

NH^+

NH_2^+

Tunt R.W., Pearse R.W.B.,
Smith E.C.W.

Nature 1935, 136, 32.

9

NH⁺
ray ●

M.M.

NH+

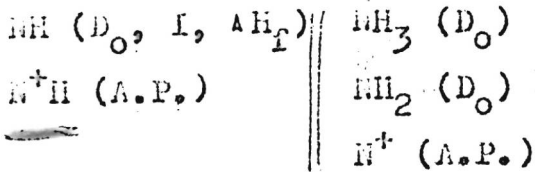
Feast m.w.

1951

Astrophys. J., 1951, 114, 344

Quincy
Boston

III - 202



1959

Reed R.I., Snedden W.

J. Chem. Soc., 1959, Dec., 4132-4133

Потенциал ионизации NH

PX., 1960, № 14, 55908

3

ЕСТЬ Ф. НА

3506-14

NH_3^+ , NH_2^+ , NH^+ , N^+ , NH_4^+ , N_2H_5^+ , 1963

N_2H_4^+ , N_2H_3^+ , N_2H_2^+ , N_2H^+ (A.P., P)

Derwish G.A.W., Galli A., Giardini-
Guidoni A., Volpi G.G.

J. Chem. Phys., 1963, 39(6),
1599-605

Ion-molecule reactions ...

10
ЕСТЬ ОПРИМ.

CA., 1963, 59, N 10,
10874d

WAT

Douglas A. E., Elliott G.A.,

1965

Canad. J. Phys., 1965, 43(3), 496.

III CH

Seal K. E., Gaydon A. G.

Proc. Phys. Soc., 1966,
89, 459.

3.

NH^+ ray.



M. N.

NH⁺

NH

4181-14-69

Douglas A. G.

1964

Proc. Internat. Conf. Spectrosc., Bombay, 1964. V. 1. S. 1., s. a., 81-84.

Уровни спектров кислорода и кислородородных смесей.

(см. O₂)

NH⁺

Umnuek 348 | 1968

55055f New emission band systems of the NH⁺ molecule. R. Colin and A. E. Douglas (Natl. Res. Council Canada, Ottawa). *Can. J. Phys.* 46(1), 61-73(1968)(Eng). Two new band systems of the NH⁺ mol. have been photographed at high dispersion and analyzed. One system consists of a single band at 4348.5 Å. which arises from a ${}^2\Delta-{}^2\Pi$ transition and the second consists of three bands of a ${}^2\Sigma^- - {}^2\Pi$ transition with the strongest (0-0) band lying at 4628.9 Å. A no. of the vibrational and rotational consts. of these states have been detd. From a study of the isotopic species ${}^{14}\text{NH}^+$, ${}^{15}\text{NH}^+$, and ${}^{14}\text{ND}$, it has been established that the ground state of NH⁺ is the ${}^2\Pi$ state and that a ${}^4\Sigma^-$ state lies 354 cm.⁻¹ higher. The spectrum has made it possible to det. the wavelengths at which cometary spectra and interstellar absorption lines of NH⁺ are expected to fall and to predict that the transition between the two lowest levels, which may be of interest to radio astronomy, occurs at 13,500 Mc/sec.

RCCN

599-1111-1065

C.A. 1968. 68.12

Оттиск 348

1968

NH⁺

12 Д290. Новые системы эмиссионных полос молекулы NH⁺ Colin R., Douglas A. E. New emission band systems of the NH⁺ molecule. «Canad. J. Phys.», 1968, 46, № 1, 61—73 (англ.)

Получены при высоком разрешении и проанализированы две новые системы полос молекулы NH⁺. Найдено, что первая система состоит из полосы 4358,5 Å, которая обусловлена переходом ²Δ—²Π, а вторая — из трех полос (переход ²Σ—²Π), из которых самая сильная 0—0-полоса расположена при 4628,9 Å. Определены колебательные и вращательные постоянные для этих состояний. Исследование изотопов N¹⁴H⁺, N¹⁵H⁺ и N¹⁴D показало, что основным состоянием NH⁺ является состояние ²Π и что состояние ⁴Σ находится на 354 см⁻¹ выше. Анализ спектров позволяет получить ряд данных, представляющих интерес для химич. и астрофизич. исследований космич. объектов.

Э. К.

спектр,
м. н.,
осн. сост.

ф. 1968.

129

599 XIII. - 1065

I (HNCO)

14 13

XIII 1968
1199

A.P. (NCO+, HCO+, NH+)

Rowland C.C., & Land J.H.D.,
Dunby C.J.

Chem. Commun., 1963, 123, 1535-1536
(univ)

A spin-forbidden predissociation
in the mass spectrum of isocya-
nic acid.

○

Flap
etc

BuKu, 1969, 14 595 : w

1969

NH⁺

Life brewe B.H.,
Bessis N.

M.H.

Canad. J. Phys,

1969, 47, N 23, 2424

(see CH) III

14 13 XII 1198 1269

HNCO (v)

A.P. (NCO^+ ; NH^+)

Rowland C.G., Eland J.H.D., Danks C.F.
Internat. J. mass spectrom. and Ion
Phys, 1969, 2, 46, 457-469 (accol).

Kinetic energy distributions of fragment
ions in the mass spectrom of isocy-

Bull. Chem. Soc. Japan, 1970, 43, 2889-2894. Kin. acip. 14 Oct 70
Gak. No 2875

NH⁺

1 Д173. Электронные состояния CH и NH⁺.
Liu H. P. D., Verhaegen G. Electronic states of CH
and NH⁺. «J. Chem. Phys.», 1970, 53, № 2, 735—745
(англ.)

1970

Методом самосогласованного поля произведен неэмпирич. расчет молекулярных характеристик для ряда состояний CH и NH⁺ при различных межатомных расстояниях. Энергии корреляции рассчитывались с использованием атомных данных (описан метод этого расчета). Хорошее согласие рассчитанных характеристик молекул (равновесные расстояния, колебательные частоты и др.) с экспериментом наблюдается во всех случаях, где имеются возможности для сравнения. Подробно обсуждается сходство и различие в поведении потенц. кривых CH и NH⁺. Предсказывается, что для CH едва ли возможно наблюдение переходов в квартетные состояния, в то время как для NH⁺ должен существовать переход типа ⁴Π→⁴Σ⁻ в области около 1000 Å. Расчетная энергия диссоциации NH⁺ равна 3,4 эв. В. И. Барановский

Флешир
состояние

09. 1970. 1. 2

См так же
+1 [CH(III)]

Okabe H.

J. Chem. Phys., 1970,
53, 3507.

15

NH_4^+ ray 

U. N.

NH⁺

Bogdan A. J.
Hend C. W.

1941

A.P.

J. Phys. Chem. 1941,
45, 10, 1522-26

(Cu. HNC⁺)II

1979
Boyd R. J., Whitehead
M. A.

J. Chem. Soc. A., 1978,
3549.

7

NH^+ ray



M. U.

Насчет резюмэ. (CH, CH⁺, CH₂, CH₂⁺, CH₃, CH₃⁺,
ссылки. E_i, V_i (CH₄; CH₄⁺, CH₅; CH₅⁺, NH, NH₂, NH₂⁺, NH₃, NH₃⁺,
См. код NH₄; NH₄⁺; OH, OH⁺, OH₂; FH₂,
XI 2457 OH₂⁺; OH₃; OH₃⁺; FH, FH⁺, FH₂)
Nathan W. a., Mehre W. J., Curtiss L. A.,
Hople J. A.,
J. Amer. Chem. Soc., 1971, 93, N24,
6377-87

60

PX72

1974
Lim H.P.S., Verhaegen G.

Int. J. Quant. Chem.
Symp., 1971, 5, 103.

6.

NH^+
ray ●

M. H.

NH^+

Hinkley R. K;
et al.

1972

рацем.

"Mol. Phys",

1972, 24, n5, 1095-102.

"Конеч. квант-орбит. взаимодей.

● (см. ВетН; III)

NH⁺

Summer 2106 1973

cancel
p-ya-s

Cade Paul B.
Huc Winifred.
"Atom .Data and Nuci.
Data Tables."

1973, 12 N5, 415-66

(en. Lit; III)
3ak. 247

NH⁺

*4-5659

1974.

Blustin E. H., Binnet J. J.,

J. Thom. Soc. Paradoxy Trans.,
1974., Part 2, 70, 115, 825-33.

M.H.; J;

(em. Lig⁺; III)

Li₂, Li₂⁻; LiH., BeH.⁺, Be₂⁻, 1974
LiBe, CH, CH⁺, NH⁺, OH (Ei, u. u.,
p. 4703)
p. 4703

Blustin P.H.; Linnett J.W.,
J. Chem. Soc. Faraday Trans,
1974, Part 2, 70, N5, 837-52

10. 6

Oct. 1876.

расчет геом. структур. (CH_4 , CH_3 , CH_2 , CH , NH_4^+ , NH_3^+ , NH_2^+ , NH^+ , CH_3^+ , CH_2^+ , CH^+ , OH_3^+ , OH_2^+ , OH^+ , OH , H_2O , HF , FH_2^+)

Harisharan P.C., Pople J.A., \bar{x} 3791

Mol. Phys., 1974, 27, w1, 209-214 (рус.)

Accuracy of AH_n equilibrium geometries by single determinant molecular orbital theory: 17

Рус. 1974. 62102,

110

(19)

ЛН⁺

1974
Отчет по научно-исслед.
работе ЦВТАН, отдел №8
"Периоды намагниченности св. в
аэра, водорода и их соедине-
ний".

ш.п.

TX-5750

1975

рассетт и. н. (CH, NH⁺, OH, FH⁺, CF, NO, O₂⁺,
BeH, BH⁺, BeF, BO, CN, CO⁺, N₂⁺, C₂, BH, NH,
OH⁺, C₂)

Aberg P. W.

Mol. Phys, 1975, 30, N^o 2, 579-596

()

60

50728.1209

Ch, DB, TC

30731

NH^+ (A.P)

1975

3214

Compernelle F. Mass spectrum and heat of formation of isocyanic acid. Production of $/HCO/^{+}$ from discrete electronic state of molecular ion.

"Org. Mass Spectrom.", 1975, 10, N4, 289-294

(англ.)

0418 п.ч.

394 395

0410

ВИНИТИ

NH

1975

NH⁺

Pople J.A.

энергия
копирования.

"Mol. Phys." 1975, 29,
№ 2, 599-611 (англ.)

(ср. H₂; \overline{NI})

NH^+

оттиски 4953 а) 1976

10 Д255. Система полос $C^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ в излучении NH^+ . Krishnamurthy G., Saraswathy M. The emission band system $C^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ of NH^+ . «Pramana. J. Phys.», 1976, 6, № 4, 235—243 (англ.)

Проведены спектроскопич. исследования с разрешением 2,5 Å/мм полос 2614, 2730, 2825, 2885, 2980 Å системы $C^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ молекулярного иона NH^+ , образующегося и возбуждаемого в слабо конденсированном индукционном разряде в потоке аммиака. Из анализа вращательной структуры полос получены уточненные величины колебательных и вращательных по-

95128 - III - 28

ф. 1976

№10.

система
полос.

стоянных состояния $S^2\Sigma^+$. Структура вращательных подуровней Π^+ и Π^- колебательных уровней $v=0,1$ основного состояния $X^2\Pi$ аппроксимирована на основе выражения Джеймса с использованием двух наборов вращательных постоянных. Детальный анализ состояния $X^2\Pi$ показал наличие сильного возмущения s -компонент Π^+ -, Π^- -подуровней уровня $v=0$ вследствие перемешивания с соответствующими подуровнями уровня $v=0$ состояния $a^4\Sigma^+$. Для уровня $v=1$ ($X^2\Pi$) взаимодействие с уровнем $v=1$ ($a^4\Sigma^-$) настолько сильно, что подуровни Π^+ , Π^- испытывают значительное отклонение от положений полученных экстраполированием на основе констант уровня $v=0$. Библиография. 4. С. Л.

ommuca 4953a) 1976

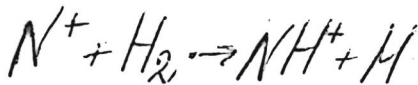
NH⁺

(i.e. n.)

85:11992f The emission band system $c^2\Sigma^+-x^2\Pi$ of NH^+ . Krishnamurthy, G.; Saraswathy, M. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, India). *Pramana* 1976, 6(4), 235-43 (Eng). Five red degraded bands belonging to the $C^2\Sigma^+-X^2\Pi$ system of NH^+ were excited in a mild condensed discharge through flowing NH_3 and were photographed on a 3.4-m Ebert grating spectrograph at a dispersion of 2.5 Å/mm. Rotational analyses of these bands yielded the vibrational and rotational consts. accurately. The rotational energy levels of the Π^+ and Π^- levels of the $v = 0$ and 1 levels of the ground state, $X^2\Pi$, were fitted in the James expression by using 2 sets of rotational consts. The perturbations obsd. in the $X^2\Pi$ state caused by the $a^4\Sigma^-$ state were examd. in greater detail.

BP-XIII-3456

C.A. 1976. 85 N2



[Orum 5345] 1977

(ном. номер
p-изм.)

Gillins M.A., et al.
Faraday Discuss. Chem.
Soc. 1977, No 62, 67-76

● (Discuss. 130-68)
or [5346]

МН+

Оттиски 10294

1977

9 Б7. Неэмпирические потенциальные кривые для валентных состояний иона NH^+ . Guest M. F., Hirst D. M. Ab initio potential curves for the valence states of the NH^+ ion. «Mol. Phys.», 1977, 34, № 6, 1611—1621 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитаны потенциальные кривые состояний ${}^2\Pi$, ${}^4\Sigma^-$, ${}^4\Pi$, ${}^2\Sigma^+$, ${}^2\Delta$ и ${}^2\Sigma^-$ молек. иона NH^+ , соотв-щие диссоциац. пределам $\text{N}({}^4S) + \text{H}({}^1S)$, $\text{N}({}^3P) + \text{H}({}^2S)$, $\text{N}({}^2D) + \text{H}({}^1S)$ и $\text{N}({}^1D) + \text{H}({}^2S)$. Используются базисные наборы сгруппированных гауссовых функций s -, p - и d -типа. Для построения многоконфигурац. волновых функций учтены все одно- и двукратно возбужденные конфигурации по отношению к выбранным основным конфигурациям, разным для разных электронных состояний. Рассмотрено несколько вариантов выбора основных конфигураций. При проведении вычислений общее число принимаемых во внимание конфигураций составило от 1000 до 3400. Показано, что при таком подходе результаты для энергии мало зависят от базиса и от числа неосновных конфигураций, входящих в волно-

М.И.; До

а. 1977
N 9

XIII-4201

вую функцию с малыми весами. Особенностью рассматриваемой системы является почти вырождение состояний $X^2\Pi$ и $a^4\Sigma^-$ в области равновесия. В рамках приближения Хартри — Фока состояние $a^4\Sigma^-$ оказывается на 0,036 ат. ед. ниже экспериментально идентифицированного как основное состояние $X^2\Pi$. При учете КВ разница в энергиях обоих состояний уменьшается на порядок, но относит. расположение уровней энергии остается прежним. Это расположение не меняется и при интенсивном варьировании орбитального базиса. С помощью процедуры интерполяции рассчитанных значений энергии кубич. сплайнами определены равновесные межъядерные расстояния и энергии диссоциации для всех рассмотренных состояний. В отличие от предыдущих расчетов не обнаружены локальные максимумы на потенциальных кривых состояний $X^2\Pi$ и $A^2\Sigma^-$.

А. В. Немухин

(ный

МН+

Оттиски 10294

1977

4 Д105. Неэмпирические потенциальные кривые для валентных состояний иона NH^+ . Guest Martyn F., Hirst David M. Ab initio potential curves for the valence states of the NH^+ ion. «Mol. Phys.», 1977, 34, № 6, 1611—1621 (англ.)

(ещ. на обороте)

XIII - 4201

(М. П. 80)

Ф. № 4, 1978

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовских ф-ций $9s5p1d/4s1p$, сгруппированном в $4s2p1d/3s1p$, рассчитаны потенц. кривые низколежащих состояний ${}^2\Pi$, ${}^4\Sigma^-$, ${}^4\Pi$, ${}^2\Sigma^+$, ${}^2\Delta$ и ${}^2\Sigma^-$ иона NH^+ для межъядерных расстояний 1,5—20 ат. ед. Использовано 5 вариантов учета взаимодействия одно- и двухкратно-возбужденных конфигураций (в наибольшем варианте 3400 конфигураций) и подробно обсуждено их влияние на результаты расчетов. Равновесные длины связей (в Å) и энергии диссоциации (в эв) найдены равными (в скобках имеющиеся эксперим. данные): $X^2\Pi$ 1,069 (1,081), 3,57 ($3,7 \pm 0,4$); $a^4\Sigma^-$ 1,093 (1,105), 3,68; $A^2\Sigma^-$ 1,265 (1,271), 1,51; $B^2\Delta$ 1,138 (1,152), 3,42; $C^2\Sigma^+$ 1,159 (1,180), 1,75. Энергии относятся к диссоциации на $\text{N}(^4S) + \text{H}(^1S)$. Состояния ${}^4\Pi$, ${}^2\Sigma^-$ и ${}^2\Pi$ найдены отталкивательными. В отличие от данных других авторов на потенц. кривых для состояний $X^2\Pi$ и $A^2\Sigma^-$ максимумы не обнаружены.

В. Л. Лебедев

NH^+

omnisecc 10294

1977

kb. acc. pages

XIII - 4201

89:31023b Ab initio potential curves for the valence states of the imidogen($1+$). Guest, Martyn F.; Hirst, David M. (Atlas Comput. Div., Rutherford Lab., Didcot, Engl.). Mol. Phys. 1977, 31(6), 1611-21 (Eng). Calcd. CI potential curves are reported for the low-lying 2Π , $4\Sigma^-$, 4Π , $2\Sigma^+$, 2Δ , and $2\Sigma^-$ states of NH^+ . Equil. distances agree with exptl. r_0 values. Potential max. are not found in the curves for the $X^2\Pi$ and $A^2\Sigma^-$ states. The 4Π , $2^4\Sigma^-$, and $2^2\Pi$ states are repulsive.

no more
repulsive

repulsive!



C.A., 1948, 89, NY

NH⁺

omni 5441

1977

(NH⁺, I)

Huntress W.P., Jr.
Astrophys. J. Suppl. Ser.,
1977, 33, (4), 495-514.

(see. H⁺; III)

NH^+

Maerk T.D. et al ¹⁹⁷⁷

J. Chem. Phys., 1977, 67 (8),
3795-802

J; A.P.

(cur. NH_3^+) III

IX-5525 ~~XXXXXXXXXXXX~~

1977

LiH^+ , HCl^+ , BH^+ , NH^+ , AlH^+ , PH^+

(Do; u.n.)

4-17790

Rasmus P., Meyer W.,

J. Chem. Phys. 1977, 66(1), 13-19 ¹⁶

Ionization energies of the first and
second row diatomic hydrides and...

C.A. 1977, 86, N16, 111415j

10

⊕

NH⁺

(DM. 27412)

1977

Taraşdar S. P.,

J. Quant. Spectrosc. Ra-
diat. Transfer. 1977,
17 (4), 537-42.

u.n.

Оттиски 6722

1978

3 Б76. Λ -удвоение в молекулах $^{14}\text{NH}^+$, $^{15}\text{NH}^+$ и $^{14}\text{ND}^+$. Wilson I. D. L. Λ -type doubling in the molecules $^{14}\text{NH}^+$, $^{15}\text{NH}^+$, and $^{14}\text{ND}^+$. «Mol. Phys.», 1978, 36, № 2, 597—610 (англ.)

Проведены неэмпирич. расчеты величин расщеплений, обусловленных Λ -удвоением в состояниях $X^2\Pi$ молекул $^{14}\text{NH}^+$, $^{15}\text{NH}^+$, $^{14}\text{ND}^+$ для вращательных уровней с квантовыми числами I от $1/2$ до $7/2$. Показано, что для правильного воспроизведения величин расщеплений необходимо рассмотреть взаимодействие состояния $X^2\Pi$ с состояниями $a^4\Sigma^-$, $A^2\Sigma^-$ и $C^2\Sigma^-$. Взаимодействие с состоянием $a^4\Sigma^-$ учтено с помощью точной диагонализации гамильтониана, а влияние остальных состояний оценено во втором порядке теории возмущений. Полученные результаты полностью согласуются с эксперим. данными для $^{14}\text{NH}^+$. Указано, что в случае $^{14}\text{ND}^+$ рассчитанные величины расщеплений более надежны, чем измеренные экспериментально.

Б. И. Жилинский

NH^+

ND^+

М. И.

2:1979, N3

NH^+

2 Д194. Удвоение Λ -типа в молекулах $^{14}NH^+$, $^{15}NH^+$ и $^{14}ND^+$. Wilson I. D. L., Λ -type doubling in the molecules $^{14}NH^+$, $^{15}NH^+$, and $^{14}ND^+$. «Mol. Phys.», 1978, 36, № 2, 597—610 (англ.)

Экспер.
составлен.

Теоретически рассмотрено Λ -удвоение вращательных уровней электронного состояния $^2\Pi$ двухатомной молекулы с учетом магн. взаимодействий состояний $^2\Pi$ с состояниями $^2\Sigma$ и $^4\Sigma$ (известная теория Ван-Флека основана на учете взаимодействия между $^2\Pi$ и $^2\Sigma$). Составлена матрица электронно-вращательной энергии для состояния $^2\Pi$ с учетом недиагональных матричных элементов спин-орбитального и спин-спинового взаимодействий. Для вычисления орбитальных матричных элементов использован неэмпирич. метод ССП МО ЛКАО в базе слэтеровых орбиталей. Выполнен расчет величины Λ -удвоения для вращательных уровней с $J=1(2-7)2$ основного электронного состояния $X^2\Pi$ молекулярных ионов $^{14}NH^+$, $^{15}NH^+$ и $^{14}ND^+$. Получено хорошее согласие с эксперим. данными. Отмечено, что вклад взаимодействия $X^2\Pi$ с $^4\Sigma^-$ в Λ -удвоение для некоторых уровней составляет почти половину полной величины Λ -удвоения.

М. Р. Алиев

Р. 1979. 2

1978
6722

NH⁺

ommuu 6722

1978

ND⁺

90: 159319r A-type doubling in the molecules imidogen(1+) (nitrogen-14), imidogen(1+) (nitrogen-15), and deuteriumimidogen(1+) (nitrogen-14). Wilson, I. D. L. (Phys. Chem. Lab., Univ. Oxford, Oxford, Engl.). *Mol. Phys.* 1978, 36(2), 597-610 (Eng). The A-type doubling in the X²Π states of ¹⁴NH⁺, ¹⁵NH⁺, and ¹⁴ND⁺ for rotational levels with $J = 1/2-7/2$ was studied. Van Vleck's theory was extended to include the effect of interactions between the X²Π state and a low-lying ⁴Σ⁻ state. Interactions between the X²Π state and the a⁴Σ⁻ state, and the A²Σ⁻ and C²Σ⁺ states were treated using an exact matrix diagonalization and 2nd-order perturbation theory, resp. The results agree with the exptl. values of R. Colin and A. E. Douglas (1968). The X²Π-a⁴Σ⁻ interaction contributes significantly to the calcd. values of the A-type doubling.

Lyubov.



C.A. 1979, 20, 1120

NH⁺

1979

Richards G.

Кв. иек
рацем

Chem. Brit., 1979, 15, 2, 68-71.



1см. OH; III)

*NH

1980

суд. к.

Теор. хим. акт, 1980,
57, N2, 107-30

рецензия
и. в. в. в.
(3)

с. 107-111

NH⁺

Commu 93441

~~1980~~

Trivedi H.P., et al

J. Chem. Phys., 1980,

72, N5, 3438-39.

paper
u.n.

● (see BeF) III

NH^+

1981

Gemmell D. S.

Nucl. Instrum. and
Meth., 1981, 191, N1-3,

425 - 431.

●
(see H_2^+ ; 11)

номер,
страницы.

NH^+

1981

Gemmell D. S.

non; $Z\bar{e}$

IEEE Trans Nucl. Sci.,
1981, 28, N2, 1168-1173.

(cu. H_2^+ ; III)

NH^+

1981

Sun Hosung S.M.G.,
et al.

γ

J. Chem. Phys., 1981, 74,
N12, 6842-6848.

●
(em. CM; III)

NH⁺

Литтл 14130 1982

21 B177. Сверхтонкая структура в электронных спектрах NH⁺, PH⁺ и SH⁺, разрешенная методом спектроскопии лазерно-ионных пучков. Edwards C. P., Maclean C. S., Sarre P. J. Hyperfine structure in electronic spectra of NH⁺, PH⁺, and SH⁺ resolved by laser-ion beam spectroscopy. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 7, 3829—3831 (англ.)

М.А.

Методом лазерно-ионных пучков впервые разрешена ядерная СТС в электронных спектрах NH⁺, PH⁺ и SH⁺. Пучок быстрых ионов, образующихся при электронном ударе из молекул NH₃, PH₃ и H₂S, пропускали коаксиально с излучением Kг⁺-лазера ($\lambda \sim 400$ нм). Совпадение с различными отдельными лазерными линиями достигалось путем доплеровской настройки вращательных линий. Регистрировались дочерние ионы N⁺, P⁺ и S⁺, образующиеся в результате преддиссоциации верхних электронно-возбужденных состояний. СТС наблюдалась в виде удвоения на половине из свыше 50 вращатель-

Ⓚ
(+2)

X. 1982, 19, N 21

ных линий перехода $A^3\Pi-X^3\Sigma-SH^+$ (главным образом
полоса 1—3, $b_F = -85$ МГц, $c = +12$ МГц для состоя-
ния $^3\Sigma^-$, $b_F = +400$ МГц для состояния $^3\Pi$) и ряде
вращательных линий в спектре NH^+ и в виде расщепле-
ния на квартеты (3P и 1H) на ряде вращательных ли-
ний перехода $A^2\Delta-X^2\Pi$ PH^+ . В. М. Ковба

NH+

О.М. Мушк 14/30

1982

96: 171526n Hyperfine structure in electronic spectra of NH⁺, PH⁺, and SH⁺ resolved by laser-ion beam spectroscopy. Edwards, C. P.; Maclean, C. S.; Sarre, P. J. (Dep. Chem., Univ. Nottingham, University Park/Nottingham, UK NG7 2RD). *J. Chem. Phys.* :1982, 76(7), 3829-31 (Eng). Nuclear hyperfine structure was obsd. for the 1st time in electronic spectra of NH⁺, PH⁺, and SH⁺ by using coaxial laser and fast ion beams, and by Doppler-tuning rotational lines into resonance with various single frequency Kr ion laser lines near 400 nm. In each of these ions the upper electronic state involved in the transition is weakly predissocd. Transitions were detected by monitoring the appearance of the daughter ions N⁺, P⁺, and S⁺ which arose from the predissocn. Over 50 rotational lines in the $\Delta^3\Pi \leftarrow X^3\Sigma$ transition in SH⁺ were recorded, 1/3 of which were assigned to the 1-3 band, and ~1/2 of there exhibit hyperfine doubling due to the proton nuclear spin. A no. of rotational lines in the $A^2\Delta \leftarrow X^2\Pi$ transition of PH⁺ were obsd.

сверхтонкая
структура,
лазерный
спектр



(+2) PH⁺, SH⁺



C. A. 1982, 96, N20

NH^+

1982

Singh P.D., De Almei-
da A.A.

спектры

J. Quant. Spectrosc.
and Radiat. Trans-
fer, 1982, 27, N4, 417 -
479. (Cres. OH^+ ; III)

Ф-К

NH⁺

Отпуск 13917,

1982

Singh P. D., De Almeida
A. A.

Факторы
фракта-
комбина

J. Quant. spectrosc. and
Radiat. Transfer. 1982,
27, N4, 471-479.

NH⁺

1983

Bruna Pablo J., Mirsch Ger-
hard, et al.

J. chem. Phys.
61;

Mol. Ions: Geom. and Electron.
Struct. Proc. NATO Adv. Study
Inst., Isle of Kos, Sept. 30
Okt. 10, 1980. New York;
London, 1983, 309-354.

(see SH₂⁺; III)

NH^+

[Om. 16886]

1983

Farnell L., Pople J.A.,

ab initio et al.

paper J. Phys. Chem., 1983,

87, N1, 79-82.

NH^{2+}

1983

Pope Susan A., Hillier Ian H., et al.

Структура

и

стабиль-

носцев.

Chem. Phys. Lett.

1983, 95 (3), 247-249.

(сер. OH^{2+} ; III)

NH^+

Дм. 18115 1983

8 Б1015. Расчет колебательно-вращательного спектра NH^+ . Calculation of the rotation-vibration spectrum of NH^+ . Farnell Leslie, Ogilvie John F. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 101, № 1, 104—132 (англ.)

По теории возмущений Мёллера — Плессета 3-го порядка в большом базисе рассчитаны потенциальные кривые состояний $X^2\Pi$ и $a^4\Sigma$ молек. иона NH^+ . В кач-ве нулевого приближения использованы волновые ф-ции неограниченного метода Хартри — Фока. Для обоих состояний в приближении Хартри — Фока рассчитаны ф-ции дипольного момента. Рассчитана колебательно-вращательная структура спектра рассматриваемых состояний с учетом их сильного спин-орбитального взаимодействия. Полученные волновые ф-ции использованы для вычисления моментов колебательно-вращательных переходов. Проведено отнесение большого числа ранее не отнесенных линий. Полученные результаты хорошо согласуются с эксперим. данными.

В. Б. Павлов-Веревкин

расчет м.п.

Х. 1984, 19, № 8

NH⁺

Ом.

18115

1983

4 Д58. Расчет вращательно-колебательного спектра NH⁺. Calculation of the rotation—vibration spectrum of NH⁺. Farnell Leslie, Ogilvie John F. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 101, № 1, 104—132 (англ.)

По методу ССП и с волн. ф-циями неограниченного базиса Хартри—Фока с включением электронной корреляции рассчитаны и построены кривые потенц. энергии иона NH⁺ в состояниях X²Π и a⁴Σ⁻ при значениях межатомного расстояния R от 0,7·10⁻¹⁰ м до ∞. Обе кривые аппроксимируются полиномами, для которых найдены численные коэф. Во втором методе достигнуто лучшее совпадение с эксперим. значениями R_e и разностей потенц. энергии в состояниях ²Π и a⁴Σ⁻ при R=R_e и R=∞. Получены кривые зависимости от R дипольного момента с началом в центре масс и с положит. полюсом на атоме водорода. Численные значения энергии в состояниях X²Π и a⁴Σ⁻ ионов NH⁺, ND⁺, ¹⁵NH⁺ и ¹⁵ND⁺ определены при значениях коле-

расчет
вращательно-
колебательн-
спектра

ср. 1984, 18, 44

бательного квантового числа $v=0, 1, 2$. При значениях вращательного квантового числа $J=1/2 \div 11/2$ вычислены энергии вращательных уровней в четных и нечетных состояниях ${}^2\Pi_{1/2}$, ${}^2\Pi_{3/2}$ и в состояниях ${}^4\Sigma_{1/2}^-$ и ${}^4\Sigma_{3/2}$. Дано отнесение эксперим. частот к колебательно-вращательным переходам. Вычислены энергии и дипольные моменты для чисто вращательных переходов в основном колебательном состоянии и для P -, Q -, R -ветвей переходов $v=0 \rightarrow v=1$. Построены диаграммы уровней энергии с указанием частот переходов между ними.

М. А. Ковнер



NH⁺

Om. 18115

1983

99: 148625x Calculation of the rotation-vibration spectrum of aminyl ion. Farnell, Leslie; Ogilvie, John F. (Res. Sch. Chem., Australian Natl. Univ., Canberra, 2601 Australia). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 101(1), 104-32 (Eng). Ab initio MO calcns. were used to compute potential energy and dipole moment functions for the $X^2\Pi$ and $a^4\Sigma^-$ states of NH⁺. These functions were used to compute rotational-vibrational energy levels, including the interaction between the 2 states. Transition moments were calcd. for transitions between these levels, using either the results of numerical diagonalization of the Hamiltonian, or more approx. by fitting analytic functions. Good agreement with exptl. data is found, and the results were also used to interpret previously unassigned spectral lines.

(номеру. крм
вме и спект,
ab initio
расчет)

C.A. 1983, 99, n 18

NH⁺

1984

10 Д285. Спектроскопия и динамика хемилюминесценции, сопровождающей реакции $N^+(^1D) + H_2 \rightarrow NH^+(B^2\Delta)$ и $N^+(^1D) + D_2 \rightarrow ND^+(B^2\Delta) + D$. Spectroscopy and dynamics of the chemiluminescent reactions $N^+(^1D) + H_2 \rightarrow NH^+(B^2\Delta) + H$ and $N^+(^1D) + D_2 \rightarrow ND^+(B^2\Delta) + D$. Kusunoki I., Ottinger Ch. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 5, 1872—1881 (англ.)

Излучение ионов $NH^+(ND^+)$, образованных в результате столкновений $N^+ + H_2(D_2)$ в диапазоне энергий 1—9 эВ (Ц-система), регистрировалась в спектральной области 3500—5000 Å. Показано, что наблюдаемое излучение связано с переходами $B^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$ ионов $NH^+(ND^+)$, для которых обнаружен ряд полос,

спектр

ср. 1984, 18, N 10

не наблюдавшихся ранее. Сопоставление с аналогичными реакциями, сопровождающимися хемилюминесценцией, показывает, что в данном случае достигается высокая степень возбуждения $NH^+(ND^+)$. В результате расчета наблюдаемого спектра определены структурные постоянные ионов-продуктов, а также вращательные и колебательные заселенности уровней. Исходное 1D -метастабильное состояние N^+ идентифицировано с использованием найденного значения пороговой энергии реакции, тогда как конечные состояния типа $B^2\Delta$ ионов $NH^+(ND^+)$ — из анализа корреляционных диаграмм электронных состояний; даны возможные объяснения отсутствия состояний типа $A^2\Sigma^-$, наиболее близких к $B^2\Delta$. Г. А. Вомпе

NH⁺

1984

21 Б4517. Спектроскопия и динамика хемилуминесцентных реакций $N^+(^1D) + H_2 \rightarrow NH^+(B^2\Delta) + H$ и $N^+(^1D) + D_2 \rightarrow ND^+(B^2\Delta) + D$. Spectroscopy and dynamics of the chemiluminescent reactions $N^+(^1D) + H_2 \rightarrow NH^+(B^2\Delta) + H$ and $N^+(^1D) + D_2 \rightarrow ND^+(B^2\Delta) + D$. Kusunoki I., Ottinger Ch. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 5, 1872—1881 (англ.)

Исследованы спектры Хл при λ 350—500 нм в р-ции $N^+ + H_2(D_2)$. Использован плазменный источник ионов N^+ при давл. $N_2 \sim 0,16$ Торр. Пучок ионов направлялся в столкновит. камеру, в к-рой давл. газа-мишени поддерживалось равным 10 или 20 мТорр, энергия столкновений $\sim 1-9$ эВ. В предположении, что источником Хл служат переходы $B^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$ иона $NH^+(ND^+)$, идентифицированы ранее не наблюдавшиеся электронно-колебат. полосы и найдены спектроскопич. константы $NH^+(ND^+)$. Методом RKR рассчитаны потенциальные кривые термов В и Х. Моделирование спектров Хл позволило

спектр, λ ;



(4)



NH⁺

X. 1984, 19, N21.

определить относит. населенности колебат. и вращат. уровней возбужденных состояний. Для $\text{NH}^+(B)$ $T_{\text{кол}} = 42\,000^\circ\text{C}$, $T_{\text{вр}} = 7000^\circ\text{C}$, а для $\text{ND}^+(B)$ колебат. распределение инвертировано. Из анализа спектров Хл следует, что выход р-ции в состояние $\text{NH}^+(A^2\Sigma^-) \leq 20\%$ от выхода в $\text{NH}^+(B^2\Delta)$, хотя эти состояния принадлежат одной и той же электронной конфигурации и A расположено ниже B на $0,13$ эВ. Л. Ю. Мельников

NH^+

1984

Power Deirdre, Brint
Paul, et al.

J, A M_f,
61;

J. Mol. Struct., 1984,
110, N1-2, Suppl. Theochem,
19, N1-2, 155-166.

(see NH; III)

NH^+

1985

Азатян В. В.,
Дивазян Р. Г. и др.

спектр

Кремий. и Кайталец.,
1985, 26, № 6, 1287-1291.

(сер. NCl^+ ; III)

МН†

1985

10 Б1171. Фотоионизация аминильного радикала.
Photoionization of the amidogen radical. Gib-
son S. T., Greene J. P., Berkowitz J. «J. Chem.
Phys.», 1985, 83, № 9, 4319—4328 (англ.) Место хра-
нения ГПНТБ СССР

$\text{N}_2, \text{D}_2, \text{NH}_2$

Исследованы фотоионизац. масс-спектры N_2H_4 и NH_2 , получаемые при взаимодействии атомарного во-
дорода с N_2H_4 . Приведены кривые относит. выхода
фотоионов N_2H_3^+ , N_2H_2^+ , NH_2^+ , NH^+ как ф-ций дли-
ны волны возбуждающего излучения λ . В масс-спект-
рах наблюдались также ионы N_2H_5^+ , N_2O_4^+ , N_2H^+ ,
 N_2^+ , NH_3^+ . В кач-ве источника возбуждения
($\lambda=680-1160 \text{ \AA}$) использованы многолинейчатый
спектр молек. H_2 и континуум Гопфильда He. Адиа-
батич. Пт ионизации NH_2 , $11,14 \pm 0,01 \text{ эВ}$, оказался на
0,32 эВ ниже, чем по данным ФЭС. На кривых вы-
хода фотоионизации NH_2 обнаружены ридберговские

43

X. 1987, 19, N10

серии (автоионизация), сходящиеся к состоянию \tilde{A}^1A_1 иона ($12,445 \pm 0,002$ эВ). Из данных по пороговой энергии образования NH^+ рассчитаны (в ккал/моль): $\Delta H_{f_0}^0(NH^+) = 396,3 \pm 0,3$; $\Delta H_{f_0}^0(NH) = 85,2 \pm 0,4$; $\Delta H_{f_0}^0(NH_2) = 45,8 \pm 0,3$; $D_0(H_2N-H) = 106,7 \pm 0,3$; $D_0(HN-H) = 91,0 \pm 0,5$; $D_0(N-H) = 79,0 \pm 0,4$. Обсужденно происхождение малоинтенсивных пиков в спектре фотоионизации NH_2 в обл. $\lambda > 1075$ А. В. М. Ковба

NH⁺

Com. 23893

1985

Gibson S.T., Green F.P.,

($\Delta_f H, D_0$) Berkowitz F.,

J

J. Chem. Phys., 1985,

83, N 9, 4319-4328.

NH⁺

1985

Hale B.C., Perkins J.

лазер-
возд.
спуор.

Energy Res. Abstr. 1985,
10(24), Abstr. No 51904.

(see ● CO⁺; III)

NH⁺

om. 23191

1986

/ 12 Б1014. Неэмпирические расчеты дублетных состояний NH⁺. AB initio calculations of doublet states of NH⁺. Kusunoki Isao, Yamashita Koichi, Morokuma Keiji. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 123, № 6, 533—536 (англ.)

В области межъядерных расстояний 1,5—20 ат. ед. рассчитаны энергии 8 низших дублетных состояний молек. иона NH⁺. Используются базисы гауссовых функций (9s5p1d)/[4s2p1d] для N и (5s1p)/[3s1p] для H. Волновые ф-ции построены в приближении конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям. Полиномиальной аппроксимацией рассчитанных точек построены потенциальные кривые и определены спектроскопич. постоянные. Вычислены зависимости моментов переходов X²Π—A²Σ⁻ и X²Π—B²Δ от межъядерного расстояния. Отмечено качеств. согласие ф-ций моментов переходов с эксперим. зависимостями.

А. В. Немухин

М. П.

X. 1986, 19, N 12

NH⁺

1986

7 Д98. Неэмпирические расчеты дублетных состояний NH⁺. Ab initio calculations of doublet states of NH⁺. Kusunoki Isao, Yamashita Koichi, Morokuma Keiji. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 123, № 6, 533—536 (англ.)

Многоссылочным методом конфигурац. взаимодействия, включавшим все конфигурации, одно- и двукратно возбужденные по отношению к ссылочным (за исключением возбуждений с σ_1 орбитали) с использованием двухэкспонентного базиса, дополненного поляризационными ф-циями, в области межъядерных расстояний от 1,5 до 20,0 бор выполнены расчеты 8 низколежащих дублетных состояний иона NH⁺. Для X²Π—A²Σ⁻ и X²Π—B²Δ рассчитаны моменты перехода, и для X²Π, A²Σ⁻, B²Δ и C²Σ⁺ с помощью аппроксимации полученных кривых потенц. энергии полиномами 4-ой степени, найдены основные спектроскопич. постоянные. Отмечено хорошее согласие полученных результатов с эксперим. данными.

А. И. К.

(М.П.)

с/р 1986, 18, № 7

NH⁺

om. 23191

1986

104: 118725j Ab initio calculations of doublet states of aminyl (NH⁺). Kusunoki, Isao; Yamashita, Koichi; Morokuma, Keiji (Res. Inst. Sci. Meas., Tohoku Univ., Sendai, Japan 980). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 123(6), 533-6 (Eng). The 8 low-lying doublet states of the NH⁺ ion were investigated with an ab initio CI method including all single and double excitations from a multireference configuration space (MUSD CI). The spectroscopic consts. for the X²Π, A²Σ⁻, B²Δ, and C²Σ⁺ states and the transition moments for X²Π-A²Σ⁻ and X²Π-B²Δ were calcd. The results were compared with expts. and other calcns.

теор. расчёт
низших энерг.
состоян.

C. A. 1986, 104, N 14.

NH^+

1986

4 Л118. Сверхтонкая структура низколежащего вращательного перехода иона NH^+ . Observation of the lowest rotational transition of NH^+ with resolved hyperfine structure. Verhoeve P., Ter Meulen J. J., Meerts W. Leo, Dumanus A. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 132, 213—217 (англ.)

С использованием субмиллиметрового лазерного спектрометра разрешена СТС вращательного перехода $J=3/2 \leftarrow 1/2$ в основном состоянии ($X^2\Pi$, $v=0$) иона NH^+ . Определены константы СТС, которые хорошо совпадают с результатами неэмпирич. расчетов.

М. А.

(М.А.)

ф. 1987, 18, 24

NH⁺

1986

Verhoeve P., Bekooij J.P.,
et al.

Proc. 9th Int. Conf. High
Resolut. Infrared Spectr-
sc., Liblice near Prague,
Sept. 8-12, 1986. Progr. Sess.
Abstr. Pap. Prague, s.a., 61.

M.N.

(see OH⁺; III)

NH⁺

1986

8 B1244. Наблюдение низших вращательных переходов NH⁺ с разрешенной сверхтонкой структурой. Observation of the lowest rotational transition of NH⁺ with resolved hyperfine structure. Verhoeve P., Ter Meulen J. J., Meerts W. Leo, Dymanus A. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 132, № 2, 213—217 (англ.)

С использованием субмиллиметрового перестраиваемого лазерного спектрометра, работающего на принципе смешивания излучения лазера на HCN (891 и 964 ГГц) с перестраиваемым МВ-излучением клистронов (50—110 ГГц) измерены чисто вращат. спектры поглощения ионов NH⁺, образующихся в разряде в полом катоде, в обл. перехода 3/2—1/2 в основном состоянии X²Π (v=0). Разрешено семь компонент STC перехода (I=3/2, d)—(I=1/2, d) в обл. 1019,2 ГГц и 5 компонент перехода (I=3/2, c)—(I=1,2, c) в обл. 1012,5 ГГц. Выполнен анализ наблюдаемой структуры и рассчитаны след. параметры сверхтонкого расщепления для состояния X²Π (v=0) иона NH⁺ (МГц): $abc_N = 301,9(4,5)$, $sba_N = 61,9(1,6)$, $d_N = 165,0(2,4)$, $eq_0Q = -9,6(6,5)$, $eq_2Q_N = -37,2(9,8)$, $abc_H = 142,8(6,4)$, $sba_H = -51,4(2,0)$, $d_H = 41,7(3,3)$. Полученные значения хорошо согласуются с данными неэмпирич. расчетов.

М.А.

Х. 1987, 19, № 8

С. Б. Осин

NH⁺

[Om. 25266] 1986

106: 40643a Observation of the lowest rotational transition of aminyliumyl (NH⁺) with resolved hyperfine structure. Verhoeve, P.; Ter Meulen, J. J.; Meerts, W. Leo; Dymanus, A. (Fys. Lab., Kathol. Univ., 6525 ED Nijmegen, Neth.). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 132(2), 213-17 (Eng). The rotational transition $J = 3/2 \leftarrow 11/2$ of the X²H, $v = 0$ ground state of NH⁺ was obsd. with resolved hyperfine structure. Spectra were recorded using a sub-mm tunable laser sideband spectrometer. Accurate hyperfine consts. were obtained which showed agreement with ab initio calcd. consts.

Французам.
непечено,
пост. сверх-
мощного
расширения.

С. А. 1987, 106, № 6

NH^+

(Am. 27282)

1987

Farnell L., Ogilvie J.F.,

ab initio
параметры
дублирования
состояния.

Chem. Phys. Lett., 1987
137, N 2, 191-192.

NH⁺

Am. 27283

1987

ab initio
расчет
губнмн.
состоян.

Yamashita K.,
Yabushita S., et al.,

Chem. Phys. Lett;
1987, 137, No 2, 193-
194.

$NH^+(2)$

[ow. 25904] 1987

Pople J. A.

$\Delta_f H^\circ$,

et. n.

J. Phys. Chem.,

1987, 91, n 1, 155-162.



NH⁺

1987

106: 220145y Energy dependence, kinetic isotope effects, and thermochemistry of the nearly thermoneutral reactions atomic nitrogen ion(1+) + molecular hydrogen → aminyliumyl + atomic hydrogen (N⁺(³P) + H₂(HD,D₂) → NH⁺(ND⁺) + H(D)).

Ervin, Kent M.; Armentrout, P. B. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(5), 2659-73 (Eng). The reactions of N⁺(³P) ions with H₂, HD, D₂ are examd. using guided ion beam tandem mass spectroscopy. Abs. reaction cross sections are measured from near thermal energies to 30 eV relative energy. The low energy cross section behavior is analyzed using empirical threshold models and phase space theory. The results are compared to other recent studies of the N⁺ + H₂ system. The reaction endothermicity for N⁺(³P) + H₂ → NH⁺ + H, $\Delta H_0^\circ = 0.033 \pm 0.024$ eV (0.76 ± 0.55 kcal/mol), and the bond energy of NH⁺, D_0° (N-H⁺) = 3.51 ± 0.03 eV (80.9 ± 0.6 kcal/mol), are derived from the results.

(D₀^o)

C.A. 1987, 106, N26

NH⁺

(OM. 29229)

1988

(ex cream)

Amano T.

(No)

Phil. Trans. Roy. Soc.
London, 1988, A324,
N1578, 163-178.

NH²⁺

(OM 30152)

1988

Mamdan M.,
Mazumdar S. et al.

u. n. J. Phys. B. 1988. 21, N4.
p. 2571-2584.

(Cor. ● CH²⁺; III)

NH⁺

1988

108: 228702q Infrared spectroscopy of aminyliumyl (NH⁺): an analysis of the perturbation between the X²Π and a⁴Σ⁻ states. Kawaguchi, K.; Amano, T. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc., Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(8), 4584-91 (Eng). The $\nu = 1-0$ vibration-rotation transitions in the X²Π and a⁴Σ⁻ states and those between the 2 electronic states were obsd. with a difference frequency laser as a radiation source. The two electronic states (X²Π and a⁴Σ⁻) lie close together and interact each other strongly through the spin-orbit coupling. A merged least-squares fit was carried out with the present IR transition wave nos., some of the previous optical term values, and the recent far-IR rotational transition frequencies to det. the spectroscopic parameters precisely. The equil. internuclear distance is 1.0692 ± 0.0002 and 1.0924 ± 0.0001 Å for the X and a states, resp. The A-type doubling transition frequencies were calcd. for several of the lowest J states with the mol. consts. obtained and the hyperfine coupling consts. detd. from the far-IR transitions.

UK chemp,
X²Π, a⁴Σ,
M.A.

C.A. 1988, 108, N 26

NH⁺

0.11 29624

1988

19 Б1200. Инфракрасная спектроскопия NH⁺: анализ возмущения между состояниями X²Π и a⁴Σ⁻. Infrared spectroscopy of NH⁺: An analysis of the perturbation between the X²Π and a⁴Σ⁻ states. Kawaguchi K., Amano T. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 8, 4584—4591 (англ.)

М. Л.

С использованием перестраиваемого на разностной частоте лазера в обл. частот 2470—3080 см⁻¹ с точностью около 0,002 см⁻¹ измерены колебательно-вращат. спектры $\nu=0-1$ электронных переходов ²Π_{1/2}—²Π_{1/2}, ²Π_{3/2}—²Π_{3/2}, ⁴Σ—⁴Σ⁻, ⁴Σ⁻—²Π_{1/2}, ⁴Σ⁻—²Π_{3/2} и ²Π—⁴Σ⁻ иона NH⁺. Образец генерировался в разряде полого катода в смеси N₂, H₂, He или NH₃, He. Анализ полученных спектров выполнен с учетом эффектов центробежного искажения спин-спинового и спин-вращат. взаимодействий в состоянии ⁴Σ, сильного спин-орбитального взаимодействия между состояниями ²Π и ⁴Σ и эффекта центробежного искажения спин-орби-



X. 1988, 19, N 19

тального взаимодействия между состояниями ${}^2\Pi$ и ${}^4\Sigma$.
Значения молек. постоянных NH^+ в состояниях $X^2\Pi$ и
 $a^4\Sigma^-$ определены с существенно более высокой точ-
ностью, чем ранее использовавшиеся на основе экспе-
рим. и расчетных данных. Вычислены термы энергии
в состояниях $v=1$ и $v=0$ для $X^2\Pi$ и $a^4\Sigma^-$ и построе-
на диаграмма энергетич. уровней. С. Н. Мурзин



NH⁺

011 29624

1988

10 Л158. ИК-спектроскопия NH⁺. Анализ возмущений между состояниями X²Π и a⁴Σ⁻. Infrared spectroscopy of NH⁺: an analysis of the perturbation between the X²Π and a⁴Σ⁻ states. Kawaguchi K., Amano T. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 8, 4584—4591 (англ.).

С использованием ИК-лазера на разностной частоте исследованы колебательные переходы 1—0 в состояниях X²Π и a⁴Σ⁻ и электронный переход a—X ионов NH⁺, которые создавали в тлеющем разряде в смеси N₂H₂He или NH₃He. Близко расположенные состояния X²Π и a⁴Σ⁻ сильно связаны за счет спин-орбитального взаимодействия. С привлечением литературных данных уточнены значения спектроскопич. постоянных для этих состояний NH⁺. Для равновесных межъядерных расстояний NH⁺ в состояниях X и a получены значения: (1,0692 ± 0,0002) Å и (1,0924 ± 0,0001) Å. Определены константы сверхтонкого взаимодействия. Библ. 30.

В. С. Иванов

М.П.

ф. 1988, 18, N 10

NH⁺

От 32624

1989

7 Б1017. Взаимодействие между состояниями X²Π и a⁴Σ⁻ иона NH⁺. Perturbations between the X²Π and a⁴Σ⁻ states of the NH⁺ ion / Colin R. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 136, № 2.— С. 387—401.— Англ.

На основании полученных ранее эксперим. данных (// Canad. J. Phys.— 1968.— 46.— 61) об электронно-колебательно-вращат. переходах A²Σ⁻→X²Σ, B²Δ→X²Π, C²Σ→X²Π молекул ¹⁴NH⁺, ¹⁵NH⁺ и ¹⁴ND⁺ методом РКР, рассчитаны потенциальные кривые для состояний X²Π и a⁴Σ⁻. Проанализировано взаимное возмущение этих состояний, вычислены для обоих состояний значения r_e, ω_e, ω_ex_e, B_e, α_e, факторы Франка—Кондона (v', v''=0,1), параметры спин-орбитального взаимодействия, а также электронный терм для состояния a⁴Σ⁻.

П. В. Ганелин

М.П.

X. 1990, № 7

(7) № 9⁺

NH⁺

(Om 32624)

1989

111: 86522s Perturbations between the X²Π and a⁴Σ⁻ states of the aminyliumyl (NH⁺) ion. Colin, R. (Lab. Chim. Phys. Mol., Univ. Libre Bruxelles, Brussels, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 136(2), 387-401 (Eng). On the basis of previously published optical data of C. and A. E. Douglas (1968) for 3 isotopes (¹⁴NH⁺, ¹⁵NH⁺, and ¹⁴ND⁺) of the NH⁺ ion, a study of the perturbations occurring between the X²Π and a⁴Σ⁻ states was carried out using matrix diagonalization techniques. This makes it possible to derive for both states equil. rotational and vibrational consts., from which Rydberg-Klein-Rees potential energy functions, vibrational overlap integrals, electronic interaction parameters, and a pure electronic term value for the a⁴Σ⁻ state are deduced.

возмущ.

X²Π и a⁴Σ⁻
COCM., M.N.

a⁴Σ⁻ COCM.



C.A. 1989, 111, N10

NH⁺

От 32624

1989

2 Д112. Возмущения состояний $X^2\Pi$ и $a^4\Sigma^-$ иона NH^+ . Perturbations between the $X^2\Pi$ and $a^4\Sigma^-$ states of the NH^+ ion / Colin R. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 136, № 2.— С. 387—401.— Англ.

На основании данных оптич. спектроскопии исследованы взаимодействия между ровибронными состояниями ионов $^{14}NH^+$, $^{15}NH^+$ и $^{14}ND^+$, соответствующими электронным термам $X^2\Pi$ и $a^4\Sigma^+$. Найдены параметры матричных элементов эффективного гамильтониана для четырех взаимодействующих вибронных состояний, позволяющие воспроизвести экспериментально наблюдаемые термы с точностью до $0,1 \text{ см}^{-1}$. Вычислены основные молекулярные постоянные, в том числе чисто электронное значение T_e для состояния $a^4\Sigma^-$. Построены потенциалы Ридберга — Клейна — Риса для электронных состояний и найдены значения факторов Франка — Кондона для переходов между колебательными уровнями $v', v'' = 0, 1$.

А. В. Зайцевский

М.Л.

(+) ~~1~~

ср. 1990, № 2

NH⁺



NH^+

1989

Kotzian Manfred,
Rösch Notker, et al.

et al.

Chem. Phys. Lett. 1989,
160, n2. C. 168-174.

(Cer. ● HF^+ ; III)

NH^+

1990

Baeck R.K., Lee Yoon Sup.

et. n.

J. Chem. Phys. 1990.

93, N 8. C. 5775-5782.

(cell. ● BH^+ ; III)

NH⁺

(Im 34670)

1990

113: 123630q Electron-impact dissociation of ammonia: formation of aminyliumyl (NH⁺) ions in excited states. Mueller, U.; Schulz, G. (FB Exp. Phys., Univ. Saarlandes, D-6600 Saarbruecken, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1990, 170(4), 401-5 (Eng). The emission spectrum following single-electron impact on NH₃ was investigated with the objective to search for emissions from excited NH⁺ ions produced by single-step dissociative excitation/ionization of NH₃. The NH⁺ (C²Σ⁺-X²Π, 0-0) transition with an appearance potential of 23 ± 1.5 eV was identified and an apparent emission cross-section of (7.0 ± 2) × 10⁻²⁰ cm² at 100 eV incident electron energy was detd. for this transition.

[2]⁺-X²Π

④ NH (3)

©.A. 1990, 113, N 14

NH⁺

1992

Reddy R.R, Rao T.V.R.,
et al.,

(20)

Astrophys. Space Sci. 1992,
189 (1), 29-38.

(Am. NBO; (20); III)

1993

F: NH₂⁺

P: 3

9B158. Теоретические вращательно-колебательные спектры NH₂⁽⁺⁾ в состояниях X₃B₁, A₁A₁ и B₁B₁. Theoretical rotational vibrational spectra of the X₃B₁, A₁A₁ and B₁B₁ states of NH₂⁽⁺⁾ / Chambaud G., Gabriel W., Schmelz T., Rosmus P., Spielfiedel A., Feautrier N. // Theor. chim. acta. - 1993. - 87, N 1 - 2. - С. 5-17. - Англ.

X.1996, № 9

1993

F: NH₂⁺

P: 3

9Б158. Теоретические вращательно-колебательные спектры NH₂⁺ в состояниях X₃B[1], A₁A[1] и B₁B[1]. Theoretical rotational vibrational spectra of the X₃B[1], A₁A[1] and B₁B[1] states of NH₂⁺. Chambaud G., Gabriel W., Schmelz T., Rosmus P., Spielfiedel A., Feautrier N // Theor. chim. acta. - 1993. - 87, N 1 - 2. - С. 5-17. - Англ.

P. Ж. Х. N 9, 1996

1993

F: NH+2

P: 3

7B166. Валентные электронные состояния дикатионов NH{2+} и PH{2+}.
Valence electronic states of NH{2+} and PH{2+} dications / Park J. K., Sun H.
S. // Int. J. Quantum Chem. - 1993. - 48, N 6. - С. 355-365. Англ.

Р. М. Х. № 7, 1996.

NH²⁺

1993

120: 62790a Valence electronic states of the hydronitrogen(2+) and hydrophosphorus(2+) (NH²⁺ and PH²⁺) dications. Park, Jong Keun; Sun, Hosung (Dep. Chem., Pusan Natl. Univ., Pusan, 609-735 S. Korea). *Int. J. Quantum Chem.* 1993, 48(6), 355-65 (Eng). The ab initio second-order effective valence-shell Hamiltonian that is based on the multireference many-body perturbation theory has been applied to det. the adiabatic potential energy curves for the valence states of NH²⁺ and PH²⁺ dications. For PH²⁺, three low-lying quasi-bound states (X¹Σ⁺, a³Π, A¹Π) are found and their spectroscopic consts. are characterized. In NH²⁺, no quasi-bound states are found. The potential energy curves for NH²⁺ are compared with those for PH²⁺ to understand the difference between these two valence isoelectronic cations.

модерн. рас-
чет методами
квантовой химии
для двухзарядных
ионов.

(4) PH²⁺

C. A. 1994, 120, N 6

NH^+

1996

7 6Б1138. Тонкая структура низших вибронных переходов в NH^+ . Fine structure of the lowest vibronic transitions of NH^+ / Palmieri Paolo, Tarroni Riccardo, Amos Roger D. // J. Phys. Chem.— 1996.— 100, № 17.— С. 6958—6965.— Англ. Место хранения ГПНТБ

С волновыми функциями многоконфигурац. метода ССП вычислены матричные элементы спин-орбитального и спин-спинового взаимодействий для катиона NH^+ . Адиабатич. потенциальные кривые низших электронных состояний рассчитаны методами широкомасштабного конфигурац. взаимодействия, и при добавлении спиновых вкладов построена система вибронных уровней энергии. Точность расчета энергий переходов оценивается в $\pm 2 \text{ см}^{-1}$.

А. В. Немухин

М.А.

X. 1997, № 6

1996

F: NH+

P: 3

6B1138. Тонкая структура низших вибронных переходов в NH{+}. Fine structure of the lowest vibronic transitions of NH{+} / Palmieri Paolo, Tarroni Riccardo, Amos Roger D. // J. Phys. Chem. - 1996. - 100, N 17. - С. 6958-6965. - Англ.

Место хранения ГПНТБ С волновыми функциями многоконфигурац. метода ССП вычислены матричные элементы спин-орбитального и спин-спинового взаимодействий для катиона NH{+}. Адиабатич. потенциальные кривые низших электронных состояний рассчитаны методами широкомасштабного конфигурац. взаимодействия, и при добавлении спиновых вкладов построена система вибронных уровней энергии. Точность расчета энергий переходов оценивается в '+-' 2 см{-1}.



РЖХ 1997

NH⁺

1996

124:245086q Fine Structure of the Lowest Vibronic Transitions of NH⁺. Palmieri, Paolo; Tarroni, Riccardo; Amos, Roger D. (Dipartimento di Chimica Fisica ed Inorganica, Universita di Bologna, 40136 Bologna, Italy). *J. Phys. Chem.* 1996, 100(17), 6958-65 (Eng). A theor. anal. of the fine structure of the lowest vibronic transitions of NH⁺ is performed by ab initio evaluation of all required spin-orbit and spin-spin interactions. The vibronic band system of this mol. is particularly complicated due to the presence of a high-spin electronic state, a⁴Σ⁻, nearly degenerate to the ground X²Π level. A procedure recently described for the efficient evaluation of spin-orbit 2-electron integrals in Cartesian coordinates is extended to spin-spin interactions. The spin-spin dipolar and contact couplings are then evaluated by multireference CI (MRCI) techniques. All required effective spin-orbit and spin-spin matrix elements are evaluated using for the orbital description a complete active valence space SCF (CASSCF) treatment. The matrix elements were found sufficiently accurate, and all computed spin-rovibronic transition energies are reproduced within ±2 cm⁻¹. The procedure and techniques are believed to be useful for theor. analyses of high-resoln. spectral data of open shell mols.

молекула
структура
констан-
переходов

Q: A. 1996, 124, N 18

1996

F: NH+

P: 3

14B130. Неэмпирическое изучение [методом эффективного гамильтониана для валентной оболочки] NH{+}. Дипольные моменты переходов, вероятности переходов и излучательные времена жизни. Ab initio study on NH{+}: Transition dipole moments, transition probabilities, and radiative lifetimes / Seong Jeonghee, Park Jong Keun, Sun Hosung [International Journal of Quantum Chemistry] // Int. J. Quantum Chem. - 1996. - 57, N 1. - С. 79-87. - Англ.

РЖХ 1997

NH_4^{2+}

1998

Wang F.H. et al.,

THEOCHEM 1998; 453,
71-75

номери.
sp-ue
6 оценок
71. 1000;
100. 1000;
11. 11.

(100. BH_4^{2+} ; III)