениями координированных групп атомов [1]. В качестве модели молекулярного движения принята модель расширенных угловых скачков [2, 3]. Апробация теоретической формулы осуществлена на примере монокристалла кубической сингонии – хлорида аммония. Подтверждено присутствие тетрагонального искажения позиционной симметрии катионов аммония, ранее установленное нами по релаксационным измерениям [4].

На рисунке представлен график теоретической угловой зависимости внутрикатионного вклада во второй момент линии ямр-поглощения протонов в монокристалле хлорида аммония для области медленных движений ионов аммония:  $\vartheta$  – полярный и  $\phi$  – азимутальный углы ориентации вектора индукции статического магнитного поля в кристаллографической системе координат. Присутствующие в теории заторможенных молекулярных движений динамические веса неприводимых представлений точечной группы движения принимают значения 0,25 для двумерного и 0,76 для трехмерного представления группы тетраэдра, что свидетельствует о наличии тетрагонального искажения кубической позиции катионов аммония.



[1] F. Bashirov and N. Gaisin. The theory of hindered molecular motion and its application to spectroscopic studies. *Crystallography Reviews*. 2010. V. 16. No. 1. P. 3-87.

[2] Ferid Bashirov. *Spectroscopic Techniques and Hindered Molecular Motion*. N.-Y.: CRC Press. 2011. 160 p.

[3] Ф.И. Баширов, Н.К. Гайсин, Н.К. Галиуллин. Второй момент линии ямр поглощения в молекулярных кристаллах. Внутримолекулярный вклад. *Вестник Казанского технологического университета*. 2013. Т. 16. № 19. С. 26 –29.

[4] Спонтанное нарушение симметрии в молекулярных кристаллах. *Кристаллография*. 2001. Т. 46. № 3. С. 391-396.