

NO⁺, NO⁺⁺
NO⁻

142419
A.P. (NO⁺)

1930

Stueckelberg E.C.G., Smyth H.D.
Phys. Rev. 1930, 36, 478-81

"The ionization of nitrous
oxide and nitrogen dioxide by
electron impact"

C.A., 1930, 5610

10M

2630-III

A.P. (NO⁺⁺)

1935

Tate J.T., Smith P.T., Vaughan A.L.
Phys.Rev. 1935, 48, 525-31

"A mass-spectrum analysis of
the products of ionization by
electron impact in nitrogen,
acetylene, nitric oxide, cyanogen
and carbon monoxide".

C.A., 1935, 7174

2630-III

A.P. (NO⁺)

1935

Tate J.T., Smith P.T., Vaughan A.L.
Phys.Rev. 1935, 48, 525-31
"A mass-spectrum analysis of
the products of ionization by
electron impact in nitrogen,
acetylene, nitric oxide, cyanogen
and carbon monoxide".

C.A., 1935, 7174

1942

Tanaka Y.,

Hob.

Sci. Papers Inst. Phys.
Chem. Res. Tokyo, 1942, 39, 456.

NO^+

ell. n.

17

III-317 - BP; BP-5230 - III

NO (Te, We, WeXe), NO⁺ (We, De), 1953

H₂⁺ (Te)

Baer P., Miescher F.
Helv. phys. acta 1953, 26, 112, 91-110
(Mém.)

NO⁻, NO[±] und H₂⁺ - Emissions-
spektren im Schumanngebiet.

10

Есть ф. н.

✓ ф

NO⁺

Margrave Y.L.,
Stapitanonda P.

1955

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

Do

Газообразные нитриды
металлов. I. Теория.
расчет энергии диссо-
циации двухатомных
нитридов.

● (Сел. 81N) III

1955

NO
NO⁺ } / Te, Be, D, We, We Xe, Xe /

Miescher E.

Canad. J. Phys., 1955, 33, N 6, 355-
356 (amm.)

Fine structure of NO⁺ and NO
emission spectra in the Schumann region

PX., 1956, 18493

to

III-305

N_2^+ , NO , NO^+ (ω_e , $x_e \omega_e$, $y_e \omega_e$), 1953

Miescher E.

Mém. Soc. roy. sci. Liège, 1953, 13,
N 1-2, 177-180 (оправ.).

Études des spectres de bandes
de N_2^+ , NO et NO^+ dans la région
de Schumann à l'aide de N^{15} .

PX., 1954, N 10,
26679

HO

NO^+ (more exact notation.)

Tanaka Y.

J. Chem. Phys., 1953, 21, 562-3

Miescher-Baer emission bands in the far-ultraviolet region

+2

to

C. A., 1953, 9145d

№ 0+
Синдр.

/// - 566
Miescher E. Helv. Ph. Acta

1956

1956, 29, № 2, 135

Обязательно
перевести

Вращательный анализ по оси
симметрии $A'II - X'Z$

Некоторые участки по оси
катод, исследованы в поперечном
в разрезе. ускорение.

$X'Z$

$$\omega_e = 2377.1$$

$$\omega_e x_e = 16.35$$

$$B_e = 2.002$$

$$\alpha = 0.0202$$

$$D = 6 \cdot 10^{-6}$$

NO^+ Синтез
иSinger K., Vamprer P. A. (mizs)
J. Chem. Soc., 1956, oct., 39H.Окисление азотистой и азотной
кислот. Задача IV. Синтез
и исследование равновесия
между NO^+ и азотистой кислотой
в водной ^{кислоте} перхлорной кислоте

1956

Шифрин Ф. М.,

Докл. АН СССР, 1956, 106, 233.

Нов.

NO⁺

и. н.

24

1957

Mulliken R. S.,

Hob.

The Threshold of

Space, London, 1957, p169.

NO +

at n.

23

III - 1180

1958



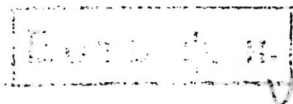
Collin J., Lossing F.P.

J.Chem.Phys., 1958, 28, n 5, 900-901 (англ.)

Ионизация и диссоциация
электронным ударом.



РЖХ, 1959, n 4,
10728.



NO^+

H. Hutzler, Mark G. 1958
Inghram; J.D. Morrison 1137

крив
фотоион.

"J. Chem. Phys"

1958, 28, N 1, 76-82.

1959

Brian H. Moser C.,
Yamazaki M.,

J. Chem. Phys., 1959, 30, 673.

Hob.

NO^+

ll. n.

22

NO⁺ G. Herzberg, A. Monfils,
B. Rosen.

1961

1221

Mémoires Soc. R. Sc. Liège,
cinquième série, tome IV,
fasc. unique. Extrait.

P-146-178.

1961

Huber K. P.,

Helv. Phys. Acta, 1961,
34, 929.

Hick,

NO^+

m.m.

18

1961

NO ++

Hurley A.C., Masler V.W.

J. Chem. Phys., 1961, 34, 1919.первич
диссоц.потенциал
потенциалПотенциальные кривые для
двух последних
сверхтонических пиков.~~(~~100~~ 100 100)~~

X

m-398
NO⁺ (A.P.)

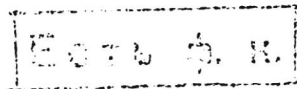
1961

Kiser R.W., Hisatsune I.C.

J. Phys. Chem., 1961, 65, N8, 1444-1446
(*ann*)

Electron impact spectroscopy of
nitrogen dioxide

PX., 1962, 6683



LOM

90

NO^{2+}

Murley A.C.

1962

У. Ловелл. Spectrosc., 9, N1, 18

Кривые потенциальной
энергии двухзарядных
положительно заряженных двух-
атомных молекул. II. Пред-
сказанные соотношения и
переходы для N_2^{++} , O_2^{++} и
 NO^{++} (См. N_2^{++}) III

BQP-5240-III

1962

NO^{2+}

Thurley A.C.

сп. ул.
н. п. ул. Д. п. ул.

Proc. Intern. Symp. Mol. Struct.
Spectry, Tokyo, 1962 (B 210),
4 pp.

Doubly ionized molecules.

(see N_2^{2+})
III

C.A. 1964. 61. 4

III -2245

1963

HO⁺⁺

Hurley A.C.

Doubly ionized molecules.

"Internat. Symos. Molec. Struct.
and Spectrosc. Tokyo, 1962". S.I., S.A.,
B210/1 - B 210/4 (*amm.*)

P 4., 1963, 3 D 59

HO

best sp. n.

NO⁺

Yamazaki Masatoshi 1963

электронная
структура

Sci. Repts Kanazawa
Univ., 1963, 8, №2, 371-95.

Электронная структура
оксида азота NO и его
иона.

● (см. NO)

1963

3920

N_2^+ ; NO^+ ; N^+ ; O_2^+ ; O^+ (A.P.)

Paulson F.I., Mosher R.L.
Proc. Nat. Acad. Sci. India, 1963,
A33, N 4, 522-529

Production of ...

J

NO^+
-центр.

D.W. Sharp, J. Thorley 11963
UP-центр. ions underground.
J. Chem. Soc., 1963, 1963, 3557

NO^+

Gilmore F.R.

1964

Krueger
noting.
merman

Contract AF49(638)-700.

Potential energy curves for
 N_2 , NO , O_2 , and corresponding
ions.

(Cur. N_2)

NO^+ , NO^- , NO^{++} Gilmore F.R.

1965

критич.
номери
непримен.

Y. Quant. Spectrosc.
and Radiat. Transfer,
1965, 5, 12, 369

● (Cu N₂)III

NO⁺

Heuser James E., Director
Kurt.

1966

J. Chem. Phys., 45, No. 3, 3149.

Рядовые члены семейства
для молекулярных перекисей
в УР-областях.

(или H₂) III

NO (ϵ_i , ν_i ; novas supermaxima
produced) XIII 1666 1966

NO⁺ (ϵ_i , ν_i)

Lefebvre-Brion H, Moser C. M.
J. Chem. Phys., 1966, 44, #8, 2957-2959 (aug.)
Calculation of valence states of
NO and NO⁺.

Caplet

Ruqy, 1966, 9961

W

1966

Reese R.M., Rosenstock H.M.,

filed.

J. Chem. Phys., 1966, 44, 2007.

NO+

cell. 12.

19

NO⁺

1967

8 Д233. Коэффициенты фотоионизации и поглощения NO в области 600—950 Å. Metzger P. H., Sok G. R., Oga wa M. Photoionization and absorption coefficients of NO in the 600 to 950 Å region. «Canad. J. Phys.», 1967, 45, № 1, 203—217 (англ.)

Измерены абс. значения коэф. фотоионизации и поглощения окиси азота в области 600—950 Å. Для получения спектров использован сканирующий вакуумный УФ-монохроматор. Источником служило сплошное излучение гелия. При облучении NO светом короче 677,4 Å наблюдалась слабая флуоресценция в области 1068—1600 Å. Это излучение предположительно отнесено к переходу $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+ NO^+$. Библ. 14. А. Беляева

9. 1967. 82

170⁺

Spohr R.,
Puttkamer &

1917

Z. Naturforsch., 22a, n5, 705.

Измерение кинетической
энергии фотосинтезов и
факторов фотосинтеза - фотосинтеза
на дне океана.

переходов. некой арык
массенярнык мовов.

(сее. H_2^+) III.

N_2O (A. P. monol: $N_2O_2^+ + 4 NO^+$) 11968
 $\Delta H_0^\circ(NO^+)$, $\Delta H_0^\circ(N_2O^+)$ $\bar{X}_{III} - 10$
 $D(N-NO)$, $D(N-NO^+)$ 13

Almoster F. M. A.,
 Rev. portug. quim, 1968, 10, n. 3, 162-172, III
 (an. 74)
 Mass spectrometric study of ioniza-
 tion and dissociation of N_2O by
 electron impact.

Rev. quim, 1970, 10265

K, M

10

(62)

NO⁺

ВГ-ХИ-1667

1968

1 Д103. Электронные состояния иона NO⁺. Col-
lin J. E., Natalis P. Electronic states of the nitric
oxide ion. «Chem. Phys. Letters», 1968, 2, № 3, 194—196
(англ.)

Подробное рассмотрение спектра фотоэлектронов
NO, полученных при трех значениях длины волны,
позволило идентифицировать 8 электронных состояний
иона NO⁺ с энергиями ниже 21, 21 эв.

(2i)

ф. 1969. 1А

NO⁺

спектр,
(3i)

9
X. 1968. 4

ВР-ХIII-1067

1968

4 Б135. Электронные состояния иона окиси азота.
Collin J. E., Natalis P. Electronic states of the nitric oxide ion. «Chem. Phys. Letters», 1968, 2, № 3, 194—196 (англ.)

Исследованы фотоэлектронные спектры NO при использовании трех резонансных источников света (He 584, Ne 736—744 и Ar 1048—1067). Определено восемь электронных состояний NO⁺, семь из к-рых обладают колебательной структурой. Классификация электронных состояний проведена в соответствии с правилами Вигнера — Уитмера: 9,262 эв X¹Σ⁺, 14,0 эв a³Σ⁺, 15,68 эв ³Δ, 16,56 эв ³Σ⁻, 17,172 эв ³Π, 17,315 эв ¹Σ⁻, 18,33 эв, A¹Π, 18,90 эв ¹Δ. Приведена диаграмма потенциальной энергии для NO⁺.

Ю. В. Киссин

NO⁺

B9- XIII- 1667

1968

г. совет
кис

~~91562~~ Electronic states of the nitric oxide ion. Collin, J. E.; Natalis, P. (Univ. Liege, Liege, Belg.). *Chem. Phys. Lett.* 1968, 2(3), 194-6 (Eng). The detailed anal. of the photoelectron spectrum of NO obtained with 3 different wavelengths leads to the identification of 8 ionic electronic states below 21.21 ev. Their assignment is given and a new potential energy diagram is proposed. The ionic electronic states of NO⁺ (in ev.) are: 9.262, X¹Σ⁺; 14.0, a³Σ⁺; 15.68, ³Δ; 16.56, ³Σ⁻; 17.17, ³Π; 17.31, ¹Σ⁻; 18.33, A¹Π; and 18.90, ¹Δ.

JDJN

C. A. 1968. 69.22

31005.6738

Ch, Ph, TE

96559

10+ (7, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24, 26, 28, 30, 32, 34, 36, 38, 40, 42, 44, 46, 48, 50, 52, 54, 56, 58, 60, 62, 64, 66, 68, 70, 72, 74, 76, 78, 80, 82, 84, 86, 88, 90, 92, 94, 96, 98, 100)

1968
3657

Collin Jacques E., Natalis Paul.

XIII-2248

Vibrational and electronic ionic states of nitric oxide. An accurate method for measuring ionization potentials by photoelectron spectroscopy. "Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.", 1968, 1, N 6, 483-499

(англ.)

0976 ДИД

956 958 9 6 9

ВИНИТИ

XII ~~132~~ 132 1989
E; (CNO⁺, N₂O⁺, CO₂⁺, COS⁺, CS₂⁺)

Collin G. E., Natalis P., 13.14

Bull. cl. sci. Acad. roy. Belg, 1969, 55, n°
352-371 (pp.)

Détermination des états électroniques
et des niveaux de vibration des ions
moléculaires par spectroscopie de
photoélectrons.

8 cap —

Puepy, 1970, 42372

W

Вытиски 3546 а) 1988

NO +

2 Д100. Возбужденные электронные состояния иона NO+. Huber K. P. The excited electronic states of the NO+ ion. «Canad. J. Phys.», 1968, 46, № 15, 1691—1695 (англ.)

В работе дается новая интерпретация фотоэлектронного спектра NO, полученного экспериментально (РЖФиз, 1967, 8Д177). Спектр интерпретируется с помощью электронных состояний NO+, принадлежащих конфигурациям $5\delta^2(1\pi)^32\pi$ и $5\delta(1\pi)^42\pi$. Показана близкая аналогия с соответствующими состояниями N₂ и CO. Показано, что давно известная β-серия Ридберга полосы поглощения NO сходится к $5\delta(1\pi)^42\pi, ^3\Pi$, однако не получено никаких доказательств существования электронного состояния NO+ в пределе сходимости α-серии. Предполагавшийся ранее ридберговский характер этой серии вероятно ошибочен.

Г. К.

ф. 1969 29

NO+

number 3546 a) 1988

Deposited

B9-111-399

(63142t) Excited electronic states of the NO⁺ ion. Huber, K. P. (Nat. Res. Counc. Canada, Ottawa, Can.). *Can. J. Phys.* 1968, 46(15), 1691-5 (Eng). The photoelectron spectrum of NO (Turner, *et al.*, 1966) is reinterpreted in terms of electronic states of NO⁺ belonging to configurations... $(5\sigma)^2(1\pi)^32\pi$ and ... $5\sigma(1\pi)^42\pi$. The close analogy with corresponding states of N₂ and CO is pointed out. The long-known β Rydberg series of absorption bands of NO is shown to converge towards... $5\sigma(1\pi)^42\pi$, $^3\Pi$, but no evidence can be found for the existence of an electronic state of NO⁺ at the limit of the α series. The previously assumed Rydberg character of this series may be erroneous. RCCN

C.A. 1988

69. 16

ВЗР - ХИИ - 935

1968

NO⁺(γ)

3 Д111. О первом возбужденном состоянии NO⁺.
Sjögren H., Szabo I. On the first excited of NO⁺.
«Arkiv fys.», 1968, 37, № 6, 551—555 (англ.)

Используя эффект обмена заряда, с помощью двойного масс-спектрометра перпендикулярного типа, авторы провели изучение ионизационного потенциала первого возбужденного состояния NO⁺. Сделаны следующие выводы: 1) по-видимому, не существует состояния NO⁺ при 14,2 эв, что согласуется с результатами изучения методами электронной спектроскопии, но противоречит результатам изучения спектров поглощения и фотоионизации (по литературным данным); 2) состояние при 15,65 эв является триплетным состоянием, а не синглетным, как предполагалось ранее. В. А. Морозов

ф. 1969. 39

NO⁺

B9-XIII-935

1968

(91431e) First excited state of NO⁺. Sjoergren, H.; Szabo, R. (Dep. Phys., Roy. Inst. Technol., Stockholm, Swed.). *Ark. Fys.* 1968, 37(34), 551-5 (Eng). The charge exchange properties of NO⁺ were studied in a tandem mass spectrometer of the perpendicular type described previously by E. Lindholm (1966). NO was bombarded with Ar⁺ and Kr⁺. The relative cross sections for formation of NO⁺, at 3- and 900-ev. ion kinetic energies, are 0.4 and 0.6, resp., for Ar⁺, and 0.002 and 0.02, resp., for Kr⁺. The charge exchange cross section and the recombination energy values detd. agreed with those obtained by photoelectron and ionization electron spectroscopy. NO⁺ may have no state at 14.2 ev. The state at 15.65 ev. may be a triplet and not a singlet, as suggested by D. W. Turner, *et al.* (1966). Comparison with the isoelectronic mols. N₂ and CO indicated ³Σ⁺. Possibly, a further state (³Δ) exists near 18 ev. 20 references. DYJN

непрел
I bor. coe.

C.A. 1968. 69. 22

NO^+

Williams J.M., et al.

1968

(AP)

J. Chem. Phys., 1968,
49, ~10, 4467.

($\text{C}_{60}\text{H}_3^+$) I^-

N_2O (Y) 13 1969
 NO^+ (A.P. ΔH_f) XIII 218
 N_2O^+ (ΔH_f , Φ_{N-NO}) 9
 N_2O (Φ_{N-NO})

Ferreira M.A.A.
Rev. Port. Quim. 1968, 10(3), 168-72
Mass spectrometric study of ionization
and dissociation of nitrous oxide
by electron impact.

10, M (Φ) CA, 1969, 71, N16, 77782.

Not

OTUCK 4736

1969

Jungen ch.

Can. J. Phys. 1969

(a.u.)

47

~~16~~ 1769 -



1970

NO⁺

8 Д401. Фотоэлектронная спектроскопия с недиспергированным УФ-излучением. Cairns R. B., Harrison H., Schoen R. I. Photoelectron spectroscopy with undispersed ultraviolet radiation. «Appl. Opt.», 1970, 9, № 3, 605—608 (англ.)

фотоэлектр.
спектр

(ошибки)

Исследованы спектры нескольких ламп, с наполнением благородными газами, приведен список наблюдаемых посторонних линий и отмечена необходимость производить очистку газов при использовании цеолитовых ловушек. Отмечено, что в фотоэлектронном спектре NO⁺ и Hg⁺ некоторые состояния установлены ошибочно. Библи. 16. А. Яковлева



ф. 1970. 89

NO +

1970

11 Б98. Криогенная масс-спектрометрия фторсодержащих частиц 1. Масс-спектры гексафторида серы, трифторида хлора, фтористого нитрозила и четырехфтористого гидразина. Cristy S. S., Mamantov G. Cryogenic mass spectrometry of reactive fluorine-containing species. I. The mass spectra of sulfur hexafluoride, chlorine trifluoride, chlorine monofluoride, nitrosylfluoride and tetrafluorohydrazine. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1970, 5, № 3—4, 309—317 (англ.)

A.P.

Низкотемпературный ввод и охлаждаемая реакц. камера, смонтированные вместо системы прямого ввода тв. фазы в источник ионов масс-спектрометра Хитачи RMI-6E, использованы для изучения термически нестабильных или вызывающих коррозию фторсодержащих частиц. Приведены масс-спектры SF_6 (I) (при $t_{\text{ре}} = -140^\circ$ и энергии ионизирующих электронов 70 эв), ClF_3 (II) (-57° , 50 эв) и N_2F_4 (III) (-193° и -160°), удовлетворительно совпадающие с опубликованными в лит.-ре.

X. 1974.

11



+2

[X]

В спектре I молек. пик не наблюдался вплоть до -145° . Для II отмечено повышенное относит. содержание Cl^+ и Cl_2^+ . Для III с уменьшением диссоциации при низких т-рах возрастает доля молек. иона. Получены не сообщавшиеся ранее масс-спектры ClF (IV) (т-ры системы напуска $\sim 25^\circ$, источника ионов $\sim 50^\circ$, энергия электронов 70 эв), обладающего сильно коррозирующим действием и FNO (V) (от -55 до -160° , 70 эв). Найдены потенциалы появления NO^+ и NO из V, равные $11,6 \pm 0,2$ эв и $9,25 \pm 0,15$ эв соотв., и энергия связи $\text{N}-\text{F}$, $(\text{F}-\text{NO}) = 53 \pm 6$ ккал/моль, совпадающая с термодим. расчетным значением. М. Туркина

XIII-599

1970

NO
NO+ } (7, 8i)

Edqvist O., Lindholm E.,
Selin H. E., Sjögren H., Åstrand L.
Ark. fys., 1970, 40, N5, 439-452

letz op47

10

param n.m. (C₂, N₂, N₂⁺, O₂, 1970
11 13 14 O₂⁺, CO, CO⁺, NO, NO⁺)

Jain D.C., XI 1063

Int. J. Quant. Chem., 1970, 4, 56,
579-586 (ann.)

A study of some potential energy
functions for diatomic molecu-
les.

Proc Xum, 1971, 11566

(P)

10

15213

NO^+

Qureshi A. M.
Aubke F.

1970

$\downarrow$

Can: J. Chees., 48 (20),
3117.

(see. N_2F_3^+) III

NO (A)

NO⁻ (a.n.)

XIII 2211

1970

Siegel M. W.,

Diss. Abstr. Int., 1970, B31, N6, 3625
(a.n.)

Electron affinity of nitric oxide
and the molecular constants
of its negative ion, determined
by laser photoelectron spectroscopy.

1-0 (4) CA, 1972, 76, N2, 6922t

1971

NO⁺

1) 6 Б158. Поперечное сечение излучения из состояния $A^1\Pi$ иона NO⁺. Aarts J. E. M., De Heer F. J. Emission cross sections of the $A^1\Pi$ state of NO⁺. «Physica», 1971, 54, № 4, 609—616 (англ.)

Измерены поперечные сечения возбуждения колебательных полос с $v'=0$ и 1 и $v''=0-7$ системы электронного перехода $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ ионов NO⁺, образованных при бомбардировке молекул NO электронами с энергией 0,1—3 кэВ. Результаты измерений проанализированы в приближении Борна — Бете. Показано, что для всех полос, за исключением полос 1—3 и 1—4, отношение Бете не зависит от энергии электронов, а полное сечение возбуждения уровня $A^1\Pi$ при энергиях электронов 0,1—1,0 кэВ составляет ~2,6% от полного сечения ионизации молекулы NO. Отмечено, что процесс ионизации NO можно рассматривать как индуцированный столкновениями дипольный переход.

М. Р. Алиев.

РЖХ, 1972, № 6

1971

NO⁺

156472q Emission cross sections of the A¹Π state of NO⁺. Aarts, J. F. M.; De Heer, F. J. (FOM-Inst. At. Molecuulfys., Amsterdam/Wageningen, Neth.). *Physica (Utrecht)* 1971, 54(4), 609-16 (Eng). The emission cross sections were measured for the A¹Π-X¹Σ⁺ bands of NO⁺ in the vacuum uv for 0.1-3-keV electrons incident on NO. The energy dependence of the cross sections was analyzed by means of the Bethe-Born approxn. The relevant ionization process was mainly due to collision-induced dipole transitions. The variation of the electronic transition moment R_e for the A¹Π → X¹Σ⁺ transitions was detd. from cross-section ratios and known Franck-Condon factors. The range of r centroids $|R_e|^2$ varied as much as a factor of 2.

~~Wageningen~~
 7p. R.

CIA. 1971. 75.26

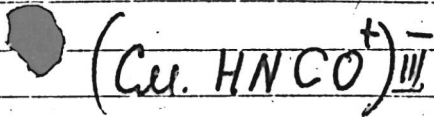
NO⁺

A.P.

Bogart & J.
Hend C. W.

1971

J. Phys. Chem. 1971
45, 10, 1532-36



NO⁺

ВФ-ХIII-1488

1971

24 Б22. Прямой расчет состояний NO⁺ с вакансией в 1s-оболочках методом Хартри — Фока. Bagus Paul S., Schaefer Henry F., III. Direct near-Hartree-Fock calculations on the 1s hole states of NO⁺. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 3, 1474—1475 (англ.)

расчет
J, Ci

В рамках ограниченного метода Хартри — Фока рассчитаны энергии ионизации 1s-электронов атомов O и N в молекуле NO. В качестве исходного базиса использован большой набор орбиталей слейтеровского типа. Энергии ионизации рассчитаны двумя способами: в приближении теоремы Купмэнса и как разность энергий конечного и начального состояния. Рассчитанная разность энергий ³Π и ¹Π-состояний NO⁺ (вакансия в 1s-оболочке O или N)

X.1971.24

в первом случае качественно, а во втором — количественно согласуется с экспериментом. Полученный результат показывает, что одноконфигурац. приближение метода Хартри — Фока достаточно для правильного описания обменного расщепления внутренних уровней при наличии неспаренных электронов в валентных оболочках.

В. И. Нефедов

NO +

ВР-ХIII-1488

1971

2 Д191. Прямые почти хартри-фоковские расчеты дырочных состояний $1s$ NO+. Bagus Paul S., Schaefer Henry F., III. ~~Direct near-Hartree-Fock calculations on the $1s$ hole states of NO+.~~ «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 3, 1474—1475 (англ.)

расчет

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО рассчитаны энергии основного состояния радикала NO и состояний $^1\Pi$ и $^3\Pi$ катиона NO+, получающегося при удалении $1s$ -электронов атомов N и O. Расчеты выполнены с очень большим слэтеровским базисом ($7s$ -, $6p$ -, $3d$ - и $2f$ -АО на каждом атоме), что обеспечило почти хартри-фоковскую точность. Результаты расчета использованы для оценки энергии связи $1s$ -электронов атомов N и O, кото-

Ф. 1942-20

рая производилась двумя способами. В первом случае энергии связи и величина обменного расщепления (разность энергий связи при переходе в состояния $^1\Pi$ и $^3\Pi$ катиона) оценивались исходя из энергий катиона, рассчитанных с использованием МО нейтрального радикала [приближение замороженных орбиталей (ПЗО)], во втором — исходя из энергий, полученных из самостоятельно-го хартри-фоковского расчета катиона, [прямой расчет дырочных состояний (ПРДС)]. Результаты ПЗО качественно, а результаты ПРДС количественно согласуются с эксперим. потенциалами ионизации, полученными методом фотоэлектронной спектроскопии. А. Багатурьянц

NO⁺

8i

6 Б130. Энергетические уровни ионов NO⁺ при фотоэлектронной спектроскопии резонансными линиями He и Ar. Collin J. E., Delwiche J., Natalis P. Energy levels of NO⁺ ion by He and Ar resonance lines photoelectron spectrometry. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1971, 7, № 1, 19—26 (англ.)

На фотоэлектронном спектрометре высокого разрешения (30 мэв на полувысоте пика) со сферич. системой сеток определены энергетич. уровни и колебательные промежутки в спектре NO при облучении He 584 и Ar 1048—1067, отличающиеся от ранее полученных авторами на приборе с цилиндрич. системой сеток и низким разрешением. Результаты измерений восьми энергетич. уровней подтверждают данные др. исследователей. Нек-рые незначительные расхождения подробно обсуждаются. Измерены шесть основных колебательных частот. Наблюдаемое повышение основного колебательного состояния иона X¹Σ⁺ объясняется преионизацией возбужденной молекулы NO.

М. Туркина

РЖХ

1972, № 6

(+1) NO

✗

1971

NO⁺

1971

7 Б145. О фотоэлектронном спектре молекулы NO. Edqvist O., Asbrink L., Lindholm E. On the photoelectron spectrum of NO. «Z. Naturforsch.», 1971, 26 a, № 9, 1407—1410 (англ.)

Измерен возбужденный линиями He с $\lambda=584$ и 304 А фотоэлектронный спектр молекулы NO с разрешением 0,25 мэв. Идентифицирована колебательная структура прогрессии полос при 23 эв в спектре, возбужденном линией He 304 А. Обнаружено спин-орбитальное расщепление уровней NO⁺, к-рое для большинства уровней составляет 12—16 мэв. Определены энергии 11 электронных уровней иона NO⁺. Показано, что слабая полоса при 20,4 эв, к-рую ранее относили к уровню C³Π, является повторением от линии HeI с $\lambda=3204$ А

66

X. 1972.7

NO. +

Edqvist O., Åsbrunkh.,
Lindholm E.

1971

enkelst,

ad. coem.

Z. Naturforschung

О композиционном спектре NO

Фотоэлектронный спектр NO воз-
буждается линиями $\lambda 304\text{\AA}$ и $\lambda 584\text{\AA}$ и
проявлен при большом разрешении. В
кач-ве стандарта служило аргент. Состо-
яния $^3\Pi$ и $^3\Pi$ имеют близкие энергии
около 21.7 eV . Разрешена квант. структура
сост. $^3\Pi^1\Sigma^+$ около 22.5 eV . В спектре иденти-
фицировано большее число пиков, свя-
занных с разветвленными электронными состоя-
ниями.

NO⁺

XIII-785-BP

1971

105324q Emission from long-lived states in ion beams. New band systems of NO⁺. Maier, William B., II; Holland, Redus F. (Los Alamos Sci. Lab., Los Alamos, N. Mex.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(6), 2693-714 (Eng). A method for investigating radiation from long-lived, excited states of ions is described. Emission spectra, apparent lifetimes of the excited states, and electron impact cross sections for producing the radiation can be studied. The spectrum of emission from long-lived states of NO⁺ in an ion beam has been obtained for wavelengths between 1250 and 2200 Å, but no NO⁺ emissions have been obsd. in spectral scans of the 2200-3400-Å region. Some of the spectral features are produced by transitions to the X¹Σ⁺ state of NO⁺ from the v' = 0 and 1 levels of a single electronic state having an internuclear distance 1.157^{+0.02}_{-0.01} Å and an apparent life-

M.H.

(+1) III, obcy

C.A. 1971. 7420.



time $135 \pm 35 \mu\text{sec}$. These 2 vibrational levels are 7.301 ± 0.006 and 7.511 ± 0.01 eV above the ground state of NO^+ . The other emissions obsd. can be characterized by 2 apparent lifetimes, 10.8 ± 2 and $160 \pm 50 \mu\text{sec}$, and appear to be produced by transitions to the $X^1\Sigma^+$ state from several upper states. Tentatively, the energies of the upper states are set at 9.639 ± 0.006 , 9.437 ± 0.009 , and 9.232 ± 0.006 eV above the ground state of NO^+ . Other radiating levels may be at 9.34, 9.07, and (or) 8.79 eV. Some of the obsd. radiation may be produced by the previously reported $A^1\pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ transitions, where the $A^1\pi$ state would have to be populated by a slow cascade.

RCJQ

NO⁺

XIII-785-BP

1971

10 Д638. Испускание из долгоживущих состояний ионов. Новые системы полос NO⁺. Maier William B., II, Holland R. F. Emission from long-lived states in ion beams: New band systems of NO⁺. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 6, 2693—2714 (англ.)

Рассмотрена методика исследования излучения из долгоживущих возбужденных состояний ионов в парах (спектры испускания, наблюдаемые времена жизни возбужденных состояний (τ), поперечные сечения соударений). Спектр испускания из долгоживущих состояний ионов NO⁺ в пучке получен для интервала 1250—2200 Å; испускание NO⁺ в исследованной области 2200—3400 Å пол-

спектр

Е.и.ш.п.

ф.т.п.

Ф. 1971.102

+1



ностью отсутствует. Наблюдаемые спектральные особенности в значительной степени определяются участием переходов в состояние $X^1\Sigma^+$ с уровнями $v'=0$ и 1 электронного состояния, характеризующегося межъядерным расстоянием $1,157_{-0,01}^{+0,02}$ Å и $\tau=135\pm35$ мксек. Эти колебательные уровни расположены выше основного состояния на $7,301\pm0,006$ и $7,511\pm0,01$ эв. Другие виды испусканий могут быть охарактеризованы τ , равными $10,8\pm2$ и $160\pm\pm50$ мксек, и, по-видимому, принадлежат переходам в состояние $X^1\Sigma^+$ из нескольких верхних состояний, имеющих энергии $9,639\pm0,006$; $9,437\pm0,009$ и $9,232\pm0,006$ эв. Некоторые из наблюдаемых видов испускания могут быть обусловлены переходами $A'\pi-X\Sigma^+$, причем исходное состояние должно заселяться путем медленной каскадной релаксации. Библ. 42. Резюме

NO⁺

XIII - 785 - ВР

1971

18 Б140. Испускание из долгоживущих состояний в ионных пучках. Системы новых полос NO⁺. Maier William B., II, Holland R. F. Emission from long-liver states in ion beams. New band systems of NO⁺. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 6, 2693—2714 (англ.)

Описан метод для изучения испускания из долгоживущих возбужденных состояний ионов, с помощью которого можно исследовать спектры испускания, определять времена жизни возбужденных состояний и сечения электронных столкновений, приводящих к испусканию излучения. В области 1250—2200 Å наблюдался спектр испускания из долгоживущих состояний NO⁺ (I) в ионном пучке; в области же 2200—3400 Å никакого испускания I не

М. Н.



(+1) f m n

X. 1971. 18



наблюдается. Ряд полос в области 1680—2050 Å отнесен переходам в основное электронное состояние $I X^1\Sigma^+$ с уровней $v'=0$ и 1 одного электронного состояния с межъядерным расстоянием $1,157(+0,02, -0,01)$ Å и временем жизни $1,35 \pm 35$ мсек. Эти два колебательных уровня расположены на $7,301 \pm 0,006$ и $7,511 \pm 0,01$ эв выше основного состояния I. Другие испускания могут быть охарактеризованы двумя временами жизни $10,8 \pm 2$ и 160 ± 50 мсек, они, по-видимому, связаны с переходами в состояние $X^1\Sigma^+$ с нескольких верхних, возбужденных состояний, уровни которых расположены на $9,639 \pm 0,006$, $9,437 \pm 0,009$ и $9,232 \pm 0,006$ эв выше основного состояния $I X^1\Sigma^+$, $v=0$. Нек-рые испускания могут быть вызваны переходами $I A^1\pi \rightarrow X^1\Sigma^+$.

— Резюме

NO, NO₂

N₂O₂

Vi

Marfusa

C.A. 1971. 50

~~124609C~~ Matrix-isolation study of the interaction of electrons and alkali metal atoms with various nitrogen oxides. Infrared spectra of the species NO⁻, NO₂⁻, and N₂O₂⁻. Milligan, Dolphus E.; Jacox, Marilyn E. (Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 1971, 55(7), 3404-18 (Eng). The ir spectra which result when samples of NO₂ are codeposited with the various alkali metals in an Ar matrix at 4 or at 14°K are consistent with the occurrence of strong charge-transfer interaction. In addn. to isolated NO₂⁻, previously identified in this system, ion pairs of general formula M_x⁺NO₂⁻ are stabilized. When NO is substituted for NO₂, the ir spectrum of the initial deposit shows an absorption at 1350-1375 cm⁻¹ which can be assigned to the NO⁻ stretching fundamental of M_x⁺NO⁻ ion pairs, in good agreement with the vibrational spacing recently reported for ground-state NO⁻ in the gas phase. Weak charge-transfer interaction occurs between alkali-metal atoms and N₂O in an Ar matrix environment. Results of the expts. can be explained by postulating that the upper, predominantly ionic state of the charge-transfer complex decomps. producing O⁻, which may diffuse through the matrix. A new absorption which appears at 1205 cm⁻¹ was tentatively assigned to ν₄(b₁) of a planar O₂N:N⁻ anion. In studies of the interaction of Na atoms with Ar:NO:N₂O mixts., Hg-arc irradiation of the sample leads to the appearance not only of the N₂O₂⁻ absorption, but also of absorptions due to isolated NO₂⁻ and to Na_x⁺NO₂⁻.

1971

6964-1111

(+2)

☒

NO-

XIII - 1969.

1971.

2 Д552. Исследование взаимодействия электронов и атомов щелочных металлов с различными окислами азота методом матричной изоляции. ИК-спектры NO-, NO₂- и N₂O₂-. Milligan Dolphus E., Jacobson M., Lyle E. Matrix-isolation study of the interaction of electrons and alkali metal atoms with various nitrogen oxides. Infrared spectra of the species NO-, NO₂-, and N₂O₂-. J. Chem. Phys., 1971, 55, № 7, 3404—3418 (англ.)

Изучены ИК-спектры поглощения (600—1900 см⁻¹) NO₂, NO и N₂O, соосажденных в матрицах из аргона при 4 или 14° К с различными щелочными металлами. Сделан вывод о наличии в матрицах стабилизированных образований типа M_x+NO₂- (в случае NO₂), где M — щелочной металл, которые образуются вследствие сильных взаимо-

+2

Ф. 1972. 2.0

действий с переносом заряда. Полосы в области $1200-1240\text{ см}^{-1}$ отнесены к антисим. вал. кол. $\nu_s\text{ NO}_2^-$ в ионных парах M_x+NO_2^- . При исследовании NO обнаружено поглощение при $1350-1375\text{ см}^{-1}$, отождествленное с колебаниями ν_s групп NO^- в ионных парах M_x+NO^- ; полос изолированных ионов NO^- не найдено. Наблюдалось также слабое взаимодействие с переносом заряда между атомами щелочных металлов и N_2O в аргоновой матрице.

Предположено, что верхнее (в основном, ионного характера) состояние комплекса с переносом заряда распадается с образованием O^- , диффундирующего в матрице. Новая полоса 1205 см^{-1} отнесена к $\nu_4(b_1)$ плоского аниона N_2O_2^- . Показано, что образование фотоэлектронов при действии излучения ртутной дуги на матричные смеси $\text{Ag}:\text{NO}:\text{N}_2\text{O}+\text{Na}$ приводит к появлению полос $\text{O}_2\text{N}=\text{N}^-$ и полос изолированных ионов NO_2^- и ионных агрегатов $\text{Na}_x+\text{NO}_2^-$. Библ. 48. С. Ф. Б.

O_2^- , NO^- (серия Рунберга) 1113 1971

Sanche L., Schulz G. J., XI 2619

Phys. Rev. Lett., 1971, 27, N20, 1333-6
(англ.)

Vibrational progressions and
Rydberg series of O_2^- and NO^-

15

Ⓟ

CH, 1972, 76, N2, 8371m

NO⁻

критическая
потенциальная
энергия

12897j) Vibrational excitation and compound states in nitric oxide. Spence, David; Schulz, George J. (Mason Lab., Yale Univ., New Haven, Conn.). *Phys. Rev. A* 1971, [3]3(6), 1968-76 (Eng). The cross section for elastic scattering by electron impact on NO shows resonances in the energy range 0-2 eV. These resonances, with a spacing ~ 0.16 eV ($\omega_e = 0.17$ eV), are assocd. with vibrational levels of NO⁻, and there is a near-coincidence in energy between the 4th vibrational state of NO and the 6th vibrational state of NO⁻. The width of these resonances increases monotonically from 0.02 to 0.10 eV as the vibrational quantum no. of NO⁻ goes from 1 to 6. The energy dependence of the vibrational cross sections exhibits peaks at the positions of these resonances, and the magnitude of these peaks is measured. The vibrational states of NO⁻ can decay by the emission of an electron into various vibrational levels of NO. The branching ratio for a few of these decays is measured. A potential energy diagram of NO⁻ is drawn by using the exptl. evidence.

1971

✓

C.A. 1971.752

NO-

Spence D., Schulz G.J.

1974

Phys. Rev. A., Gen. Phys., 3, 56, 1968

X^{3Σ⁻}

$$Z_e = 1.286$$

$$D_0 = 41550 \text{ cm}^{-1}$$

NO⁺

1972

крив.
спектра

22039g Photoionization mass spectrometric study of nitrogen oxide. Closer look at the threshold region. Killgoar, P. C., Jr.; Leroi, G. E.; Berkowitz, J.; Chupka, W. A. (Dep. Chem., Michigan State Univ., East Lansing, Mich.). *U.S. Nat. Tech. Inform. Serv., AD Rep.* 1972, No. 746463, 19 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Govt. Rep. Announce. (U.S.)* 1972, 72(18), 66. The photoionization efficiency curve of NO⁺ was obtained by using the Ar continuum in the energy range 9.25-10.00 eV. Considerable fine structure was obsd. superimposed on the vibrational steps of the NO⁺ ionization curve, which is attributed to vibrational autoionization. This structure was assigned to

Rydberg series converging to the excited vibrational levels of the ground NO⁺ ion (¹Σ⁺).

C. A. 1973. 78, n 4

NO⁺

XIII - 2131

1972

16 Б127. Исследование процессов автоионизации в окиси азота методом фотоэлектронной спектроскопии. Клейменов В. И., Чижов Ю. В., Вилесов Ф. И. «Оптика и спектроскопия», 1972, 32, № 4, 702—708

Методом фотоэлектронной спектроскопии проведено исследование фотоионизации окиси азота в спектральной области 1280—900 А. Получены энергетич. спектры электронов, освобождаемых при фотоионизации NO для 60 фиксированных энергий фотонов. Эти спектры использованы для определения спектральных зависимостей парц. сечений фотоионизац. переходов, приводящих к образованию колебательно возбужденных ионов NO⁺ в основном электронном состоянии. Проведен анализ парциальных сечений фотоионизации и показано, что процессы автоионизации приводят к сильному заселению как низких ($\nu' \leq 4$), так и высоких ($\nu' \leq 12$) колебательных уровней основного состояния иона NO⁺.

Резюме

X. 1972. 16

$O_2^-(ze)$; $Si(O_2^-; CO_2^-, NO^-, NO_2^-)$ ¹⁹⁷²
XI 2844

Larkin I.W., Hasted J.B.,
J. Phys. B: Atom and Mol. Phys.,
1972, 5, N1, 95-109

(92)

LO

pp72

NO, He, Ne, H₂, CO, H₂O, H₂O, NH₃, C (H₂) 1972
KI 2985 NO₃ (He) 2 11 13 14
McFarland H., Dunkin D.B.
Fehsenfeld F.C., Schmelz Köpf A.L.,
J. Chem. Phys., 1972, 56, 15, 2358-
-2364 (atm.)
Collisional detachment
studies of NO.
Bte. Kunc, 1972, 16 5856 10, 11 (CP)

NO⁺

1972

(M.N.) 132673w Ionization of the σ^*2s orbital of nitrogen monoxide and configuration interaction effects on the spin-split states arising from inner orbital ionization in paramagnetic molecules. Narayana, B.; Price, W. C. (Dep. Phys., King's Coll., London, Engl.). *J. Phys. B* 1972; 5(9), 1784-9 (Eng). Two Rydberg series of bands of NO which converge to a common limit at $175,200 \pm 50 \text{ cm}^{-1}$ ($21.721 \pm 0.006 \text{ eV}$) were found in absorption in the range 680-560 Å. The limit agrees with an ionization peak occurring at this energy in its photoelectron spectrum. The ionization is interpreted as leading to the formation of the $(\sigma^*2s)^{-1}, 3\Pi$ state of NO⁺. No comparable band systems were found which could be assigned as Rydberg bands approaching the corresponding singlet state. Similar situations in which apparently only the ionic states of highest multiplicity appear in uv and photoelectron spectroscopy are found in the analogous systems in O₂⁺ and NO₂⁺. This phenomenon is attributed to con-

C.A. 1972. 77. 20 .

figuration interaction affecting preferentially the low multiplicity component of spin-split states. It appears to be a common feature of the inner valence orbitals of many paramagnetic mols. and their ions. The diffuseness and Fano-type profiles of many of the bands of NO show that the lifetimes of the states are very short due to predissocn. and autoionization. Obsd. quantum defects of -0.03 and $0.72/0.78$ suggest that the Rydberg state orbitals are $nd\pi$ and $np\sigma/np\pi$. Comparisons are made with the corresponding Rydberg bands in N_2 and O_2 and values of $r_e = 1.117 \text{ \AA}$ and $\Delta G_{1/2} = 1890 \text{ cm}^{-1}$ are estd. for the $c^3\Pi$ state of NO⁺.

NO^+

Sandaram, Swaminatha

1972

"Spectrosc. Mol."

1972, 21 (245), 49-51.

"Limiting rotational states..."

● (cur. CN; III)

NO-

[OM. 41275]

1972

стр-ра,
поперечн.
сечения

Sanche L., Schultz F. J.,
Phys. Rev. 1972, 6, N1,
69-86.

Electron Transmission Spectrosc-

1 Д295. Фотоэлектронная спектроскопия отрицательных молекулярных ионов. Ч. I. Сродство к электрону NO и молекулярные константы NO-. Steger M. W., Setotta R. J., Hall J. L., Levine J., Bennett R. A. Molecular photodetachment spectrometry. I. The electron affinity of nitric oxide and the molecular constants of NO-. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1972, 6, № 2, 607—631 (англ.)

Для изучения молекулярных ионов впервые применен фотоотрыв под действием лазерного излучения и измерение спектра освобождаемых электронов. Селектируемый по массам пучок отрицат. ионов экстрагировался из положит. столба тлеющего разряда в N₂O и просвечивался сфокусированным линейно поляризованным излучением ионного аргонового лазера ($\lambda=4880 \text{ \AA}$). С помощью электростатич. анализатора записывался спектр электронов, покидающих зону фотоотрыва перпендикулярно плоскости скрещенных луча и пучка ионов. Вращение плоскости поляризации луча осуществлялось поворотом полуволн. пластинки. В спектре энергий электронов четко проявляется колебательная структура, позволяющая рассчитать константы основного состояния NO-: $\omega_e''=1470 \pm 200 \text{ см}^{-1}$, $r_e''=1,285 \pm 0,01 \text{ \AA}$, $B_e''=1,427 \pm 0,02 \text{ см}^{-1}$. Сродство к электрону для молекулы NO равно $24,5^{+10} \text{ МэВ}$. Библ. 32. В. Александров

NO-

(и.п.)

(Ае)

(см NO, III)

РЖ.Ф.1873.1

1972

XIII-2213

NO, NO⁺ (Ei, Do, u.n., pacrēm / XII 2057/1972
Thulstrup E. W., Öhrn Y.
J. Chem. Phys., 1972, 57, N9, 3716-
- 3726 (amw.)

Configuration interaction studies
of NO and NO⁺ with comparisons
to photoelectron spectra.

Proc Phys, 1973, 3D154

NO^{2+}

1973

Appell J., Durup J. et al

E: J. Phys. Atom. and Mol. Phys.,
1973, 6, N1, 194-205.

• $(\text{Cu } \text{O}_2^{2+}) \text{ III}$

NO⁺

1973

4 Д210. Расчет абсолютных интенсивностей для инфракрасных колебательно-вращательных полос 0—1, 0—2 и 1—2 основного состояния NO⁺. Billingsley Frank P., II. Calculation of the absolute infrared intensities for the 0—1, 0—2 and 1—2 vibration-rotation transitions in the ground state of NO⁺. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 23, № 2, 160—166 (англ.)

абсол.
интенс.
линии

В многоконфигурационном приближении с помощью метода самосогласованного поля (РЖФиз, 1972, 6Д133) вычислен электр. дипольный момент иона NO⁺ в основном электронном состоянии ${}^1\Sigma^+$. Полученные данные использованы для расчета вероятностей $A(v, I \rightarrow v', I')$ спонтанных радиационных переходов между колебательно-вращательными уровнями и для определения интегр. коэф. поглощения при 273,16° К. Найдено, что $A(v, I \rightarrow v', I')$ слабо зависят от вращательного квантового числа I и для переходов $v \rightarrow v' = 1 \rightarrow 0$; $2 \rightarrow 0$; $2 \rightarrow 1$, соответственно, равны (в сек⁻¹): 13,63; 0,37 и 26,32.

Б. Ф. Горднец

4-3036

ф. 1974 № 4

№0+

1973

расчет

9 Б129. Вычисление абсолютных интенсивностей инфракрасных полос для колебательно-вращательных переходов 0—1, 0—2 и 1—2 NO^+ в основном состоянии. Billingsley Frank P., II. Calculation of the absolute infrared intensities for the 0—1, 0—2 and 1—2 vibration—rotation transitions in the ground state of NO^+ . «Chem. Phys. Lett.», 1973, 23, № 2, 160—166 (англ.)

Метод самосогласованного поля при учете многих конфигураций применен для расчета дипольного момента иона NO^+ вблизи равновесного значения R_e для основного электронного состояния $^1\Sigma^+$. Вычислены абс. интенсивности ИК-полос поглощения, относящиеся к колебательно-вращательным переходам 0—1, 0—2 и 1—2. Полученные значения для основного перехода 0—1 ($88,8 \text{ см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}$) и обертона 0—2 ($0,6 \text{ см}^{-3} \cdot \text{атм}^{-1}$) при $213,16^\circ \text{K}$ хорошо согласуются с эксперим. результатами, полученными при исследовании верхних слоев атмосферы.

А. Бобров

4-3036

Х. 1974

№9

XI-3274

1973

O^+ , NO^+ , N^+ (A.P.)

Dông P., Bizot M.,
Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.,
1973, 10, N3, 227-246

P. W. X., 1973, 95967

10

40129.9155

TE, Ch, Ph

NO⁺

A.P.

96559

1973

K 4-3271

Eland J.H.D. — Predissociation of N₂O⁺
and COS⁺ ions studied by photoelectron-
photoion coincidence spectroscopy.

"Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.",
1973, 12, N 4, 389-395 (англ.)

0032 тек

009 011

0.25

ВИНИТИ

NO-
paues
(yours!)

Esikini (?)

Acta Chem. Scand, 1973,
27, n1, 71-78

(some papers of
Demetres of NGU).

NO⁺

оттиск 1266

1973

3 Б27. Валентные состояния иона NO⁺. Field Robert W. The valence states of NO⁺. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 47, № 2, 194—203 (англ.)

Пересмотрены эксперим. данные по оптич. и фото-
электронным спектрам иона NO⁺. Выполнен анализ вращательной структуры ряда полос 8 электронных переходов и с учетом спин-орбитального взаимодействия между синглетными и триплетными состояниями вычислены «невозмущенные» значения молек. постоянных для 8 низлежащих электронных состояний NO⁺. Построены потенц. кривые Ридберга — Клейна — Риса для этих состояний NO⁺, по к-рым вычислены факторы Франка — Кондона и относит. интенсивности полос в оптич. и фото-электронном спектрах. Результаты расчета согласуются с эксперим. данными.

М. Р. Алиев

x 1974

N3

NO⁺

1973

2 Д138. Валентные состояния молекулярного иона NO⁺. Field Robert W. The valence states of NO⁺. J. Mol. Spectrosc., 1973, 47, № 2, 194—203 (англ.)

Для молекулярного иона NO⁺ табулированы спектроскопич. константы восьми нижних электронных состояний. Используются имеющиеся данные по оптическим и фотоэлектронным спектрам, а также интерполяция по соответствующим состояниям изоэлектронных молекул CO и N₂. Дается интерпретация ранее изучавшихся спектров излучения для долгоживущих состояний иона NO⁺. Проводится сравнение интенсивностей переходов с ионизацией из состояния NO X²П, наблюдаемых в фотоэлектронных спектрах, с вычисленными факторами Франка — Кондона.

Э. Р. А.

М. И.
Э. Р.
Россов1974
№ 2

(11)

14

1266
057чк

31203.7367
Ch, TE

NO -
(A.P)41197

1973

1374

Gupta Satish K., Melton Charles E.
A study of the formation of negative
ions in nitric oxide and the interaction
of NO with H- and O- from water.

"J. Phys. Chem.", 1973, 77, N 22, 2594-2598

(англ.)

1015 ББК

1000 1002

11 0 0 8

ВИНИТИ

NO⁺

1973

6 Д196. Исследование фотоионизации NO масс-спектрометрическим способом. Детальное излучение пороговой области. Killgoar P. C., Jr, Leroi G. E., Berkowitz J., Chupka W. A. Photoionization mass spectrometric study of NO. A closer look at the threshold region. «J. Chem. Phys.», 1973, 58, № 2, 803—806 (англ.)

фотоионизация

Кривая эффективности фотоионизации (КЭФ) NO⁺ получена для интервала энергий 9,25—10,00 эв. В качестве света использован газовый разряд в Ar (непрерывный спектр излучения в области 1100—1350 Å), причем выделение нужной длины волны обеспечивалось метровым УФ-монокроматором с дисперсией 8,3 Å/мм. Зарегистрирована тонкая структура КЭФ, которая наблюдается на фоне ступенчатых изменений, обусловленных колебательными уровнями NO. Тонкая структура КЭФ связывается с ридберговскими сериями, сходящимися к возбужденным колебательным уровням основного состояния (¹Σ⁺) иона NO⁺. Г. А.

ф. 1973. № 6

NO⁺

1973

77657n Photoionization mass spectrometric study of nitrogen nonoxide. Closer look at the threshold region. Killgoar, P. S., Jr.; Leroi, G. E.; Berkowitz, J.; Chupka, W. A. (Dep. Chem., Michigan State Univ., East Lansing, Mich.). *J. Chem. Phys.* 1973, 58(2), 803-6 (Eng). The photoionization efficiency curve of NO⁺ was obtained by using the Ar continuum in the energy range 9.25-10.00 eV. Considerable fine structure was obsd. superimposed on the vibrational steps of the NO⁺ ionization curve, which is attributed to vibrational autoionization. This structure has been assigned to Rydberg series converging to the excited vibrational levels of the ground NO⁺ ion (¹Σ⁺).

photo-
ionization

C.A. 1973. 78. N12

NO⁺

1973

15 Б102. Изучение NO методом масс-спектрометрии с фотоионизацией. Детальное рассмотрение в припороговой области. Killgoar P. C., Jr, Leroi G. E., Berkowitz J., Chupka W. A. Photoionization mass spectrometric study of NO. A closer look at the threshold region. «J. Chem. Phys.», 1973, 58, № 2, 803—806 (англ.)

(Σ_i)
Кривая эффективности фотоионизации (КЭФ) NO⁺ в припороговой области получена на масс-спектрометре с магнитным анализатором, соединенном с вакуумным УФ-монохроматором. В кач-ве источника излучения использован сплошной континуум Ar (~1100—1350 Å), что позволило, в отличие от многолинейного псевдоконтинуума Н-лампы, уверенно регистрировать ТС, наложенную на первые 3 ступени КЭФ. Наблюдаемые линии принадлежат автоионизации с уровней Ридберга при колебательных возбуждениях из основного ($X^1\Sigma^+$) состояния NO⁺.

х. 1973 N 15

Для 12 наблюдаемых пиков первой, 9 пиков второй и 5 пиков третьей ступеней КЭФ приведены значения измеренных длин волн и обозначения соотв-щих автоионизац. структур. Обсуждаются механизмы образования отдельных переходов.

М. Туркина

NO⁻

$g = 535$

✓ 1973

166298p Nature of the resonant states of the nitrosyl ion. Lefebvre-Brion, H. (Cent. Mec. Ondul. Appl., Paris, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1973, 19(3), 456-8 (Eng). The stabilization method of Taylor was used to calc. the nature of the states of NO⁻ corresponding to the lowest resonances obsd. recently by Sanche and Schulz. They consist of 2 Rydberg electrons in the core of the $X^1\Sigma^+$ ground state of the ion. The proposed assignments are the $(R_s\sigma)^2\Sigma^+$, $(R_s\sigma)(R_p\pi)^3\Pi$, $(R_s\sigma)(R_p\sigma)^3\Sigma^+$ states. The 4th resonance is attributed to an $(R_p\pi)^2\ ^3\Sigma^-$ state. The Rydberg orbitals of these states of the neg. ion are more diffuse than the corresponding ones of the neutral mol.

M.H.

Kb. Mex.

parent

5
C.A. 1973.78 N 26

NO

17 Б11. Природа резонансных состояний иона NO^- .
Lefebvre-Brion H. Nature of the resonant states of
 NO^- . «Chem. Phys. Lett», 1973, 19, № 3, 456—458
(англ.)

С целью исследования природы низких резонансных состояний иона NO^- (см. Sanche L., Schulz C. J., Phys. Rev. Lett., 1971, 27, 1333) проведено изучение зависимости результатов расчета неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО (с учетом конфигурац. взаимодействия) энергий состояний $^1\Sigma^+$, $^3\Sigma^+$, $^3\Sigma^-$, $^3\pi$ от базисного набора АО слейтеровского типа. В расчете использованы три базисных набора, наибольший из к-рых содержал 21 АО σ -и 9 АО π -типа. Найдено, что увеличение числа диффузных АО в базисе приводит к незначит. изменению энергии состояния $^1\Sigma^+$ иона NO^- по сравнению с энергией $\text{NO}(A^2\Sigma^+)$, в то время, как изменение энергий остальных состояний значительно. Отмечается, что конфигурации, имеющие наибольший вес, для упомянутых состояний можно получить добавлением двух ридбергов-

Si

4^{*}-

535

х. 1973 N 17

ских орбиталей к МО системы $\text{NO}^+(\text{X}^1\Sigma^+)$, причем они имеют более диффузный характер, чем ридберговские орбитали NO.

В. И. Пупышев

30523.8739
TE, B, Ch

96201

No-

*

Lefebvre-Brion H.

Nature of the resonant states of NO^+ .

"Chem. Phys. Lett.", 1973, 19, N 3, 456-458
(англ.)

0877

863 864

870

ВИНИТИ

NO⁺

BO⁺

O⁺

Электр.
удар

1973

11 Д394. Электронные состояния B⁺, образующиеся в результате электронной бомбардировки молекул тригалогенидов бора: некоторые ионно-молекулярные реакции B⁺. Lin K. C., Cotter R. J., Koski W. S. Electronic states of B⁺ produced by electron bombardment of the boron trihalides: some ion-molecule reactions of B⁺. «Electron. and Atom. Collisions. Abstr. pap. 8 ICPEAC, Beograd, 1973. Vol. 1». Beograd, 1973, 103 (англ.)

Последовательность молекул BF₃—BJ₃ соответствует убыванию кол-ва ионов B⁺ в состоянии ³P, образующихся в результате электронного удара (70 эв). Так, доля ³P-состояний составляет 35% (¹S — 65%) для BF₃, тогда как для BJ₃ выход ¹S-состояний близок к 100%. Наб. даются заметные различия выхода BD⁺ в результ.

Ф. 1973 N 11.

(+2)

⊗

$B^+ + D_2$ в зависимости от электронного состояния B^+ : для основного состояния сечение растет с увеличением кинетич. энергии иона, для 3P -состояния наблюдается обратная зависимость. В случае взаимодействия $B^+ - N_2O$ различия проявляются в порогах реакции, а увеличение кинетич. энергии влечет за собой возрастание се-

чения; в продуктах взаимодействия зафиксированы NO^+ , BO^+ , O^+ .

Г. А. Вомпе

NO^-

N_2O^-

NO_2^-

(обяз.
норма)

R. Marx, G. Maclaure 1973

Fehsenfeld F.C.

Dunkin D.B.

Ferguson E.E.

J. Chem. Phys. 1973, 58, N8

3267-73

NO⁺

Мартенсбург Гид. 1973

Бюро Э.Р.

меморанд "Тр. Цетер. аэрол. обрб"
обрб 1973, том 113, 33-44.

(см NO) III

100-

XI-3823

1973

(Aē)

1/ 5 D221. Электронное сродство молекул, определяемое из столкновительной ионизации с цезием. I. NO, NO₂, и N₂O. Nalley S. J., Compton R. N., Schweinler H. C., Anderson V. E. Molecular electron affinities from collisional ionization of cesium I. NO, NO₂ and N₂O. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 8, 4125—4139 (англ.)

Измерены относит. величины сечений образования отрицат. ионов исходных молекул NO, NO₂ и N₂O и осколочных ионов O, возникающих при столкновениях указанных молекул с атомами Cs в области энергий 0—40 эв. Нейтральные атомы Cs⁰ требуемой энергии создавались в перезарядном источнике, затем анализировались по скоростям, детектировались методом ионизации.

Ф. 1974 N 5

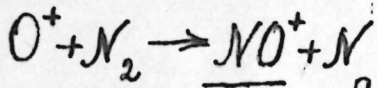
④ м.с.

④3



защиты атомов на нагретой вольфрамовой проволоке и регистрировались электронным умножителем. Образующиеся в области столкновения ионы идентифицировались по массам с помощью времяпролетного масс-спектрометра и регистрировались по методу счета отдельных ионов. Величины энергий электронного средства определялись из кривых зависимости сечений образования ионов от энергии атомов Cs^0 по пороговым значениям энергий соударения и с использованием математич. процедуры анализа припороговых «хвостов» кривых, обусловленных доплеровским движением молекул мишени. Нижние пределы энергий средства оказались равными (в эв): $0,1 \pm 0,1$ (NO^-); $2,5 \pm 0,1$ (NO_2^-); $-0,15 \pm 0,1$ (N_2O^-). Для O^- , образуемого при столкновении Cs^0 с N_2O , электронное средство оценивается величиной 11 эв.

И. Флакс'



1973

R. H. Neynaber

G. D. Magnuson.

кон-мол.

взаимог.

"J. Chem. Phys"

1973, 58, N10, 4586-98.

"Low-energy study of ... (peaks).

23 Б942. Образование коротко живущих отрицательных ионов в NO и O₂. Виггов Р. D. Temporary negative ion formation in NO and O₂. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 26, № 2, 265—268 (англ.)

Спектрометр энергии электронов использован для определения интенсивности рассеяния назад электронов с энергией от 0 до 2 эв на газовых мишенях NO и O₂. Кривые зависимости интенсивности рассеянного тока электронов от энергии имеют ярко выраженную структуру с максимумами, соответствующими колебательным уровням ионов O₂⁻ и NO⁻ в состояниях X²Π_g и ¹Δ соответственно. — Определены параметры состояния O₂⁻(X²Π_g) $\hbar\omega_e = (137 \pm 4) \cdot 10^{-3}$ эв и $\hbar\omega_e x_e = (1,1 \pm 0,2) \cdot 10^{-3}$ эв, что хорошо совпадает с лит. данными. Состояние NO⁻(¹Δ) лежит на 0,65 эв выше основного состояния NO и на 0,68 эв выше состояния NO⁻(X³Σ⁻).
Л. Ю. Русин

1974

XI-4/64

NO⁻

O₂⁻

м.к.; E_i

Х.1974. N 23



КО-

XI-4107

1974

(11 Д231) Образование неустойчивых отрицательных ионов в NO и O₂. Burrow P. D. Temporary negative ion formation in NO and O₂. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 26, № 2, 265—268 (англ.)

Сообщаются результаты изучения упругого обратного рассеяния электронов (угол рассеяния 180°) в NO и O₂. Применение пучка электронов с энергией 0—

образование
отриц. иона

р. 1974 № 11

☒ (+1) м.с.

2 эв позволило исследовать образуемые при этом отрицат. ионы, которые являются неустойчивыми. Обнаружена хорошо выраженная структура на измеренных зависимостях электронного тока от энергии электронов, которая связана с возбуждением колебательных уровней отрицат. ионов. Получены данные, свидетельствующие об образовании отрицат. иона $\text{NO}-(^1\Delta)$.

А. П. Калинин

1974

 NO^+

всвобождение химической энергии
при фрагментации ионов;

иснаде N_2O^+ ; COS^+ и CF_4^+ .

(E)

Brehm B, Frey R, et al.

"Int. J. Mass. Spectrom. and
Ion Phys." 1974, 13, N 3, 251-
260 (avr)



(all CF_3^+ ; III)

X 1974 N 10

40729.6711

Ph, Ch, MGU, TC

NO⁻96201

1974

01* 5-5817

Burrow P.D. Temporary negative ion
formation in NO and O₂. "Chem. Phys.
Lett.", 1974, 26, N 2, 265-268

(англ.)

0104 0001

132 133

156

ВИНИТИ

$CO; CO^+; NO^+; CF^+$ (u, parcm) XII 2831 1974
Cambary J., Gasteiger J., Streitwieser
A., Jr., Bagus P. S.,
J. Amer. Chem. Soc., 1974, 96, N19, 5978-

-5984 (ans.)
Self-consistent field calculations
of hole states of carbon monoxide.
Electron density functions by
computer graphics.

PkTus, 1975, 3D200

10

NO+

XIII-2890-89

1974

4-7524

9491m Electroionization spectrum of nitric oxide. Car-
bonneau, R.; Marmet, P. (Dep. Phys., Univ. Laval, Quebec, Que.).
Can. J. Phys. 1974, 52(19), 1885-90 (Eng). Neg. ion resonances
having the $\text{NO}^+ b^3\Pi$, $A^1\Pi$, $c^3\Pi$, and $B^1\Pi$ states as grandpar-
ents were obsd. for the 1st time in the electroionization spectrum
of NO. The results are compared with those from electron trans-
mission expts. Some Rydberg states from the series converging to
the $\text{NO}^+ b^3\Pi$ state were analyzed.

Rydberg-
comb.

C.A. 1975. 82 N2

4081919093
Ph, Ch, TC

Крив. готовому 1974
№⁺ 96559
потенц. крив. 4-598

Coppens P., Smets J., Fishel M.G.,
Drowart J. Mass spectrometric study
of the photoionization of nitrous
oxide in the wavelength interval 1000-
600Å. "Int. J. Mass Spectrom. and Ion
Phys.", 1974, 14, N 1, 57-74
(англ.)

0173

8872-111X-48

138 142 отчек 3134

ВИНИТИ

1974

№ 0 *

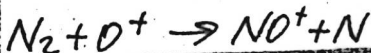
Отчет по научно-исслед.
работе ИВТ АН, отдел № 8
"Термодинамические св. ва
азота, водорода и их соеди-
нений".

и.п.

40515.8762
TE, Ch, Ph, MGU

книжка 40892

1974



*44692

Smith Gregory P.K., Cross R.J., Jr.

Crossed beam study of the reaction $O^+ + N_2 \rightarrow NO^+ + N$.

"J.Chem.Phys.", 1974, 60, N 5, 2125-2131.

(англ.)

0101 1974

083 091 - 093

ВИНИТИ

оттиск 2242

1974

NO-

23 Б24. Расчет ряда наблюдаемых состояний молекул NO^- , NO , NO^+ , NO^{2+} , методом конфигурационного взаимодействия. Thulstrup P. W., Thulstrup E. W., Andersen A., Öhrn Y. Configuration interaction calculations of some observed states of NO^- , NO , NO^+ , and NO^{3+} . «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 10, 3975—3980 (англ.)

В базисе слейтеровских функций проведен расчет потенциальных кривых молекул $\text{NO}^- (^3\Sigma)$, $\text{NO} (^2,4\Pi)$, $\text{NO}^+ (^1,3\Sigma, ^1,3\Pi, \Delta)$, $\text{NO}^{2+} (^2\Sigma, ^2\Pi, ^2\Delta)$ методом конфигурац. взаимодействия. Расчеты учитывают не более 269 конфигураций данного типа симметрии и возбуждения лишь валентных электронов. Подробно рассмотрены имеющиеся данные фотоэлектронной и электронной спектроскопии, к-рые сопоставлены с полученными потенциальными кривыми.

В. И. Пупышев

Ei, расчет

x. 1974. N23

(F3)

12

NO-

иттен 2242

1974

11 Д133. Расчет некоторых наблюдаемых состояний молекул NO^- , NO , NO^+ и NO^{2+} с учетом конфигурационного взаимодействия. Thulstrup P. W., Thulstrup E. W., Andersen A., Öhrn Y. Configuration interaction calculations of some observed states of NO^- , NO , NO^+ , and NO^{2+} . «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 10, 3975—3980 (англ.)

Для молекулы NO и перечисленных в заглавии ее ионов вычислена зависимость энергии от межатомного расстояния r от 1 до 3 Å в основном и в нескольких низкоэнергетич. возбужденных состояниях. Этот неэмпирич. расчет выполнен в миним. базисе АО Слэтера, с оптимизацией показателей экспонент в этих АО, методом (РЖФиз, 1969, 3Д107), обеспечивающим правиль-

(ϵ_i ; расчет)

ф. 1974. № 11

(+3) ☒

ную проекцию многоконфигурационной волн. ф-ции в фиксированное спиновое состояние молекулы. Оптимизация показателей экспонент заметно улучшила согласие с экспериментом по сравнению с предыдущим расчетом (РЖФиз, 1973, 3Д154): разности между значениями энергии при стационарных значениях r в возбужденном и в основном состояниях, как правило, отличаются от их эксперим. значений на десятые доли электронвольт, сами эти r — не более чем на $0,05 \div 0,1$ Å, частоты — на $10 \div 20\%$, а энергии диссоциации — не более чем на 2 эв.

Ю. Е. Эйзнер

40724.7534

40892

1974

Ch, Ph, TC

NO⁺

2242

Thulstrup P.W., Thulstrup E.W., Andersen
A., Öhrn Y. Configuration interaction
calculations of some observed states of
NO⁻, N₂O, NO⁺, and NO²⁺. "J.Chem.Phys.",
1974, 60, N10, 3975-3980 (англ.)

(ср. NO⁻, 10)

I28 I33

0150

ВИНИТИ

40724.7534

40892

1974

Ch, Ph, TC

NO²⁺

2242

Thulstrup P.W., Thulstrup E.W., Andersen
 A., Öhrn Y. Configuration interaction
calculations of some observed states of
NO⁻, N₂O, NO⁺, and NO²⁺. "J.Chem.Phys.",
 1974, 60, N10, 3975-3980 (англ.)

(see. NO⁻; III)

0418 541

I28 I33

0150

ВИНИТИ

1975

NO⁺ommu 3240
OTUCL 3251

(u.n)

106081f Laboratory determination of the frequencies of possible interstellar lines of nitrogen monoxide(+). Alberti, F.; Douglas, A. E. (Div. Phys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *Can. J. Phys.* 1975, 53(12), 1179-81 (Eng). The $A^1\Pi-X^1\Sigma$ emission bands of NO^+ were photographed at high dispersion and, from the measurements of these spectra, the frequencies of lines which are likely to be of astronomical significance were detd. The $(J = 1)-(J = 0)$ transition of the lowest vibrational level of the $X^1\Sigma$ state lies at $119, 187 \pm 30$ MHz. The consts. of the $A^1\Pi$ and $X^1\Sigma$ states have been improved.

C.A. 1975. 83 N 12

1975

NO⁺

check

185: 85024p Experimental measurement of nitric oxide(+) radiative lifetime. Bien, Fritz (Aerodyne Res. Inc., Bedford, Mass.). U. S. NTIS, AD Rep. 1975, AD-A022682, 46 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1976, 76(11), 9. The location and integrated absorption coeff. of the R-3 line for the $v = 1$ to $v = 2$ vibrational transition in NO⁺ was exptl. measured. The location of the line center was 2327.20 + or -0.01/cm, 0.07/cm higher than the previously calcd. value. The line was Doppler broadened, giving an integrated absorption coeff. of 240 + or 1(+100, -75)/cm²-atm. This value would be consistant with a thermal equil. ground state integrated absorption coeff. of 280/cm²-atm one half the value of previous observations and a factor of 3 higher than theor. predictions, the accuracy in the ground state equil. value is + or - a factor of 2 due to the uncertainty in relative vibrational populations.

C.A. 1976 85 N 12

№0 -

* 4-8359

1975

№2 -

116487m Shape resonances in the nitrogen monoxide(-) and molecular nitrogen(-) ions. Campeanu, Radu I. (Fac. Phys., Univ. Cluj, Cluj, Rom.). *Chem. Phys. Lett.* 1975, 30(2), 245-8 (Eng). The method used by F. Koike and T. Watanabe (1973) to describe neg. mol. ion formation is generalized for multiwaves states of the extra electron. The structure of the shape resonances in NO- and N₂- is discussed. For the NO-captured electron it is found that the $d\pi$ -wave component increases with increasing resonance energy.

обяз. опис. моноб.

(+1) ☒

с. 1. 1975. 82 N 18

NO⁺

1975

chemp.

18567p Penning ionization optical spectroscopy. Metastable helium (He 2³S) with nitric oxide. Coxon, J. A.; Clyne, M. A. A.; Setser, D. W. (Queen Mary Coll., Univ. London, London, Engl.). *Chem. Phys.* 1975, 7(2), 255-66 (Eng). The interaction between NO(X²II) and metastable He(2³S) atoms was investigated by emission spectrometry. Several reaction channels were identified, leading to NO⁺(A¹II), or to electronically excited N or O atoms. The NO⁺(A¹II-X¹Σ⁺) banded emission was obsd. in the range 123-190 nm, and it was analyzed for vibrational and rotational populations. The NO⁺(A) state vibrational population distribution, detd. with a new set of Franck-Condon factors for NO⁺(A-X), is in approx. accord with the calcd. NO⁺(A)-NO(X) Franck-Condon (FC) factors; however the $\nu' = 2-5$ levels are overpopulated relative to the FC values. The NO⁺(A) state rotational populations are shifted to high J -values than the precursor, NO(X). Emission was obsd. from several excited states of O and N in both the vacuum uv and red regions of the spectrum. Comparison of total emission rates from excited at. fragments with emission from NO⁺(A) showed that the cross-section for dissociative excitation was similar to that for Penning ionization giving NO⁺(A).

C. A. 1975. 83 N2

18P-XI-4513

51128.3416

Ch, Ph, TC

41125 (no name)
NO + к (publ.)

1975

3540

Finlan J. Michael, Simons Gary. Capabilities and limitations of an analytic potential expansion for diatomic molecules.

~~Journal of Molecular Spectroscopy~~ "J. Mol. Spectrosc.", 1975, 57, N 1, 1-13 (англ.)

(англ.)
5.25/111
0517

4.80 4.81

509

ВИНИТИ

9 Б32. Угловое распределение чисто резонансного рассеяния электронов двухатомными молекулами, описываемыми случаями Гунда «a» и «b». Fiquel-Fayard Florence. Angular distributions for pure resonant scattering of electrons by diatomic molecules in Hund's cases a and b. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1975, 8, № 17, 2880—2897 (англ.)

Обобщен метод расчета сечений резонансного возбуждения и углового распределения рассеяния электронов, предложенный ранее (РЖХим, 1972, 2Б214). Допускается существование узких по сравнению с расстоянием между вращательными уровнями резонансных состояний, явно учтены спин и четность состояний, а также не вводится обычное упрощение локальной ширины резонансного состояния. Выбор базиса для описания двухатомных молекул проведен в предположении, что эти молекулы описываются случаями связи «a» и «b» по Гунду. В используемом методе предполагается, что рассеяние происходит за счет чисто резонансного возбуждения по всем неупругим каналам, однако при этом впервые исследовано и влияние потенциального рассеяния по неупругим каналам. Теор. результаты применены к описанию резонансных $^3\Sigma^-$, $^1\Delta$, $^1\Sigma^+$ -состояний NO^- и $^2\Pi_g$ -состояния O_2^- .

Б. И. Жилинский

№ -

O_2^-

(и.п.)

(+1) ☒

X 1976 N 9

1975

NO^+

1975

Ximolinge W., et al

J. Chem. Phys.,

1975, 62, N9, 3517 - 3522

кобальт.
ионов.

● (all H_3^+ ; III)

51030.9057

Ph, Ch, TC, DB

96615

NO⁺

1975

* 4-10427

Paoloni L., La Manna G.

The electronic structure of $N_4N_6^{2+}$
and the bonding interaction of NO^+
and NO_3^- . "J. Mol. Struct.", 1975,
28, N 2, 319-322

(англ.)

0485

450 453

ВИНИТИ

№ +

отпуск А-2948 1975

Рагун А А

(с.п.н, до
Т, с.п.н.п.н.)

В сб. "Книжка памяти"
1975, вып 2, 3-61
и, Амурская.

50701.8446

Ch, Ph, TC, MGU

NO - 30063

1975

* 4-9441

Tronc M., Huetz A., Laundau M., Pichou F.,
Reinhardt J. Resonant vibrational excita-
tion of the NO ground state by electron
impact in the 0.1-3 eV energy range.

"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.", 1975, 8, 1
N 7, 1160-1169

(см. NO III)
(англ.)

370 376

0393

0401 ПЧК
ВИНИТИ

0516-3750

NO⁺

1976

(Ji)

86: 10213m Low-temperature vibrational spectra of some nitrosyl salts. Adams, David M.; Appleby, Roger (Dep. Chem., Univ. Leicester, Leicester, Engl.). *J. Inorg. Nucl. Chem.* 1976, 38(9), 1601-3 (Eng). Changes in the vibrational spectra of NO[SbCl₆], (NO)₂[SnCl₆], and (NO)₂[TiCl₆] on cooling to liq. N temps. were interpreted in terms of phase changes to low symmetry structures with centrosym. space groups and $z = 2, 4$. Restriction of rotation of NO⁺ resulted in appearance of Raman and ir bands at $\sim 235 \text{ cm}^{-1}$ due to NO⁺ libration and series of translatory lattice modes.

P.A. 1977 86 N2

NO-

1976

Abouaf R.
Paineau R.

(A.P.)

J. Phys B 1976, 9(2)
303-14 (eng)

(cu 0; III)

NO⁺

1976

8 Д399. Влияние преионизации на фотоэлектронные спектры: колебательное возбуждение NO⁺(X¹Σ⁺). Carpace G., Delwiche J., Natalis P., Collin J. E., Preionization effects in photoelectron spectra: vibrational enhancement of NO⁺, X¹Σ⁺. «Chem. Phys.», 1976, 13, № 1, 43—49 (англ.)

фотоэлектронный спектр - Исследованы фотоэлектронные спектры NO, полученные при возбуждении излучением-резонансных линий HeI (584 Å), NeI (736 Å), ArI (1048 Å), ArI (1067 Å) на 180° полусферическом электростатич. анализаторе. Показано, что колебательное распределение ионов NO⁺(x¹Σ⁺) при ионизации излучением 584 и 736 Å обусловлено прямой фотоионизацией. Обсуждается природа сверхвозбужденных состояний NO, преионизационный распад которых вызывает аномальное колебательное возбуждение NO(x¹Σ⁺) при ионизации NO ли-

ф. 1976 № 8.

ниями 1048 Å и 1067 Å. Произведены расчеты коэф. Франка—Кондона для перехода преионизационное состояние→ионное состояние. Наилучшее согласие рассчитанных коэф. Франка—Кондона с эксперим. колебательным распределением ионов $\text{NO}(x^1\Sigma^+)$ достигается при следующих значениях параметров потенц. кривой преионизационного состояния: $v=3$, $R_e=1,26$ Å (1048 Å); $v=1$, $R_e=1,25$ Å (1067 Å). Показано, что доминирующим процессом при фотоионизации NO излучением 1048 Å и 1067 Å является преионизация сверхвозбужденных состояний NO. Библ. 30.

Ю. В. Чижов

NO^+

1976

16 Б129. Эффекты преионизации в фотоэлектронных спектрах: колебательное усиление в NO^+ , $X^1\Sigma^+$. Caprace G., Delwiche J., Natallis P., Collin J. E. Preionization effects in photoelectron spectra: vibrational enhancement of NO^+ , $X^1\Sigma^+$. «Chem. Phys.», 1976, 13, № 1, 43—49 (англ.)

Изучены спектры фотоионизации NO , возникающие при возбуждении NO резонансными линиями He-I , Ne-I и Ar-I . Показано, что распределение интенсивностей колебательных линий в $X^1\Sigma^+$ -состоянии NO^+ , полученное при использовании излучения He-I и Ne-I , полностью определяется факторами Франка—Кондона. При использовании излучения Ar-I с длинами волн 104,8 и 106,7 нм обнаружены разные распределения интенсивностей, существенно отличающиеся от соотв-щих факторам Франка—Кондона. Аномалии в распределении интенсивностей объяснены эффектами преионизации через нек-рые супервозбужденные состоя-

фотоиониз.
спектр.

Х. 1976 №16



NO (фотоиониз.)

ния, расположенные значительно выше границы непрерывного спектра для состояния $X^1\Sigma^+$. Проведены расчеты распределения интенсивностей с учетом факторов Франка—Кондона как для прямой фотоионизации, так и для преионизации, на основании к-рых показано, что главный вклад в распределение интенсивностей колебательных переходов дают преионизац. состояния.

Б. И. Жилинский



NO⁺

1976

Carrington A., et al.

Mol. Phys. 1976, 32,
W1, 297-300.

(лазерн.
спектроскопия)



(см. H₂⁺)

III

1976

5 Д271. К перезарядке NO на ионах инертных газов. Collin J. E. On the charge-transfer reaction between no and raregas ions. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1976, 21, № 3—4, 415—416 (англ.)

Обсуждаются эксперим. данные по перезарядке ионов инертных газов на ряде двухатомных молекул. Указывается, что приведенная ранее интерпретация эксперим. данных для NO не согласуется с известной информацией об энергетич. уровнях иона NO^+ . Из приведенного анализа следует, что ионы NO^+ ($X^1\Sigma^+$), образованные резонансной перезарядкой на ионах Kr^+ , должны быть с очень большим колебательным возбуждением в противоречии с ожидаемой малой вероятностью перехода из-за чрезвычайно малой величины соответствующих факторов Франка—Кондона. Если заключение корректно, то из него следует вывод о нарушении приближения Борна—Оппенгеймера в процессах перезарядки.

Г. К.


 (H)



sp. 1977 N5

 (переза-
 зарядка
 на инерт.
 газах)

 NO^+
 NO^-

NO⁺

1976

образов.
основн.
состоян

6 Д239. Исследование перезарядки Ar^+ на NO методом молекулярных пучков. Herman Z., Pasak V., Hensch A. J., Futrell J. Crossed beam study of charge transfer of Ar^+ with NO. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 37, № 2, 329—334 (англ.)

Методом молекулярных пучков в интервале энергий вблизи 1 эв исследована реакция перезарядки при столкновениях ионов $\text{Ar}^+(^2P_{3/2}, ^2P_{1/2})$ с молекулами NO. Анализ углового распределения ионов NO^+ указал на возможность как прямого механизма перезарядки, так и механизма через образование промежуточного комплекса. Анализ кинетич. энергии продуктов указал на то, что перезарядка сопровождается квазирезонансным переходом $\text{NO}(^2\Pi) \rightarrow \text{NO}(^3\Sigma^+)$. Образование основного $X^1\Sigma^+$ - и возбужденных $b^1\Pi$, $\omega^3\Delta$ -состояний иона NO^+ считается маловероятным вследствие необходимости значительного изменения длины N—O-связи, которое не может осуществиться в промежуточном комплексе.

А. Зембеков

Ф 1976 № 6

61228.7380
Ph, TC

41195

NO +

1976

X 4-16108

Miescher E., Alberti F.

Atlas of the absorption spectrum
of nitric oxide (NO) between 1420
and 1250 Å.

"J. Phys. and Chem. Ref. Data", 1976, 5, N 2,
309-317 (англ.)

709 724

0729

пкк

ВИНИТИ

61217.8859

Ch, Ph, TC

35247

1976

NO+

* 4-15777

Miescher E.

High resolution absorption spectrum of
nitric oxide (NO) in the region of the
first ionization limit.

"Can. J. Phys.", 1976, 54, N 20, 2074-2092
(англ., рез. франц.)

0770 лнк

738 741 7 6 2

ВИНИТИ

613.19.87+7
Ch, Ph, TC, MSU

40892

NO+

1976

X 43-15299

Ng C. Y., Mahan B. H., Lee Y. T.

Photoionization with molecular beams. I.
Autoionization structure of nitric
oxide near the threshold.

"J. Chem. Phys.", 1976, 65, N 5, 1956-1961
(англ.)

~~0750-англ~~

706 720742

ВМНИИТИ

70211.7227
Ch, Ph, TC

NO^+ 40892

1976

* 4-16668

Squires Larry, Baer Thomas.
Cross sections for symmetric charge
transfer reactions of Xe^+ and NO^+ in
selected internal and translational
energy states.

"J.Chem.Phys.", 1976, 65, N 10, 4001-4006

0811 физ. (англ.)

761 770

ВИНИТИ

70325.1767

Ch, TC, Gph, MG

NO + (0892)
Kryukov

1977

17656

Ajello J.M., Rayermann P. A photoionization study of the formation of NO_2^+ by reaction of excited O_2^+ ions with NO. "J. Chem. Phys.", 1977, 66, N3, 1372-1374 (англ.)

0839

811 822 830

ВИНИТИ

NO+

Bozhenko R.V.,
Charkin D.P.

1977

(кв. мех.
парци.
То) "Эк. Структ. Квем.",
1977, 18(2), 219-24.

оригинал 6136

С.А. 1977. 87. N4

(сер. БН) III

1977

NO⁻ClO₂⁻BH₃⁻

88: 141972x Geometry changes on negative ion formation. Blustin, Peter H. (Dep. Chem., Univ. Sheffield, Sheffield, Engl.). *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1977, (22), 797-8 (Eng). Changes in bond length which accompany anion formation in small mols., e.g. NO, ClO₂, BH₃, were discussed in terms of a simple model.

2 e⁻

④

☒

C.A., 1978, 22, N20

NO^+

ommu 5948 1974

Breuer H.D., et al.

Intern. Conf. Molecular

Isolat. Spectrosc.

Si
cncap
bncapuse

West-Berlin, 21-24,
June, ● 1974.

NO⁺

1977

M. N.

89: 171519t Perturbation of vibrational structure in the photoelectron spectra of small molecules. Collin, J. E.; Delwiche, J.; Natalis, P.; Caprace, G.; Praet, M. T. (Inst. Chim., Univ. Liege, Liege, Belg.). *Ext. Abstr. - Int. Conf. Vac. Ultraviolet Radiat. Phys.*, 5th 1977, 1, 139-41 (Eng). Edited by Castex, M. C.; Pouey, M.; Pouey, N. CNRS: Meudon, Fr. The nature i. discussed of perturbation effects produced in the UV (Net) photoelectron spectra of O₂ and NO as a result of electronic autoionization which occurs when the ionization radiation energy coincides with the energy of discrete mol. levels of the mol. For O₂, vibrational enhancement of the X²Π_g ground ionic state occurs; the branching ratio increases, and the α⁴Π_u progression is obsd. only to ν' = 5 with a marked intensity drop in the ν' = 4 and 5 levels. For NO, the ground ionic NO⁺ X'²Σ⁺ progression extends to ν' = 32 instead of ν' = 6 and shows 5 max.

Q. A. 1978, 29, N20

NO⁺

изучен
составлен
составлен.

Дарко Т.

1977

- "Chem. Phys. Lett."

1977, 45, N 1, 188-190

(англ.)

(см. NO, III)

Co_3^{2-} , NO_3^- , NO_2^- , SO_4^{2-} , SO_3^{2-} ,
 SeO_4^{2-} , SeO_3^{2-} , TeO_3^- , ClO_4^- , ClO_3^- , ClO_2^- , BrO_4^- ,
 BrO_3^- , IO_4^- , IO_3^- , $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$, MnO_4^- , TcO_4^- , ReO_4^- (D°)

Glidewell C. XI-5570a

Inorg. chim. acta, 1977, 24, N2, 149-157 (ann);
Bond energy terms in oxides and oxoanions.

PJH-Xum, 1978

25782

M, 10 (9)

NO⁺

am muer 5471

1977

Huntress W.T., Jr.

Astrophys. J. Suppl. Ser.,
1977, 33, (4), 495-514.

(AH⁺; I)

(em. H⁺; III)

ND^+

Kadota Kiyoshi 1977
et al

образов.
молекуляр.
ионов

"J. Phys. Soc Jap"

1977, 42, N1, 250-254

(anal)



(all N_2^+ ; III)

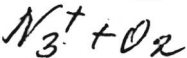
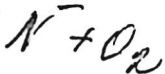
NO⁺

omni 5569

1977

McCumb J. L.
Wameck P.

ion-mol.
peaks



J. Chem. Phys., 1977,
66 N12, 5416-22

Product distributions
for the ion-molecule reactions

1977

No+

11 Б127. О R_e -функции системы $A-XNO^+$. Mur-
 ray P. S. On the R_e -function of the $A-X$ system of NO^+ .
 «Phys. Lett.», 1977, A63, № 3, 405—406 (англ.)

Проведен расчет факторов Франка—Кондона и r -цент-
 ронд для системы $A^1\Pi(v'=0-5)-X^1\Sigma^+(v''=0-5)NO^+$,
 основанный на результатах анализа электронно-колеба-
 тельно-вращательного спектра измеренного с высоким
 разрешением Альберти и Дугласом. Значения $r_v v''$ и

факторов Франка—Кондона равны: $v''=0, v'=0-5$ —
 1,125, 1,111, 1,098, 1,086, 1,074, 1,062 A, 0,025, 0,074,
 0,123, 0,150, 0,151, 0,132; $v''=1, v'=0-5$ — 1,147, 1,132,
 1,118, 1,105, 1,093, 1,081 A, 0,106, 0,173, 0,132, 0,052,
 0,005, 0,005; $v''=2, v'=0-5$ — 1,169, 1,154, 1,139, 1,125,
 1,113, 1,100 A, 0,208, 0,126, 0,007, 0,023, 0,075, 0,078;
 $v''=3, v'=0-5$ — 1,192, 1,176, 1,161, 1,146, 1,133,
 1,120 A, 0,251, 0,012, 0,055, 0,096, 0,033, 0,000; $v''=4,$
 $v'=0-5$ — 1,217, 1,199, 1,183, 1,168, 1,154, 1,140 A,
 0,207, 0,032, 0,15, 0,012 0,025, 0,070; $v''=5, v'=0-5$ —
 1,242, 1,224, 1,207, 1,191, 1,175, 1,161 A, 0,124,
 0,145, 0,030, 0,042, 0,078, 0,011.

В. М. Ковба

(5)

X. 1978
N 11

1977

№0⁺

6 Д507. К вопросу об R_e -функции системы $A-X$ иона NO^+ . Murty P. S. On the R_e -function of the $A-X$ system of NO . «Phys. Lett.», 1977, A63, № 3, 405—406 (англ.)

М. П.

Проанализированы имеющиеся в настоящее время данные об R_e -ф-ции системы $A-X$ иона NO^+ , представляющего интерес с астрофизич. точки зрения. Отмечено несоответствие результатов различных авторов. С использованием наиболее точных значений спектроскопич. постоянных состояний $A^1\Pi$ и $X^1\Sigma^+$ иона NO^+ (Alberti F., Douglas A. E., «Can. J. Phys.», 1975, 53, 1179) рассчитаны коэф. Франка—Кондона и r -центриды для полос $v''=0\div5$, $v'=0\div5$ системы $A-X$. При этом показано, что потенц. кривые состояний A и X в исследованной области межъядерных расстояний хорошо описываются ф-цией Морзе. Указана необходимость тщательного эксперим. исследования интенсивностей полос в системе $A-X$, анализ которых с использованием результатов настоящей работы позволил бы разрешить имеющиеся противоречия относительно зависимости момента перехода от межъядерного расстояния. Библ. 17.

В. С. Иванов

Ф., 1948, №5

1977

NO⁺

88: 13964j On the R_e -function of the A-X system of the nitrosyl ion. Murty, P. S. (Indian Inst. Astrophys., Kodaikanal, India). *Phys. Lett. A* 1977, 63A(3), 405-6 (Eng). The band intensity factors, and r -centroids are reported, for bands of the A-X system of NO⁺, a stable mol. ion of astrophys. and aeronomical interest. The need for further lab. band intensity measurements, is indicated, in order to resolve the existing ambiguity of the electronic transition moment R_e of the system.

$$(|R_e|^2)$$

C.A., 1978, 22, N2

1977

NO⁺

23 Б139. Очень высокое колебательное возбуждение, вплоть до $v'=32$, состояния $X^1\Sigma^+$ ионов NO^+ , наблюдаемое с помощью фотоэлектронной спектроскопии при ультрафиолетовом облучении. Natalis P., Delwiche J., Colin J. E., Caprace G., Praet M.-T. Very high vibrational excitation, up to $v'=32$, in NO^+ $X^1\Sigma^+$ ions by UV irradiation, evidenced by photoelectron spectroscopy. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 49, № 1, 177—179 (англ.)

M, N.

При возбуждении излучением Ne-I измерен фотоэлектронный спектр (ФС) основного состояния $X^1\Sigma^+$ иона NO^+ . ФС характеризуется очень длинной колебательной прогрессией с квантовыми числами v' от 0 до 32 и пятью основными максимумами в распределении интенсивности спектра. Из аппроксимации по методу наименьших квадратов зависимости наблюдаемых колебательных интервалов от колебательных квантовых

X. 1977 v23

числа v' в диапазоне от 0 до 26 для состояния $X^1\Sigma^+$ получена положит. константа ангармоничности (0,71%), а также значения ω_e и $\omega_e x_e$, составившие 2380 ± 170 и $17,0 \pm 1,2$ см $^{-1}$, соотв. Изученный ФС интерпретирован как результат суперпозиции 2-х процессов ионизации: а) прямая ионизация состояния $X^1\Sigma^+$ ионов NO^+ в колебательные состояния с v' от 0 до 6 при прямых переходах Франка—Кондона, и б) автоионизация из сверхвозбужденного состояния, приводящая к основному состоянию NO^+ на колебательных уровнях с v' от 6 до 32. Отмечено, что сверхвозбужденным состоянием иона является, возможно, электронное состояние $a^2\Sigma^-$ с неглубокой потенциальной кривой и большим равновесным межъядерным расстоянием $\sim 1,4$ А. И. Тополь

NO⁺

1977

12 Д313. Очень высокое колебательное возбуждение, до $v'=32$, иона NO⁺(X¹Σ⁺) при УФ-облучении, проявляющееся в фотоэлектронном спектре. Natalis P., Delwiche J., Colin J. E., Caprace G., Praet M.-T. Very-high vibrational excitation, up to $v'=32$,

in NO⁺X¹Σ⁺ ions by UV irradiation, evidenced by photoelectron spectroscopy. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 49, № 1, 177—179 (англ.)

В фотоэлектронном спектре молекулы NO на линии Ne(I), $\lambda=73,6$ нм, обнаружена чрезвычайно длинная колебательная прогрессия (от $v=0$ до $v=32$) в полосе, соответствующей переходу в основное состояние иона NO⁺(X¹Σ⁺). Распределение интенсивности в этой полосе показывает наличие пяти максимумов. Наблюдаемый эффект приписан автоионизации с уровня $v=4$ состояния a²Σ⁻ молекулы NO. Библ. 15. В. С. Иванов

фото-
электр.
спектр

Р. 1977, N12

70413.8339
Ch, Gph, TC, MGU

NO⁺ 4 (продукт
гидратации
N₂O⁺)

1977

ХУ-18007

Orth Robert G., Dunbar Robert C.

Photodissociation of nitrous oxide cation.
"J. Chem. Phys.", 1977, 66, N 4, 1616-1620

(англ.)

0855 ПКК

327 832

ВИНИТИ

NO⁺

Ormm, 10504

1977

87: 44462c The 14-electron isoelectronic series. Some ab initio calculations on a series of related molecules. Summers, Neena L.; Tyrrell, James (Dep. Chem. Biochem., South. Illinois Univ., Carbondale, Ill.). *J. Am. Chem. Soc.* 1977, 99(12), 3960-5 (Eng). Ab initio calcs. on a no. of related 14-electron mols. were carried out using a 4-31 G basis set and

Ref. cell
fact

the equil. geometries and the electronic structure of the mols. in these geometries are presented. A primary purpose of this investigation was to detect patterns in the total energies, geometries, and ordering of the MO's for these related isoelectronic systems. Such patterns were obsd. and are discussed and where possible interpreted. In addn., the results of protonation are described and a preliminary result of the study of the potential energy surface for the protonation of NO⁺ is given. The study also provides equil. geometries for a no. of previously uninvestigated mol. species which will hopefully be of assistance to experimentalists interested in detecting and identifying such species.

C. A. 1977. 87 n 6

NO^+ обзор [литт. 5905] 1974
(см. сборник в шкафу Сазунинов)
Sunner J

(7) Reactions of gas-phase ions studied by the charge transfer technique.

Lund, 1974, ● (Sweden)

IX-5506

1977

CH₄⁺, NH₄⁺, OH⁺, AlH₄⁺, AlH₃⁺, SiH₄⁺, FeH⁺,
CoH⁺, C₂⁺, CN⁺, CO⁺, N₂⁺, NO⁺, SiO⁺, FeH
(Kp) cyana. no communication)

Toroidal & P. OM. 27412

J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer
1977, 17(4), 534-42

Partition functions and equilibrium
constants of some positive molecules
C.A. 1977 56, 179-85

ions

NO

NO-

summary 5056 1977

(M.H.)
87: 58781w The nitric oxide monoanion $3\Sigma^-$ and 1Δ resonances: theoretical analysis of electron scattering data. Teillet-Billy, D.; Fiquet-Fayard, F. (Lab. Collisions Electroniques, Univ. Paris-Sud, Orsay, Fr.). *J. Phys. B* 1977, 10(4), L411-L417 (Eng). The model of G. Parlant and F. F. (1976) is used to analyze the data of M. Tronc et al. (1975) for NO vibrational excitation by electron impact and gives internuclear seps. 1.267 and 1.262 Å for the $3\Sigma^-$ and 1Δ resonant states of NO, resp. The term value difference is confirmed to be ≈ 0.75 eV. Autodetachment widths are calcd.

C.A. 1977, 87 w 8

NO-

оттиски 5056

1977

18 Б187. $^3\Sigma^-$ и $^1\Delta$ резонансы NO-: теоретический анализ данных электронного рассеяния. Teillet-Billy D., Fiquet-Fayard F. The NO- $^3\Sigma^-$ and $^1\Delta$ resonances: theoretical analysis of electron scattering data. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1977, 10, № 4. L111—L117 (англ.)

Дан теор. анализ эксперим. данных Тронса и др. (см. РЖХим, 1975, 23Б172) по колебательному возбуждению NO электронным ударом. С учетом резонансного взаимодействия $^1\Delta$ и $^3\Sigma^-$ состояний на основе модели Парланта и др. вычислены след. молек. постоянные NO-: $R''_e(^3\Sigma^-) = 1,267$ А(+0,004, -0,025), $R''_e(^1\Delta) = 1,262$ А(+0,008, -0,022) и $T_e(^1\Delta) - T_e(^3\Sigma^-) = 0,75$ эв. При расчетах ширина резонанса принималась равной $\Gamma(E) = CE^{1,5}(1 + \alpha E)$, где $\alpha = +2,5$ эв $^{-1}$, а $C = 0,07$ эв $^{-0,5}$.

А. М. Шаповалов

(M, n)

2. 1977 N 18

NO. +

Tiedermann P. W. et al ¹⁹⁷⁷

"J. Chem Phys" 1977,
66, N 9, 3985-3987 (corr)

(corr (NO)₂; III)

NO - [Ch. no. 1077 Kechemer, quacert.] 1077

89: 66315a Thermodynamic properties of gas phase molecular ions. Wu, R. L. C.; Lilshitz, C.; Tiernan, T. O. (Dep. Chem., Wright State Univ., Dayton, Ohio). Argonne Natl. Lab., [Rep.] ANL 1977, ANL-77-21, Conf. High Temp. Sci. Open-Cycle, Coal-Fired MHD Syst. 49-53 (Eng). By using translational-energy thresholds for endoergic reactions which cause mol. anion formation, thermochem. properties (bond-dissocn. energies, heats of formation, and electron affinity) of gaseous mol. anions (NO^- , O_2^- , NO_2^- , N_2O^- , CO_3^- , O_3^- , $\text{OH}(\text{H}_2\text{O})^-$) were calcd. The excitation functions for these reactions were obtained by using a tandem mass spectrometer. Three types of reactions were studied: charge transfer, particle transfer, and collision-induced dissocn.

O_2^-
 NO_2^-
 N_2O^-
 CO_3^-
 O_3^-

$\text{OH}(\text{H}_2\text{O})$

(D_0, A_e)
 ΔH_f
 $(+6)$

C.A., 1978, 89, N8

~~$(+7) \Delta H_f$~~

NO⁺

Кривые
потенц.
энергии

1978
6 Д187. Кривые потенциальной энергии и энергия диссоциации молекулы NO⁺. Ramakrishna Rao T. V., Ramakrishna Reddy R. Potential energy curves and dissociation energy of the NO⁺ molecule. «Physica», 1978, BC95, № 3, 412—417 (англ.)

Методом Ридберга — Клейна — Риса (в двух модификациях) с использованием литературных значений вращательных и колебательных констант вычислены ф-ции потенц. энергии для восьми электронных состояний иона NO⁺ в области межъядерных расстояний 0,9—1,7 Å. Из сопоставления найденной эксперим. кривой с соответствующей пятипараметрической потенц. ф-цией Гульбурта — Гиршфельда оценена энергия диссоциации иона NO⁺ в основном состоянии X⁺Σ⁺. Найденное значение 10,78 эв хорошо согласуется с данными других авторов. Определено значение потенциала ионизации NO (9,335 эв). О. В. Сизова

ф. 1979, № 6

NO⁺

Omnica 7151

1978

nomenclature
K. P. B. C.

Do, I

90: 92710r Potential energy curves and dissociation energy of the nitric oxide(-) ion molecule. Rao, T. V. Ramakrishna; Reddy, R. Ramakrishna (Dep. Phys., Post-Grad. Cent., Anantapur, India). *Physica B+C (Amsterdam)* 1978, 95(3), 412-17 (Eng). The potential energy curves of the $X^1\Sigma^+$, $a^3\Sigma^+$, $b^3\Pi$, $W^3\Delta$, $b'^3\Sigma^-$, $A'^1\Sigma^-$, $W^1\Delta$, and $A^1\Pi$ states of the NO⁺ mol. were calcd. by the Lakshman and Rao method (1971) and the W. R. Jarman method (1960). The perturbations between the various states are explained from these studies. The dissocn. energy for the ground state of the NO⁺ mol. was estd. by fitting the Hulburt-Hirschfelder function (1961) to the empirical potential energy curve. The estd. dissocn. energy, 10.78 eV, agrees well with the value 10.86 ± 0.04 eV suggested by A. G. Gaydon (1968). The ionization potential of the NO⁺ mol. is estd. to be 9.34 eV.

$$1\text{eV} = 8065.477 \text{ cm}^{-1}$$



$$D_0 = 10.78 \text{ eV} = 86345.9 \text{ cm}^{-1}$$

$$I_0 = 9.34 \text{ eV} = 75331.6 \text{ cm}^{-1}$$

C. A. 1979. 90 N 12

NO^+

Omura 7239

1978

enclips

Smith D., et al.

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1978, 11,
(23), 4041-47

1978

 NO^- O_2^- NO_2^- N_2O^- CO_3^- (Ae^-)  $(+4)$

8 Б103. Термохимические данные для молекулярных отрицательных ионов из порогов диссоциации при столкновении. Tiernan Thomas O., Wu Richard L. C. Thermochemical data for molecular negative ions from collisional-dissociation thresholds. «Adv. Mass. Spectrom. Vol. 7A. Proc, 7th Int. Mass Spectrom. Conf., Florence, 1976». London, 1978, 136—142 Discuss, 142 (англ.)

С помощью тандемного масс-спектрометра исследованы ион-молек. р-ции типа $\text{AB}^- + \text{X} \rightarrow \text{A}^- + \text{B} + \text{X}$ (1). Из зависимости сечения р-ции (1) от энергии сталкивающихся частиц найдены пороговые значения энергии, позволившие определить энергию отрыва O^- от иона XO_m^- и сродство к электрону молекул XO_m соотв. (эВ): NO^- $5,0 \pm 0,1$ и $0,02 \pm 0,1$, O_2^- $4,1 \pm 0,1$ и $0,44 \pm 0,1$, NO_2^- $4,0 \pm 0,1$ и $2,4 \pm 0,1$, N_2O^- $0,43 \pm 0,1$ и $0,22 \pm 0,1$, CO_3^- $2,0 \pm 0,1$ и $3,1 \pm 0,2$.

В. В. Чепик

X. 1980. N 8

1948

NO⁻O₂NO₂⁻N₂O⁻CO₃⁻

(80)

(+4)



89: 95914a Thermochemical data for molecular negative ions from collisional-dissociation thresholds. Tiernan, Thomas O.; Wu, Richard L. C. (Dep. Chem., Wright State Univ., Dayton, Ohio). *Adv. Mass Spectrom.* 1978, 7A, 136-42 (Eng). The ionic bond dissocn. energies for NO⁻, O₂⁻, NO₂⁻, N₂O⁻, and CO₃⁻ were evaluated from the data for the collisional-dissocn. energy threshold. The electron affinities for the corresponding neutral mols. were calcd. The kinetic-energy thresholds were compared with the predictions of a statistical theory of the dissocn. process; possible dissocn. mechanisms are discussed.

C.A. 1948, 82, N12

NO⁺

оттиски 8857

1979

кривые
потенц.
энергии

4 Д148. Кривые потенциальной энергии для NO⁺.
Potential energy curves for NO⁺. Albritton D. L.,
Schmeltekopf A. L., Zare R. N. «J. Chem. Phys.»,
1979, 71, № 8, 3271—3279 (англ.)

Методом Ридберга-Клейна-Риса построены кривые
потенц. энергии для восьми низших электронных состо-
яний NO⁺. В качестве исходных данных использованы
колебат. энергии и вращательные постоянные, получен-
ные из фотоэлектронных спектров высокого разреше-
ния, опубликованных за последние годы. Для ряда бо-
лее высоколежащих состояний вплоть до 24 эв сделаны
менее точные оценки, основанные на результатах не-
эмпирич. расчетов и аналогиях с изоэлектронными мо-
лекулами N₂ и CO.

В. И. Барановский

ф. 1980 № 4

NO⁺

Оттиски 8857

1979

7 Б125. Кривые потенциальной энергии для NO⁺.
Albritton D. L., Schmeltekopf A. L., Zare R. N. Potential energy curves for NO⁺. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 8, 3271—3279 (англ.)

потенц.
кривые
(E_i)

На основании новых результатов фотоэлектронной спектроскопии и эмпирич. расчетов в рамках модели Ридберга—Клейна—Риса исследованы потенциальные кривые электронных состояний иона NO⁺ с энергиями < 24 эВ. Потенциальные кривые первых восьми состояний (относительно основного состояния иона) построены с использованием молек. постоянных, определенных для этих состояний экспериментально. Потенциальные кривые вышележащих состояний строили на основании теор. расчетов и исходя из известных потенциальных кривых изоэлектронных аналогов NO⁺. Для каждого из состояний приведены краткий обзор и анализ эксперим. и теор. информации, на основании которой построены потенциальные кривые. Библ. 69. И. А. Тополь

Х. 1980 № 4

NO⁺

no notes.
gs-1545

91: 219483x Potential energy curves for nitrosyl ion.
Albritton, D. L.; Schmeltekopf, A. L.; Zare, R. N. (Environ.
Res. Lab., NOAA, Boulder, CO 80303 USA). *J. Chem. Phys.*
1979, 71(8), 3271-9 (Eng). In recent years, high-resoln.
photoelectron spectroscopy and ab initio calcs. have considerably
revised and enlarged the understanding of the electronic
structure of the NO⁺ ion. Based on these results, new potential
energy curves for the electronic states of NO⁺ below 24 eV have
been constructed and are given here. RKR potentials were calcd.
from new mol. consta. for the 8 exptl. well-defined states. For
the other states, the main features of the potentials were estd.
from theor. calcs. and from isoelectronic analogies. A brief
review is given of the information on which each potential curve
is based.

C.A. 1979, 91, N26

NO^+

1979

Eland y. H.D.

J. Chem. Phys., 1979, 70(6),
2926-33.

success.



(ver. I_2^+ ; III)

NO^+

Commun 8886

1979

Griffiths J. E., et al

Gamma
crystp

NOAuF_6

Spectrochim. acta, 1979,

A35, 1329-31.

NO⁺

NO

фотометр,
спектр

(+1) $\square$

2-1980. N4

Оштинен 8132

1979

4 Б109. Угловое распределение валентных фото-
электронных спектров NO. Kibel M. H., Ny-
berg G. L. Angular distribution valence photoelectron
spectra of nitric oxide. «J. Electron Spectrosc. and Relat.
Phenom.», 1979, 17, № 1, 1—13 (англ.)

На спектрометре, использующем анализатор с за-
держивающим потенциалом, при различных углах из-
мерены фотоэлектронные спектры NO с возбуждением
источниками He-I (584Å), Ne-I (736 и 744Å), Ar-I
(1048 и 1067Å) и определены параметры асимметрии
углового распределения фотоэлектронов (β) для пере-
ходов на отдельные колебательные уровни электрон-
ных состояний $X^1\Sigma^+$, $a^3\Sigma^+$, $b^3\Pi$, $w^3\Delta$, $A^1\Pi$, $W^1\Delta$ иона
NO⁺. При нахождении β учитывалась поправка на
изотропное рассеяние электронов («J. Electron Spect-
rosc. Relat. Phenom.», 1979, 15, 281). Во всех случаях
обнаружена сильная зависимость β от колебательного
квантового числа v' конечного состояния. Для первой

полосы $X^1\Sigma^+$ при возбуждении Ne-I и Ne-I относит. интенсивности колебательной структуры ($v'=0-4$) хорошо согласуются с вычисленными франк-кондоновскими факторами (ФКФ) для прямой ионизации. Анализ лит. данных показал, что результаты, полученные с использованием анализаторов дисперсионного типа, хуже согласуются с ФКФ. При возбуждении Ag-I для полос $X^1\Sigma^+$ наблюдается колебательная структура вплоть до $v'=9$, а относит. интенсивности отличаются от ФКФ. Сделан вывод, что в этом случае (особенно при возбуждении с длиной волны 1048А) автоионизация вносит существенный вклад и становится определяющим механизмом при больших v' . Показано также наличие автоионизац. процесса для $a^3\Sigma^+$ полосы при возбуждении Ne-I. Подробно обсуждается возможность интерпретации сильной зависимости β от v' для тех случаев, когда вкладом автоионизации можно пренебречь.

М. Гофман

NO⁺

smmcc 8752

11-11

M. N.

92: 31605e Ionization energy values for the transitions nitric oxide(+1) ion, $X^1\Sigma^+(v' = 0-34) \leftarrow$ nitric oxide, $X^2\Pi(v'' = 0)$ and molecular constants of nitric oxide ground ionic state, determined by neon(Ne I) (73.6nm) photoelectron spectroscopy. Natalis, P.; Collin, J. E.; Delwiche, J.; Caprace, G.; Hubin, M. J. (Inst. Chim., Univ. Liege, B-4000 Liege, Belg.). *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 1979, 17(6), 421-3 (Eng). High resolu. Ne(I) (73.6 nm) photoelectron spectroscopic measurements provide values of the ionization energies to the 1st 35 vibrational levels of NO⁺, $X^1\Sigma^+$. From these data mol. consts. were derived for the NO ground ionic state.

C.A. 1980. 92, N4

NO⁺

оттис 8752 1979

7 B124. Значения энергий ионизации для переходов NO⁺, X¹Σ⁺(v'=0-34) ← NO, X²Π(v''=0) и молекулярные константы окиси азота в основном ионном состоянии, определенные методом Ne(I) (73,6 нм) фотоэлектронной спектроскопии. Natalis P., Collin J. E., Delwiche J., Caprace G., Hubin M.-J. Ionization energy values for the transitions NO⁺, X¹Σ⁺(v'=0-34) ← NO, X²Π(v''=0) and molecular constants of nitric oxide ground ionic state, determined by Ne(I) (73.6 nm) photoelectron spectroscopy. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1979, 17, № 6, 421-429 (англ.)

При использовании в качестве источника для возбуждения резонансной линии 73,6 нм Ne (I) разрешены линии фотоэлектронного спектра в области энергий 9—

М.Н., У.
(Do; E_i)

Х. 1980 N 7

17 эВ, обусловленные колебательным возбуждением
 NO^+ ($X^1\Sigma^+(v'=0-34)$) при фотовозбуждении NO ,
 $X^2\Pi (v=0)$. Точность определения энергий ионизации
 составляет $\pm 0,003$ эВ ($v'=0-27$) и $\pm 0,01$ ($v=28-34$), энергия ионизации при переходе на основной $v'=0$
 колебательный уровень NO^+ составляет 9,264 эВ, на
 $v'=34$ уровень — 16,80 эВ. Основная частота колебаний
 NO^+ , $X^1\Sigma-\omega=2370\pm 16$ см $^{-1}$, константа ангармонично-
 сти $\omega\cdot x=16,6\pm 0,6$ см $^{-1}$, рассчитанная энергия диссо-
 циации 84 700, энергия диссоциации оценена в
 83 600 см $^{-1}$.

В. И. Лесник

1980

NO⁺

зус к.

волеетр.
жирный еж.
(7)

Theor. chim. acta, 1980,
57, n2, 107-30



NO^-

1980

King G.C. et al.

(резонансы)
ионов, Ei

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1980, 13, N21,
4315-4323.

● (сер. N_2^- ; III).

NO⁺

8 Б158. Колебательная структура NO⁺X¹Σ⁺, измеренная методом масс-спектрометрии с обменом зарядами. Tedder J. M., Vidaud P. H. The vibrational structure of NO⁺(X¹Σ⁺) from charge-exchange mass spectrometry. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 76, № 2, 380—382 (англ.)

Колебат.
структ.

Масс-спектрометрическим методом измерены сечения обмена зарядами для реакций типа X⁺+NO→NO⁺+X в газовой фазе. Исследованы р-ции 33 ионов X с потенциалами ионизации, изменяющимися в пределах 9,12—10,87 эВ и кинетич. энергией 10 эВ с молекулами NO. Изучена зависимость абс. сечений обмена зарядами от энергии рекомбинации положит. ион-электрон. Отмечено, что полученная кривая сходна с измеренными ранее фотоэлектронными спектрами NO. Максимумы в области 9,26; 9,58; 9,82; 10,15 и 10,4 эВ отнесены к колебательным уровням v=0, 1, 2, 3 и 4 соотв. иона NO⁺ в основном состоянии X¹Σ⁺. Интенсивности пиков качественно согласуются с факторами Франка—Кондона, рассчитанными для NO⁺. Заключено, что использование подходящих перв. ионов с точно известными потенциалами ионизации позволяет методом заряд-обменной масс-спектрометрии получать информацию о колебательной структуре втор. ионов.

Х. 1981 № 8

С. Б. Осин

1980

отпуск 106.57

NO⁺

OTUCK 10651 1980

Нолдэм.
уроси

94: 90742m The vibrational structure of nitric oxide(1+) ion ($X^1\Sigma^+$) from charge-exchange mass spectrometry. Tedder, J. M.; Vidaud, P. H. (Dep. Chem., Univ. St. Andrews, Fife, Engl. KY16 9ST). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 76(2), 380-2 (Eng). Charge-exchange mass spectrometry was used to detect the 1st 5 vibrational levels of the electronic ground-state ion NO⁺ ($X^1\Sigma^+$). The abs. charge-exchange cross sections between thermal NO gas and 33 pos. ions of 10 eV kinetic energy are given.

C.A. 1981.94 N/2

NO⁺

оттиск 13406

1981

4 Д642. Лазерная фотофрагментарная спектроскопия NO⁺. Ч. I. Преддиссоциация состояния 2³Π. Laser photofragment spectroscopy of NO⁺. I. Predissociation of the 2³Π state. Cosby P. C., Helm H. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 8, 3882—3893 (англ.)

Показано, что ионы NO⁺, образующиеся при электронном ударе NO, под действием излучения перестраиваемого лазера (6600—5650 Å) преддиссоциируют с образованием O⁺(⁴S⁰) и N(⁴S⁰). Спектральная зависимость эффективности образования O⁺(⁴S) сильно структурна. Идентифицированы переходы с трех колебательных уровней долгоживущего электронного состояния NO⁺ на 20 колебательных уровней преддиссоциирующего состояния. Предположительное отнесение переходов есть 2³Π(v=0—19) ← b'³Σ⁻(v''=8—10). Слабосвязанное состояние 2³Π расположено на 0,698—0,925 эВ выше

преддиссо-
циация
состояние
2³Π.

ф. 1982, 18, №4.

низшего диссоциационного предела для NO^+ и адиабатически коррелирует с $\text{N}^+(^3P) + \text{O}(^3P)$. Преддиссоциационное время жизни для всех вращательных уровней состояний $v'=0-8$ больше 1,6 нсек. Обсуждены также возмущения состояния $b^{13}\Sigma$, $v=9$. Библ. 42. В. С. Иванов

NO^+

Commuca 11506

1981

Laurenzi B. J.

pages
(20)

J. Chem. Phys., 1981, 74 (3)
1840-51 .

NO^+

[omura 12805] 1981.

Linn S.H., et al.

(ϕ_2)

J. Chem. Phys., 1981, 74

(6), 3342 - 3347

NO^+

[Ommuck 12924]

1981

Niwa Y., et al.,

A.P.

Int. J. Mass. Spectrom.
and Ion. Phys., 1981, 40,
287-93.

NO^+

1981

Rao T. V., et al.

Ссс. ноее. Acta Chim. Acad

и. н. Sci Hung 1981, 108,
(1), 25-30.

(сс. MgO; iii)

NO⁺

[Оммуек 18048] 1981

Ramakrishna R. T. V.,
et al.

суд. мед.,
кармелиты
Лемарда
Джонса.

Acta chim. Acad. Sci.
Hung., 1981, 108, N1, 25-30.



NO^+

1982

5 Д489. Спектры комбинационного рассеяния NO^+ , NO_3^- и N_2O_4 , изолированных в матрице Ne. Raman spectroscopy on matrix-isolated NO^+ , NO_3^- and N_2O_4 in Ne. Bolduan F., Jodl H. J. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 85, № 3, 283—286 (англ.)

спектр
в
матрице

17
(+2)

При 9 К с помощью Ar^+ -лазера исследованы спектры комб. рас. в области $200\text{--}2000\text{ см}^{-1}$ тонких пленок (40 мкм), полученных осаждением смеси Ne и NO_2 (конц-ия NO_2 3—5 мол.%) на охлаждаемую подложку из полированной меди. В условиях, использованных при осаждении, газ NO_2 содержит в основном мономерные молекулы, а доля димерных молекул N_2O_4 невелика. Анализ спектров комб. рас. пленок показывает, что в процессе осаждения основная часть NO_2 димеризуется, причем в спектрах отчетливо проявляется существование двух конформаций N_2O_4 . Установлено, что отжиг пленок при 50 К приводит к существенному изменению

ф. 1982, 18, №5.

спектров комб. рас. и появлению новых линий. Эти новые линии отнесены к колебаниям ионов NO^+ и NO^- , образующихся при диссоциации молекул N_2O_4 . Отмечено, что при изоляции NO_2 в низкотемпературных матрицах Ag, Kг или Хе димеризация не происходит. Высказано предположение, что димеризация NO_2 при осаждении, а также диссоциация молекул N_2O_4 при сжиге, могут быть объяснены при учете конкретной структуры и размеров межатомных полостей, возникающих в матрицах твердого Ne. Библ. 16. Э. М. Казакова

NO^+

1989.

NO

Ghodgaonkar A. S.,
Ramani K.

Pracem
Do;

Acta phys. pol., 1982,
A 61, N 1-2, 151-154.

(see O_2^+ ; III)

NO⁺

Оттиск 14223 1982

11 Д224. Исследование диссоциативной ионизации окиси азота электронным ударом. Диссоциативные каналы с образованием NO⁺ и N₂⁺. A dissociative electron-ionization study of nitrous oxide. The NO⁺ and N₂⁺ dissociation channels. Olivier J. L., Loch R., Momin J. «Chem. Phys.», 1982, 68, № 1—2, 201—211 (англ.)

Жерни
появления



Методом электронного удара с анализом кинетич. энергии и масс-спектрометрич. анализом продуктов исследован распад молекул N₂O на ионы NO⁺ и N₂⁺. Измерялись энергии появления обоих ионов как ф-ции кинетич. энергии продуктов. Найдено, что в обоих каналах распад происходит путем преддиссоциации различных электронных состояний иона N₂O⁺, образующегося в результате электронного удара. В первом канале существует только один диссоциативный предел, соответствующий образованию NO⁺ и N в основных электронных состояниях, коррелирующих с ⁴Σ-состоянием ис-

ор. 1982, 18, N 11

ходного иона. Образующиеся NO^+ -ионы находятся преимущественно в высоко возбужденных колебательных состояниях. В канале распада на $\text{N}_2^+ + \text{O}$ наблюдается несколько диссоциативных пределов, и доминирующей в механизме распада является преддиссоциация возбужденных $A^2\Sigma^+$ -, $B^2\Pi$ -, $C^2\Sigma^+$ -состояний N_2O^+ и автоионизационных состояний N_2O . Для $C^2\Sigma^+$ -состояния наблюдается два канала распада. При электронных энергиях $> 21,2$ эВ дважды возбужденные электронные конфигурации N_2O^+ играют важную роль в механизме распада.

А. А. Зембеков



NO^+

(Ommuck 13917) 1982
Singh P. D., et al.

J. Quant. Spectrosc.

Radiat Transfer
1982, 27(4), 471-479.

факторы
Франко-
Котелова.

●
(см. OH^+ ; III)

NO⁺

Om.

15463
15589

1982

3 Д475. Спектр иона NO⁺ в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах. Millimeter and submillimeter spectrum of NO⁺. Bowman Wayne C., Herbst Eric, De Lucia Frank C. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 8, 4261—4262 (англ.)

Получен микроволн. спектр иона NO⁺, образованного в рязряде через смесь NO с аргоном. Идентифицирована сверхтонкая структура линий вращательных переходов с $J=1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$ вблизи 238 и 357 ГГц, соответственно, основного электронно-колебательного состояния. Определены значения вращательной постоянной ($B_0=59597,132$ МГц), центробежной постоянной ($D_0=0,171$ МГц) и постоянной квадрупольной связи ядра азота ($eqQ=-6,76$ МГц).

М. Р. Алиев

М.П;

ор. 1983, 18, № 3

NO⁺

Om. 15463
15589

1982

6 Б148. Миллиметровый и субмиллиметровый спектр NO⁺. Millimeter and submillimeter spectrum of NO⁺. Bowman Wayne C., Herbst Eric, De Lucia Frank C. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 8, 4261—4262 (англ.)

Измерены чисто вращательные переходы $I=1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$ NO⁺ в МВ и субмиллиметровой области. Ионы NO⁺ получали при пропускании смеси NO/Ag (в отношении 5:1) $p_{\text{общ.}} \sim$ неск. мм) через высоковольтную проточную разрядную ячейку. Получены значения (в МГц) след. молек. параметров NO⁺: $B_0 = 59597,132$, $D_c = 0,171$, $e q Q = -6,76$. В. М. Ковба

м.п.;

Х. 1983, 19, 116

NO^+

Ommuck 15463

1982

Ommuck 15529

' 97: 190610x Millimeter and submillimeter spectrum of nitric oxide (NO^+). Bowman, Wayne C.; Herbst, Eric; De Lucia, Frank C. (Dep. Phys., Duke Univ., Durham, NC 27706 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(8), 4261-2 (Eng). The pure rotational absorption spectrum of NO^+ was obtained by mm and submm microwave spectroscopy. A tracing of the $J = 1 \rightarrow 2$ transitions of NO^+ at 238,381-238,386 MHz clearly shows the quadrupole structure due to the N nucleus. A surprisingly small Doppler shift of 20 kHz was measured. The spectral consts. B_0 , D_0 , and eQq were obtained as 59,597.132(16), 0.171(1), and -6.76(10) MHz, resp.

48 cnekmp

C. A. 1982, 97, v22

NO⁺

1983

3 Д87 ДЕП. Расчет факторов Франка—Кондона и колебательных энергий для некоторых электронных состояний иона NO⁺. Блинкова В. Г., Попова Т. Н.; Ред. ж. «Изв. вузов. Физ.». Томск, 1983. 22 с. Библиогр. 3 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 13 дек. 1983 г., № 6738—83 Деп.)

Рассчитаны колебательные энергии до предела диссоциации для восьми электронных состояний иона NO⁺:

$X^1\Sigma^+$, $a^3\Sigma^+$, $b^3\Pi$, $W^3\Delta$, $b^1\Sigma$, $A^1\Sigma^-$, $W^1\Delta$, $A^1\pi$

*E, вероятность
перехода*

и факторы Франка—Кондона для переходов с этих уровней в основное состояние $X^1\Sigma^+$. Для описания электронных состояний использовались полуэмпирические трехпараметрич. ф-ции потенц. энергии, выбранные разработанным авторами методом. Расчет проводился на ЭВМ БЭСМ-4 по составленной авторами программе.

Автореферат

сб. 1984, 18, №3

NO⁺

1983

10 Д550. Измерение распределения по кинетическим энергиям фотофрагментов, образующихся при лазерной фотопреддиссоциации ионов N_2O^+ . Measurement of the fragment kinetic energy distribution in laser photopredissociation of N_2O^+ . Lerme J., Abed S., Holt R. A., Larzilliere M., Carre M. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 96, № 4, 403—406 (англ.)

фотодиссоц.

С использованием электростатич. энергоанализатора и установки, предназначенной для лазерной спектроскопии быстрых ионных пучков, получено распределение по кинетич. энергиям осколков NO^+ , образующихся в процессе преддиссоциации ионов N_2O^+ ($\tilde{A}$). Селективное возбуждение ионов N_2O^+ ($\tilde{A}$) в различные колебательно-вращательные состояния осуществляется с помощью Kr^+ -лазера. Установлено, что преобладающее большинство фотофрагментов NO^+ образуется в состоянии $V=4$ при распаде первичного иона в состояниях $\tilde{A}^2\Sigma^+(100)$ и $\tilde{A}^2\Pi(b)$ (110). Библ. 24. М. Т.

фр. 1983, 18, N10

NO⁺

[Om. 16190]

1982

/ 12 Б23. Неэмпирические расчеты вероятностей излучательных переходов в основном состоянии $X^1\Sigma^+$ иона NO^+ . Ab initio calculations of radiative transition probabilities in the $X^1\Sigma^+$ ground state of the NO^+ ion. Werner Hans-Joachim, Rosmus Pavel. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 96, № 2, 362—367 (англ.)

М.П.

Многоконфигурационным методом ССП (МК ССП) рассчитана потенциальная кривая и дипольный момент основного состояния $X^1\Sigma^+$ иона NO^+ при 19 значениях межъядерного расстояния R от 1,2 до 10 ат. ед. Вычисл. значения спектроскопич. постоянных (в скобках эксперим. значения) составили: $R_e=1,061$ (1,063) А, $B_e=2,005$ (1,997) см^{-1} , $\alpha_e=0,018$ (0,0188) см^{-1} , $\omega_e=2415$ (2376,7) см^{-1} , $\omega_e x_e=16$ (16,25) см^{-1} , $D_0=10,17$ (10,85) эВ. С учетом рассчитанных потенциальной кривой и R -зависимости дипольного момента вычислены матричные элементы дипольных переходов между колебательными состояниями с $\Delta v=0, 1, 2, 3$ до $v=25$.

Х. 1983, 19, N 12

Эти величины использованы далее для расчета коэф. Эйнштейна спонтанного излучения. Вычисл. значения радиац. времен жизни NO^+ изменяются от 91 мс для $\nu=1$ до 6,8 мс для $\nu=25$. В результате сопоставления теор. и эксперим. коэф. Эйнштейна $A_{\nu}^{\nu+1}$ с учетом того, что точность вычисления теор. величин $A_{\nu}^{\nu+1}$ составляет $\sim 20\%$, сделан вывод о завышении эксперим. величин $A_{\nu}^{\nu+1}$ для $\nu=1, 2$.

И. А. Тополь

NO⁺

[Om. 16190]

1982

7 Д450. Расчеты ab initio вероятностей радиационных переходов в основном состоянии $X^1\Sigma^+$ иона NO⁺. Ab initio calculations of radiative transition probabilities in the $X^1\Sigma^+$ ground state of the NO⁺ ion. Werner Hans-Joachim, Rosmus Pavel. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 96, № 2, 362—367 (англ.)

Выполнены многоконфигурационные ССП расчеты волн. ф-ций и зависимостей потенц. энергии и дипольного момента от межъядерного расстояния для основного состояния иона NO⁺ и определены колебательные дипольные матричные элементы и коэф. Эйнштейна для спонтанных излучательных переходов с $\Delta v = 0-3$ и $v' = 0-25$. Библ. 19. А. В. Н.

М.Н;

9. 1983, 18, № 4

NO⁺

1982

' 97: 63645n Observation of Rydberg($C^2\Pi$)-valence($B^2\Pi$) interactions in nitric oxide by multiphoton photoelectron spectroscopy. White, Michael G.; Seaver, Mark; Chupka, William A.; Colson, Steven D. (Dep. Chem., Brookhaven Natl. Lab., Upton, NY 11973 USA). *Phys. Rev. Lett.* 1982, 49(1), 28-31 (Eng). Photoelectron spectra for the 3-photon resonant, 5-photon ionization of NO via the $v'' = 0$ level of the $C^2\Pi(3p\pi)$ Rydberg state show that $NO^+ (X^1\Sigma^+)$ is formed primarily in $v' = 0$ and $v' \geq 3$. The relative populations of the $v' = 0$ to $v' \geq 3$ levels are strongly dependent on the excited rotational level of the C state. These data are consistent with known perturbations between the nearly degenerate $C^2\Pi, v'' = 0$ Rydberg and $B^2\Pi, v = 7$ valence levels.

Рожнышев.

C. A. 1982, 97, 118.

NO^+

1983

/ 102: 14190y Calculation of Franck-Condon factors and vibrational energies for some electron states of a nitrosyl ion. Blinkova, V. G.; Popova, T. N. (USSR). Deposited Doc. 1983, VINITI 6738-83, 23 pp. (Russ). Avail. VINITI. The vibrational energy levels up to dissociation limit were calculated for $X^1\Sigma^+$, $a^3\Sigma^+$, $b^3\Pi$, $W^3\Delta$, $b'^3\Sigma$, $A^1\Sigma^-$, $W^1\Delta$, and $A^1\Pi$ states of NO^+ . The Franck-Condon factors were calculated for transitions from 7 excited states to $X^1\Sigma^+$.

факторы
Франка-Кондона

C. A. 1985, 102, №2.

$N^+ + O$

1983

4 Б1150. Трансляционная спектроскопия фрагментов N^+ и O^+ столкновительно-индуцированной диссоциации ионов NO^+ при 5 кэВ гелием. Translational spectroscopy of N^+ and O^+ fragments from 5 keV collision-induced dissociation of NO^+ ions by helium. Comtet G., Fournier P. G. «Chem. Phys.», 1983, 81, № 1—2, 221—223 (англ.)

Представлены результаты эксперимента по исследованию распределения кинетич. энергии фрагментов N^+ и O^+ , возникающих при столкновительно-индуцированной диссоциации ионов NO^+ с энергией 5 кэВ атомами гелия. Показано, что относит. кинетич. энергия $O^+ + N$ распределена в диапазоне от 0 до 18 эВ и столкновительно-индуцированный переход до уровня состояния преддиссоциации имеет время от 40 до 140 нс. Энергия $N^+ + O$ распределена в диапазоне от 0 до 11 эВ и включает в себя переходы к пяти преддиссоц. состояниям, три из к-рых с энергиями $29 \pm 0,2$, $34 \pm 0,3$, $34,5 \pm 0,3$ эВ относятся к основному состоянию NO .

А. Т. Суходольский

$E, \text{эВ};$

X. 1984, 19, n 4

NO⁺

1983

100: 42344d Molecular multiphoton-ionization-resonance-
spectroscopy of nitric oxide. Mueller-Dethlefs, K.; Frey, R.
(Inst. Phys. Chem., TU Muenchen, D-8046 Garching, Fed. Rep.
Ger.). *Springer Ser. Opt. Sci.* 1983, 40(Laser Spectrosc. 6), 367-8
(Eng). The mol. multiphoton ionization resonance spectra of NO
show 2 ionization thresholds from the $X^2\Pi_{1/2}$ and $^2\Pi_{3/2}$ states into
the $X^1\Sigma^+$ ($v = 0$) state of the NO⁺ ion. The rotational structure in
the spectra can partly be interpreted as rotational lines of the X
state of NO⁺. Addnl. lines from $C^2\Pi$ ($v = 2$) NO and autoionizing
states are obsd. also.

(cnekmp)

C.A. 1984, 100, N 6

NO⁺
NO²⁺

1983

9 Б1071. Спектроскопия кинетических энергий NO⁺ и NO²⁺. Translational-energy spectroscopy of NO⁺ and NO²⁺. O'Keefe A., Illies A. J., Gilbert J. R., Bowers M. T. «Chem. Phys.», 1983, 82, № 3, 471—478 (англ.)

С высоким разрешением $\approx 0,1$ эВ измерены распределения кинетич. энергий ионов NO⁺ и NO²⁺, имеющих первоначальную энергию 8 кэВ, после рассеяния на малый угол атомами He. Ионы NO⁺ и NO²⁺ получали ионизацией NO электронным ударом при энергии 80—100 эВ. На основе лит. фотоэлектронных данных и результатов расчетов потенциальных кривых для различных состояний NO⁺ в измеренных спектрах кинетич. энергий NO⁺ идентифицированы линии, соотв-щие возбуждению не только перехода из основного состояния $X^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$, но и переходов между возбужденными триплетными состояниями: $b^3\Pi \leftrightarrow w^3\Delta$, $b^3\Pi \leftrightarrow b'^3\Sigma^-$, $a^3\Sigma^+ \leftrightarrow b'^3\Sigma^-$. По оценке времени жизни последних составляют более 10 мкс. В спектрах ионов NO²⁺ обнаружены только два пика, отнесенные к возбуждению из основ-

У, спектр

(X¹Π)

X. 1984, 19, 49

NO²⁺

ного состояния $X^3\Sigma^+$ в состояния $A^2\Pi$ и $B^2\Sigma^+$.
О. А. Басченко



NO^+
 NO^{2+}

1983

5 D227. Исследования методом спектроскопии трансляционной энергии NO^+ и NO^{2+} . Translational-energy spectroscopy of NO^+ and NO^{2+} . O'Keefe Anthony, Illies Andreas J., Gilbert James R., Bowers Michael T. «Chem. Phys.», 1983, 82, № 3, 471—478 (англ.)

Методом спектроскопии трансляционной энергии исследованы ионы NO^+ и NO^{2+} . В этом методе пучок селективированных по массе моноэнергетич. ионов испытывает столкновения с отклонением на малые углы с нейтральными частицами. Эти столкновения приводят к переходам между уровнями энергии иона или молекулы и, как следствие этого, к дискретным изменениям трансляционной энергии пучка ионов. При условии большой энергии пучка измеряемое изменение кинетич. энергии оказывается практически равным энергии индуцированного столкновением перехода в ионе

Σ_i

ср. 1984, 18, № 5

(или в нейтральной частице). В измеренном спектре NO^+ обнаружено 7 переходов, из которых один отнесен переходу $X^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$, а остальные — переходам среди возбужденных триплетных состояний, имеющих достаточно большое время жизни. Спектр NO^{2+} свидетельствует о существовании двух связанных возбужденных электронных состояний $B^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi$.

А. А. Зембеков



NO⁺

1983

Ramani K., Ghodgaonkar A. M.

u. n. J. Quant. Spectrosc. and
Radiat. Transfer, 1983,
29, N4, 379-380.
(em. Cu H; III)

NO⁺

[ommuck 16598]

1983

Ramari K. Ghodgaonkar
A.M.,

u.n.,
pacer

J. Chem. Phys., 1983,
78, N5, 2374-2380.

NO⁺

(Am. 16756)

1983

99: i2960v [The] *r*-centroids and Franck-Condon factors for the b'-X and b'-b band systems of the nitric oxide (NO⁺) molecule. Reddy, R. R.; Rao, T. V. R. (Coll. Eng., KSRM, Cuddapah, 516 001 India). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1983, 29(6), 563-4 (Eng). The *r*-centroids and Franck-Condon factors for bands of the b'-X and b'-b systems of NO⁺ were evaluated by using an approx. anal. method. The appearance of some of the bands is discussed in terms of Franck-Condon factors.

Paknopt
P.L.

C.A. 1983, 89, N2

NO⁺

От. 16756

1983

12 Д63. Факторы Франка — Кондона и r -центроиды для систем полос $b'-X$ и $b'-b$ молекулы NO⁺. r -Centroids and Franck—Condon factors for the $b'-X$ and $b'-b$ band systems of the NO⁺ molecule. Reddy R. R., Rao T. V. R. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1983, 29, № 6, 563—564 (англ.)

Аналитическим методом и методом квадратных ур-ний (Nicholls R. W. et al. 1956, A69, 253), рассчитаны r -центроиды и факторы Франка — Кондона для систем полос $b'-X$ и $b'-b$ NO⁺. Проведены качеств. оценки появления в спектре некоторых линий.

факторы
Франка — Кон-
дона

ф. 1983, 18, N12

NO⁺

1983

Rosmus P.

спектр,
гиповоль-
талия
молемей

Bull. Soc. chim. Belg., 1983,
92, 16-7: 16th Int. Symp.
Free Radicals. Lauzelle-
Ottignies, Sept. 12-16, 1983,
603-604.

(see. ArH⁺; III)

NO⁺

1983

6 Д672. ИК-хемилюминесценция колебательно-возбужденных ионов NO⁺. Выход продуктов в ионно-молекулярной реакции N⁺+O₂. Infrared chemiluminescence from vibrationally excited NO⁺. Product branching in the N⁺+O₂ ion-molecule reaction. Smith Mark A., Bierbaum Veronica M., Leone Stephen R. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 94, № 4, 398—403 (англ.)

Исследована ИК-хемилюминесценция в реакции N⁺(³P)+O₂(X²Σ_g⁻). Определены коэф. ветвления реакции и распределение продуктов по колебат. уровням. Для NO⁺(X³Σ_g⁻, v=1—14) обнаружено бимодальное колебательное распределение, что указывает на возможность образования атомов O в нескольких электронных состояниях (O(³P), O(¹D), O(¹S)). Установлено, что в результате реакции переноса заряда образуются возбужденные атомы N(²D), которые вступают затем в реакцию с молекулами O₂ с образованием NO(X²Π, v=1—12). Библ. 27. В. А. Е.

спектр

Ф. 1983, 18, № 6

NO²⁺

(OM 20234)

1984

Curtis J. M., Boyd R.K.

предсказуем.
происел

J. Chem. Phys., 1984,

81, (7), 2991-3001.

NO⁺

Om 20471

1984

7 Б1170. Двухцветная фотоионизационная резонансная спектроскопия NO; полное разделение вращательных уровней NO⁺ на пороге ионизации. Two-colour photoionization resonance spectroscopy of NO: complete separation of rotational levels of NO⁺ at the ionization threshold. Müller-Dethlefs K., Sander M., Schlag E. W. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 112, № 4, 291—294 (англ.)

спектр

При помощи двух импульсных лазеров с перестраиваемой частотой измерен спектр пороговых фотоэлектронов, образованных при резонансной четырехфотонной ионизации сверхзвукового пучка молекул NO. Регистрация спектра проводилась методом, разработанным авторами ранее (см. пред. реф.). Разрешение спектра составило ~0,15 мэВ. Частота излучения одного из лазеров (с мощностью $\omega = 1,5$ мДж) настроена на трехфотонное резонансное возбуждение перехода в промежуточное состояние NO $C^2\Pi_r [v=0, T_v(1/2)] \leftarrow X^2\Pi_r [v=0, F_1(3/2)]$, а частота другого ($\omega = 50$ мкДж) ска-

⑦ R

x. 1985, 19, № 7

NO (ал. н., vi)

нировалась в диапазоне $22\,335\text{--}22\,375\text{ см}^{-1}$. В спектре идентифицированы хорошо разрешенные линии, соотв. переходам из состояния $\text{NO } C^2\Pi_r$ на вращательные уровни иона $\text{NO}^+ {}^1\Sigma^+(v^+=0, J^+=0, 1, 2, 3)$. С помощью полученных данных о низших вращательных уровнях NO^+ удалось непосредственно определить с высокой точностью потенциал ионизации молекулы NO : $74717,2 \pm 0,1\text{ см}^{-1}$. О. А. Басченко



NO⁺

1984

Müller-Dethlefs K.,
Frey R., et al.

checkmp,
61;
Vae. UV violet Radiat.
Phys., VUV VII. Proc. 7 Int.
Conf., Jerusalem, Aug. 8-12,
1983. Vol. 6. Bristol; Jerusa-
lem, 1984, 449-457.
(check. NO; III)

NO⁺

1984

7 Б1084. Кривые потенциальной энергии. Простой и быстрый метод построения. Potential energy curves: a simple and rapid method. Reddy R. R., Reddy A. S. R., Rao T. V. R. «J. Mol. Struct.», 1984, 110, № 3—4, Suppl.: «Theochem», 19, № 3—4, 321—325 (англ.)

Предложена модификация метода Ярмейна («Can. J. Phys.», 1960, 38, 217) для оценки классич. поворотных точек ($r_{1,2}$) потенциальных кривых двухатомных молекул по спектроскопич. постоянным, согласно к-рому $r_{1,2}(\text{прибл.}) = r_e [1 \pm x(2x+1)]$, где $x = f(\omega_e, \omega_e x_e, B_e, \alpha_e, v)$. Введены два параметра C_1 и C_2 , являющиеся функциями тех же спектроскопич. постоянных; при этом выражения для поворотных точек принимают вид $r_{\text{макс}} = r(\text{прибл.}) + C_1(v+1/2)$, $r_{\text{мин}} = r(\text{прибл.}) + C_2(v+1/2)$. Приведены аналитич. выражения для x , C_1 и C_2 и рассмотрены методы нахождения поправочных параметров C_1 и C_2 . Модификация метода проверена на потенциальных кривых молекул NO⁺, VO, Si₂, AsO, AsO⁺, PF⁺, CO и Bi₂ в основных электронных состояниях. Результаты хорошо согласуются с данными, полученными методами Ярмейна, РКРВ, Лакшмана и Рао.
В. М. Ковба

расчет по-
теплов. кривой

(77)

х. 1985, 19, № 7

NO^+

1984

102: 51169u Potential energy curves: a simple and rapid method. Reddy, R. R.; Reddy, A. S. R.; Rao, T. V. R. (Dep. Phys., K.S.R.M. Coll. Eng., Cuddapah, 516001 India). *THEOCHEM* 1984, 19(3-4), 321-5 (Eng). The true potential energy curves for different electronic states of diat. mols. are constructed by a simplified and modified form of the Jarman method. To check the validity of this new procedure, potential energy curves are constructed for NO^+ , VO , Si_2 , AsO , AsO^+ , PF^+ , CO and Bi_2 . The results are in good agreement with the Jarman, RKR and Lakshman and Rao methods. (1971).

nomer. K₂
meop. pacem

VO , Si_2 , AsO , AsO^+ , PF^+ ,
● CO , Bi_2

(+7) Bi_2

C. A. 1985, 102, N6.

NO^+

1984

19 Б1029. Неэмпирическое исследование состояний $^3\Pi$ [иона] NO^+ . Ab initio investigation of the $^3\Pi$ states of NO^+ . Saxon Roberta P., Tuan Debbie F.-t., Helm H., Liu B. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 6, 2648—2653 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия первого порядка (распределение только одного электрона во втор. пространстве МО) с использованием МО, оптимизированных в рамках многоконфигурац. метода ССП, рассчитаны кривые потенциальной энергии симметрии $^3\Pi$ молек. иона NO^+ . Базис построен из слейтеровских АО s -, p - и d -типа. Особое внимание уделено 2-му состоянию данной симметрии, поскольку для него предшествующие результаты противоречивы. Найдено, что кривая $2^3\Pi$ имеет минимум в дальнедействующей области и локальный минимум выше соотв-щего диссоциац. предела $\text{N}^+(^3P) + \text{O}(^3P)$. Данное квазисвязанное со-

спектр,
м.п., Σ ;

Х. 1984, 19, № 19

стояние является ответственным за наблюдаемые особенности фотоэлектронного спектра NO. Отмечена сложная картина потенциальных кривых состояний $2^3\Pi-5^3\Pi$ вследствие большого числа псевдопересечений; приведен анализ многоконфигурац. волновых ф-ций. Рассчитаны колебат. уровни энергии для связанных состояний.

А. В. Немухин

NO⁺

1984

10 Д71. Неэмпирическое исследование ³Π состояний NO⁺. Ab initio investigation of the ³Π states of NO⁺. Saxon Roberta P., Tuan Debbie F.-t., Helm H., Liu B. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 6, 2648—2653 (англ.)

Неэмпирически рассчитаны кривые потенц. энергии пяти нижних ³Π состояний иона NO⁺. Расчеты проведены в первом порядке по конфигурац. взаимодействию на основе естественных орбиталей, полученных многоконфигурац. методом ССП. Результаты по двум нижним состояниям объясняют данные экспериментов по лазерной спектроскопии фотофрагментов и отдельные черты фотоэлектронного спектра NO. Состояние ²³Π имеет два минимума потенц. энергии; один на больших межатомных расстояниях, который стабилен относительно распада на атомы, и второй, локальный минимум при $R=1.2$ А, глубиной 0.81 эВ, дающий квазистационарное состояние распадающееся на $N^+(^3P) + O(^3P)$. Это состояние, лежащее на 21,84 эВ выше основного состояния NO, ответственно за струк-

Si, M. A;

ср. 1984, 18, N 10

туру фотоэлектронного спектра NO, которая ранее интерпретировалась отнесением к $s^3\Pi$ -состоянию. Полученные спектроскопич. параметры нижних трех состояний хорошо согласуются с литературными данными. Проводится сравнение с потенц. кривыми изоэлектронных молекул CO и N₂. Отмечается сходство кривых двух нижних состояний NO⁺, CO и N₂. Оно объясняется тем, что основной вклад в эти состояния дают при средних межатомных расстояниях одни и те же электронные конфигурации. А. А. Зембеков

NO⁺

1985

6 Б1216. Колебательная релаксация $\text{NO}^+(v)$ молекулами $\text{O}_2(^1\Delta_g)$. Vibrational relaxation of $\text{NO}^+(v)$ by $\text{O}_2(^1\Delta_g)$ molecules. Dotan I., Barlow S. E., Ferguson E. E. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 121, № 1—2, 38—40 (англ.)

Исследовано тушение колебательно-возбужденных ионов $\text{NO}^+ (v=1)$ молекулами $\text{O}_2(^1\Delta_g)$. Значение константы скорости тушения, $K = (3 \pm 2) \cdot 10^{-10} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$, значительно больше, чем в случае тушения $\text{NO}^+(v)$ молекулами O_2 в основном электронном состоянии ($K < 10^{-12} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$). Как предполагается, это связано с тем, что потенциальная кривая $\text{NO}^+(^1\Sigma) + \text{O}_2(^1\Delta)$ носит более отталкиват. характер, чем $\text{NO}^+(^1\Sigma) + \text{O}_2(^3\Sigma)$.
В. М. Ковба

⊗ O₂

Х. 1986, 19, № 6.

NO⁺

1985

Kaufmann K., Nager C;
et al.

(Ei, u.n.) Chem. Phys., 1985, 95,
N3, 385-390.

( III)

NO⁺

1985

Kimman J., Lovollée M.,
et al.

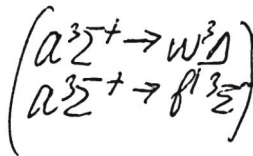
u. n. J. Chem. Phys., 1985,
97, N 1, 137-151.

(see. NO; III)

NO⁺

1985

102: 87027k Translational energy spectroscopy of nitrosyl (NO⁺) ions formed by charge transfer from argon(1+). O'Keefe, Anthony; Deraï, Renee; Bowers, Michael T. (Dep. Chem., Univ. California, Santa Barbara, CA 93106 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 113(1), 93-8 (Eng). Translational energy spectroscopy (TES) of NO⁺ ions formed by Ar⁺ charge exchange was studied. The 2 features obsd. in the spectrum were assigned to transitions from the $\nu'' = 0$ and possibly $\nu'' = 1$ and 2 levels of the $a^3\Sigma^+$ state to the low vibrational levels of the $w^3\Delta$ and $b^3\Sigma^-$ states. Comparison with previous TES spectra of NO⁺ formed by electron impact is reported and demonstrates the high selectivity of the charge transfer reaction in populating the 1st excited state of NO⁺.

C.A. 1985, 102, N10

NO⁺

1985

24 Б1208. Применение пороговой фотоэлектронной спектроскопии высокого разрешения к окиси азота и бензолу. High-resolution laser threshold photoelectron spectroscopy of nitric oxide and benzene. Müller-Dethlefs K., Sander M., Chewter L. A. «Laser Spectrosc. VII. Proc. 7th Int. Conf., Hawaii, June 24—28, 1985». Berlin e. a., 1985, 118—121 (англ.)

Предложенный авторами метод лазерной ФЭС сверхвысокого разрешения ($\approx 2 \text{ см}^{-1}$), основанный на регистрации фотоэлектронов с нулевой кинетич. энергией и названный фотоионизац. резонансной спектроскопией (K. Müller—Déthlefs и др. «Z. Naturf.» 1984, 39a, 291), использован для изучения ТС спектров фотоионизации NO (I) и бензола (II). Разрешена вращат. структура переходов $(\text{NO}^+), X^1\Sigma^+(\bar{\nu}^+ \equiv 0, I^+) \leftarrow (\text{NO})C^2\pi_r [\bar{\nu}=0, T_v(1/2), N=1]$ и переходов с терма $S_1(\bar{\nu}=1), I' \equiv (1(2))$ II в основное состояние катион-радикала II.

В. И. Фаустов

Франц-
Лостовск.

X. 1986, 19, ~24

№ 7

(DM. 23480Ja)" 1985

Sundholm A., Pyrkko P.,
et al.,

меоп.
проект.

biol. Phys.; 1985, 56,
N 6, 1411-1418.

NO⁺2

1985

Samson J.A.R.,

Masuko T., et al.

J. Chem. Phys., 1985,

83, N11, 5531-5535.

ll-n.

( NO^+ ; III)

NO⁺

1985

9 Б1121. Сечения диссоциативной и двухкратной фотоионизации NO от порога до 120 А. Dissociative and double photoionization cross sections of NO from threshold to 120 А. Samson J. A. R., Masuoka T., Pareek P. N. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 11, 5531—5535 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

С возбуждением синхротронным излучением, резонансными линиями He-I, He-II, а также искровым разрядом в Ag исследованы относит. значения парциальных сечений σ образования ионов NO⁺, O⁺, N⁺ и NO²⁺ при фотоионизации молекул NO. Измерения проведены в обл. длин волн ионизирующего излучения от 12 до 61,4 нм. Полученные величины σ переведены в абс. шкалу с помощью лит. данных по фотопоглощению. Определен порог двухкратной фотоионизации NO 39,4 ± ±0,12 эВ. Обнаружено резкое увеличение выхода ионов, но не O⁺, вблизи порогов переходов в состоянии NO⁺ C³Π (21,72 эВ) и B'¹Σ⁺ (22,73 эВ), что объяснено преддиссоциацией последних на N⁺ (³P) и O (³P).

О. А. Басченко

М.Н.

(11) ☒

X. 1987, 19, N 9

NO²⁺

NO⁺

1985

102: 67678v The nonempirical calculation of second-order molecular properties by means of effective states. II. Effective TDCHF spectra for nitrosyl ion (NO⁺), carbon monoxide, carbon dioxide and acetylene. Visser, Foppe; Wormer, Paul E. S. (Inst. Theor. Chemistry, Univ. Nijmegen, Toernooiveld, 6525 ED Nijmegen, Neth.). *Chem. Phys.* 1985, 92(1), 129-40 (Eng). Time-dependent coupled Hartree-Fock (TDCHF) calcns. were performed in large bases for the linear mols. NO⁺, CO, CO₂ and C₂H₂. Some first- and second-order properties are presented, in particular the isotropic dispersion interaction coeffs. C₆⁰⁰⁰, C₈⁰⁰⁰ and C₁₀⁰⁰⁰ for all possible van der Waals dimers consisting of these monomers. These coeffs., and also the corresponding long-range anisotropic interaction coeffs., can be calcd. easily for any of these dimers using the effective TDCHF multipole spectra presented. Formulas to this end are given.

no pen.
pacem

(F3) 121

C.A. 1985, 102, N8

NO⁺⁺

1986

105: 142658f **Discovery of an emission in oxonitrogen(2+)** (NO⁺⁺). Besnard, M. J.; Hellner, L.; Malinovich, Y.; Dujardin, G. (Lab. Photophys. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(3), 1316-21 (Eng). Doubly charged NO²⁺ ions were produced by double photoionization of neutral NO mols. with the synchrotron radiation of variable energy of 35-68 eV. Two stable states of NO²⁺ were obsd. in the double photoionization spectrum with energies of 38.6 and 40.0 eV. An emission from NO²⁺ was discovered by using a new photoion-photon of fluorescence coincidence (PIFCO) expt. The fluorescence efficiency was measured as a function of the excitation energy, indicating that the emitting state, whose onset energy was obsd. at 42.5 eV, is a stable or slowly predissociating state of NO²⁺. On the basis of the comparison with calcd. energies, the 3 stable states of NO²⁺ with energies at 38.6, 40.0, and 42.5 eV were assigned to, resp., the X²Σ⁺, A²Π, and B²Σ⁺ electronic states. The detected emission was ascribed to a B²Σ⁺ → X²Σ⁺ emission around 3170 Å.

checkmp,
X²Σ⁺, A²Π,
B²Σ⁺,
(B²Σ⁺ - X²Σ⁺)

C.A. 1986, 105, N 16

NO²⁺

1986

8 Б1036. Неэмпирическое исследование низколежащих состояний $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$ NO²⁺. Ab initio investigation of low-lying $^2\Sigma^+$ and $^2\Pi$ states of NO²⁺. Cooper David L. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 132, № 4—5, 377—382 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия рассчитаны потенциальные кривые трех низших состояний $^2\Sigma^+$ и трех низших состояний $^2\Pi$ иона NO²⁺. МО получены в расчете методом ССП в полном активном пространстве. Использован базис ф-ций слейтеровского типа, включавший 26, 14 и 6 ф-ций σ , π и δ типа соотв. на каждом центре. Все потенциальные кривые являются отталкивательными при больших межъядерных расстояниях. На потенциальных кривых состояний $X^2\Sigma^+$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$ и $D^2\Pi$ имеются минимумы, отделенные от отталкиват. части кривой потенциальным барьером, лежащим выше диссоциац. предела (на 4,7 и 6,0 эВ для состояний X и A). Для основного состояния высота барьера составила 3,3 эВ. Рассчитаны колебат. уровни квазисвязанных состояний и на их основе определены спектроскопич. постоянные.

А. А. Сафонов

У. 1987, 19, № 8

NO²⁺

1986

4 Д104. Неэмпирическое изучение низколежащих состояний $^2\Sigma$ и $^2\Pi$ NO²⁺. Ab initio investigation of low-lying $^2\Sigma^+$ and $^2\Pi$ states of NO²⁺. Cooper David L. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 132, № 4—5, 377—382 (англ.)

Расчет состояний двухзарядных молекулярных ионов проводился с целью интерпретации эксперим. данных, полученных с помощью техники совпадений фотоион — фотоион. Получены кривые потенциальных энергий для состояний $^2\Sigma^+$ ($X^2\Sigma^+$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$ ($A^2\Pi$, $D^2\Pi$, $3^2\Pi$)) NO²⁺ с помощью техники CAS SCF/CI. Энергии рассчитывались более чем в 30 точках при межатомных расстояниях в интервале $(1,6—40)a_0$. Состояния $^2\Sigma^+$ и состояния $^2\Pi$ ($A^2\Pi$ и $^2\Pi$) имеют минимумы. Напр., минимум состояния $X^2\Sigma$ при 1,11 Å лежит более чем на 3,3 эВ ниже максимума при 1,7 Å. В этом минимуме обнаруживаются метастабильные колебательные уровни. Для первых 6 уровней $\omega_e = 1957 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e x = 21 \text{ см}^{-1}$.

Г. К.

М.А.

ср. 1987, 18, № 4

NO²⁺

Om. 25483

1986

106: 90406w Ab initio investigation of low-lying 2Σ and 2Π states of oxonitrogen($2+$) (NO^{2+}). Cooper, David L. (Dep. Inorg. Phys. Ind. Chem., Univ. Liverpool, Liverpool, UK L69 3BX). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 132(4-5), 377-82 (Eng). Exploratory calcs. were carried out for the 3 lowest $2\Sigma^+$ and 2Π states of NO^{2+} using full-valence MC SCF plus 1st-order CI techniques. Potential-energy curves are reported for more than 30 internuclear distances between 1.6 and 40 a_0 . These are discussed in terms of the extensive exptl. investigations of this ion, including the recent observation of an emission. Many of the adiabatic states are characterized by potential wells lying above their asymptotic limits, supporting several quasibound vibrational levels.

ab initio
расчёт
НУЖНЫ
Ж. СОСМОДН.

C.A. 1987, 106, N 12

NO²⁺

[Om. 24697]

1986

Masuko T.,

прис-
создав.

J. Chem. Phys., 1986,

84, N10,

5520-5526.

NO^+

NO^{2+}

[om. 24697]

1986

Маслова Т.,

предиссо-
бразие

J. Chem. Phys., 1986,
84, N 10, 5520-5526



NO⁺

1986

(2)

104: 177185f: Radiative lifetimes and kinetic studies of metastable nitric oxide(1+)(a³Σ⁺) and molecular oxygen(1+)(a⁴Π_u). O'Keeffe, Anthony; McDonald, J. R. (Chem. Div., Nav. Res. Lab., Washington, DC 20375-5000 USA); *Chem. Phys.* 1986, 103(2-3), 425-36 (Eng). The lowest energy metastable electronic states of the NO and O cations were studied using Fourier transform mass spectrometry. Using very low neutral reactant pressures and ion trapping periods of up to several seconds, the radiative relaxation rate of the metastable ion becomes competitive with its reaction rate. In this fashion both kinetic information and the radiative lifetime of the metastable state are obtained. The measured rate consts. for the reactions of NO⁺(a³Σ⁺) with CO₂ [$k = (1.0 \pm 0.2) \times 10^{-3} \text{ cm}^3/\text{s}$] and of O₂⁺(a⁴Π_u) with Ar [$k = (4.9 \pm 1.5) \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$] are in agreement with earlier results. The measured lifetimes of the NO⁺ metastable ($\tau = 1.45 \text{ s}$) and the O₂⁺ metastable ($\tau = 0.22 \text{ s}$) are discussed using a 4-state spin-orbit coupling model which predicts metastable radiative lifetimes which agree with the exptl. values.

(4) 

C.A. 1986, 104, N20

O₂⁺(2)

NO^+

1986

Ruščić Branco,

J. Chem. Phys., 1986,

vol. 85, N 7, 3776-3784.

(all.  N_2^+ ; III)

NO⁺

1986

18 Б4443. Доказательство методом фотоэлектронной спектроскопии фотодиссоциации димера оксида азота в сверхзвуковой струе. Photoelectron spectroscopic evidence for photodissociation of the nitrogen oxide dimer in supersonic jet. Sato Kenji, Achiba Yohji, Kimura Katsumi. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 126, № 3—4, 306—310 (англ.)

При помощи времяпролетного анализатора энергий свободных электронов (разрешение 0,15 эВ) измерены энергии фотоэлектронов, возникающих при фотоионизации (ФИ) светом 193; 199,8; 204,2; 208,8; 217,8; 223,1 и 228,7 нм димерных молекул (NO)₂ в сверхзвуковой струе NO, истекающей в вакуум. Одновременно регистрировали масс-спектры продуктов ФИ (NO)₂ при помощи квадрупольного масс-спектрометра. В этих измерениях показано, что ФИ (NO)₂ сопровождается образованием только ионов NO⁺, оны (NO)₂⁺ не обна-

X. 1986, 19, N 18.

ружены. Механизм образования NO^+ таков. Сначала $(\text{NO})_2$ поглощает один фотон с образованием возбужденной молекулы $\text{NO}(A^2 \Sigma^+)$, которая ионизируется при поглощении еще одного фотона лазерного излучения. Порог образования NO^+ из $(\text{NO})_2$ лежит между 217,8 и 223,1 нм, что должно соответствовать порогу образования $\text{NO}(A^2 \Sigma^+)$ при однофотонной фотодиссоциации $(\text{NO})_2$.

В. Е. Скурат

NO⁺

CM, 24181

1986

| 105: 69482n Electron energy-loss studies of nitric oxide. Stubbs, Richard J.; York, Trevor A.; Comer, John (Dep. Phys., Univ. Manchester, Manchester, UK M13 9PL). *Chem. Phys.* 1986, 106(1), 161-70 (Eng). An electron spectrometer incorporating a position-sensitive detector and differential pumping was used to obtain electron energy-loss spectra of NO. Between 4 and 10.5 eV a study of the Rydberg states converging on the ground state of NO⁺ and of the valence states, identified many previously obsd. transitions and a no. of new ones. A comprehensive survey was made of the higher Rydberg region between 10.5 and 19 eV. This identified for the 1st time a large no. of electron-dipole-forbidden transitions to Rydberg states converging on the higher levels of NO⁺.

(Pugden - eocm.)

C.A. 1986; 105, N8

NO^+

1986

5 Д123. Ядерный квадрупольный момент азота, определенный из сочетания полностью численных и использующих большой базис расчетов NO^+ и N_2 . Nuclear quadrupole moment of nitrogen from combined fully numerical and discrete basis-set calculations on NO^+ and N_2 . Sundholm Dage, Pyykkö Pekka, Laaksonen Leif, Sadlej Andrzej J. «Chem. Phys.», 1986, 101, № 2, 219—225 (англ.)

Предложенный авторами ранее метод определения квадрупольных моментов ядер на основе использования как чисто численных, так и метода ЛКАО с большим базисным набором, использован для определения квадрупольного момента ядра азота. С этой целью проведены достаточно точные численные и аналитич. расчеты двухатомных молекул NO^+ и N_2 . Е. О. Воронков

(м.п.)

(41) 

ср. 1986, 18, N 5

NO^+

Om. 23029

1986

neopem-
raem

Sundholm D., Pyykkö P.,
Laaksonen L., et al.,

Chem. Phys., 1986,
101, N 2, 219-225.

NO^{2+}

1986

8 Б1030. Теоретическое и экспериментальное исследование двузарядного катиона оксида азота. A theoretical and experimental investigation of the dication of nitric oxide. Wetmore R. W., Boyd R. K. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 23, 6091—6101 (англ.)

В области межъядерных расстояний от 1 до 5 Å рассчитаны потенциальные кривые дублетных и квартетных состояний симметрии Σ^+ , Σ^- , Π , Δ , Φ двузарядного катиона NO^{2+} . Волновые ф-ции построены в приближении конфигурац. взаимодействия с использованием базисов $(9s5p2d)/[3s2p1d]$. Найдено, что из всех рассчитанных 66 состояний только два — низшие состояния $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$ — являются квазисвязанными. Для них рассчитаны колебат. уровни энергии и времена жизни. Приведены также нек-рые новые результаты эксперим. исследований, включающих данные по процессам ионизации электронным ударом, оже-спектроскопии, спектроскопии двойной перезарядки, спектроскопии потерь поступат. энергии и др. Отмечены обл. взаимного дополнения теорет. и эксперим. исследований.

М.Н.

X. 1987, 19, N 8

NO^{2+}

1987

74 Л509. Оптический эмиссионный спектр дикатиона NO^{2+} . Optical emission spectrum of the NO^{2+} dication. Cossart D., Bonneau M., Robbe J. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 125, № 2, 413—427 (англ.)

Обсуждены теоретич. работы, предсказывающие возможность наблюдения спектра флуоресценции двухзарядного катиона NO^{2+} . Описаны эксперименты с электр. разрядом в чистом NO при низких давлениях в кювете с горячим катодом и ограничением пространства разряда магн. полем. В спектре разряда выделена полоса флуоресценции при 256,3 нм. Ее анализ позволяет приписать обнаруженную полосу переходу $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+ (0, 0)$ двухзарядного иона NO^{2+} .

Е. П. Смирнов

М.П.

ср. 1988, 18, № 4

NO^{2+}

1987

Д 7 Б1229. Оптический спектр испускания двухзарядного катиона NO^{2+} . Optical emission spectrum of the NO^{2+} dication. Cossart D., Bonneau M., Robbe J. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 125, № 2, 413—427 (англ.)

Проведено эксперим. и теор. исследование двухзарядного катиона NO^{2+} . Измерены спектры испускания разряда низкого давл. через чистую моноокись азота в источнике с гор. катодом и магн. ловушкой. Дано описание источника. В спектре наблюдалась новая полоса в обл. 256,3 нм 0—0 перехода $B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ NO^{2+} . Выполнен анализ вращат. структуры полосы и получены след. молек. постоянные (в см^{-1}): $\nu_0 = 38995,06$, $B_0 = 1,879$, $B_0' = 1,892$, $D_0' = 6,9 \cdot 10^{-6}$, $D_0'' = 6,3 \cdot 10^{-6}$, $R_0' = 1,0963$ А, $R_0'' = 1,0926$ А. Выполнен неэмпирич. расчет участков потенциальных кривых катиона в состояниях $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Sigma^+$. Значе-

оптический
спектр
испускания

Х. 1988, 19, № 7

ния T_e (в см^{-1}) и R_e (в Å) равны соотв. 0,11000; 42 000; 75 000 и 1,11; 1,22; 1,22; 1,24. Для состояния $A^2\Pi$ рассчитан параметр спин-орбитального расщепления $A = -126 \text{ см}^{-1}$. Результаты сопоставлены с данными выполненными ранее неэмпирич. и полуэмпирич. расчетов катиона π молек. постоянными изоэлектронных двухатомных систем (BeF , VO , CO^+ , CN , N_2^+).
В. М. Ковба

NO^{2+}

1987

107: 208004q Optical emission spectrum of the nitric oxide
dication. Cossart, D.; Bonneau, M.; Robbe, J. M. (Lab.
Photophys. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol.
Spectrosc.* 1987, 125(2), 413-27 (Eng). A new emission band at
2563 Å obtained from a low-pressure, hot cathode and magnetically
confined elec. discharge through pure NO vapor was recorded and
rotationally analyzed. The available exptl. data from photoion-fluorescence
photon coincidence and translational energy loss spectroscopy, in
conjunction with ab initio calcn., allowed assignment of the new band
to the $\text{B}^2\Sigma^+ - \text{X}^2\Sigma^+ (0, 0)$ transition of NO^{2+} .

$(\text{B}^2\Sigma^+ - \text{X}^2\Sigma^+)$

C.A. 1987, 107, n 22

NO^+

1987

Cummins P. L.,
Baeskey G. B., et al.

M.N. J. Chem. Phys., 1987,
86, N 12, 6908-6917.

(see $\bullet$ N_2 ; III)

NO^{2+}

Om. 27141

1987

Хернел бос.
СОСТАВ.

107: 141498h Comment on "Ab initio investigation of low-lying $1/2\Sigma^+$ and 2Π states of oxonitrogen($2+$)(NO^{2+})". Fournier, March, R. E. (Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 137(6), 596-8 (Eng). A polemic. Energies of the $1/2\Sigma^+$ states of the NO^{2+} were detd. exptl. by the technique of charge transfer, and are compared with previous results (Cooper, *ibid.*, 1986, 377) of full-valence MC SCF plus first-order techniques. The good agreement obtained permits an assignment of some of the peaks in the exptl. spectrum, and confirms the accuracy of these calcs.

C.A. 1987, 107, N 16

NO²⁺

1987

17 Б1141. Квазисвязанные возбужденные состояния в двухзарядных двухатомных ионах. Случай NO²⁺. Quasibound excited states in doubly charges diatomic ions: NO²⁺ case. Hellner L., Besnard M. J., Dujardin G., Aarts J. «15th Int. Conf. Phys. Electron. and Atom. Collis., Brighton, 1987». Belfast, 1987, 57 (англ.)

На разработанной авторами установке («J. Chem. Phys.», 1986, 85, 1316), реализующей метод фотоион-фотоионных совпадений, идентифицированы переходы в двухзарядных ионах N_2^{2+} ($D^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g$) и NO^{2+} ($B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$), возбуждаемые в молек. струе перестраиваемым синхротронным излучением с энергией 35—70 эВ. Переход $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ NO²⁺ (610—900 нм) наблюдался впервые. Пороговая энергия его возбуждения составляет $40 \pm 0,4$ эВ, энергия состояния $A^2\Pi$ относительно основного электронного состояния $X^2\Sigma^+ - 1,4 \pm 0,5$ эВ.

В. М. Ковба

М.А.

X. 1988, 19, N 17

NO^{2+}

(Om. 27938)

1987

Jonathan P., Herman Z.,
et al.,

Низкая
температ.
состоят.

Chem. Phys. Lett.,
1987, 141, N 6, 511-514.

NO⁺

1987

MacLagan R.C.A.R.,
Simpson R.W.

see. n. Int. J. Quantum Chem.
1987, 31, N3, 463-470.
(see. N₂; III).

NO⁺

1987

9 Б4340. Переходы возбужденных состояний, приводящие к образованию осколочных ионов N⁺ при фотовозбуждении ионов NO⁺. Excited-state transitions giving rise to N⁺ fragment ions when NO⁺ ions are photoexcited. Moghaddam H. R., Hamdan M., Harris F. M., Beynon J. H. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1987, 20, № 17, 4485—4491 (англ.)

Изучены спектры поступат. энергий ионов N⁺, возникающих при фотофрагментации (ФФ) под действием света 514,5 или 476,5 нм лазера на ионах Ag⁺ выделенных по массе ионов NO⁺, полученных при электронной бомбардировке NO₂ или NO. Показано, что ФФ NO⁺ происходит на N⁺(³P) + O(³P). Полученные спектры показывают, что ФФ обусловлена поглощением света более чем одним долгоживущим (время жизни ≥ 3,5 мкс) электронновозбужденным состоянием NO⁺ с энергиями в обл. 18,9—20,2 эВ. В предположении одnofотонного поглощения света дано предположит.

X. 1988, 19, № 9

отождествление возможных электронных переходов, ответственных за ФФ NO^+ и дающих максимумы в спектрах, указанные в скобках: $b^3\Sigma^-$, $\omega^3\Delta \rightarrow c^3\Pi$ (0,9 эВ); $W^1\Delta$, $A^1\Sigma^- \rightarrow 2^1\Pi$ (1,3 эВ); $W^1\Delta$, $A^1\Sigma^- \rightarrow 2^1\Pi$ (1,5 эВ); $W^1\Delta$, $A^1\Sigma^- \rightarrow 2^1\Pi$ (1,7 эВ); $b^3\Sigma^- \rightarrow 2^3\Pi$ (0,2 эВ).
В. Е. Скурат



NO⁺

(om. 27881) 29083) 1987

Peterson L.A., Woods R.L.,

neop.
racem

J. Chem. Phys., 1987,
87, N 8, 4409 - 4418.

NO⁺

1987

8 ЛЗ36. Исследование окиси азота методом спектроскопии высокого разрешения фотоэлектронов с нулевой кинетической энергией. High-resolution zero-kinetic-energy photoelectron spectroscopy of nitric oxide. Sander M., Chewter L. A., Müller-Dethlefs K., Schlag E. W. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1987, 36, № 9, 4543—4546 (англ.)

Метод фотоэлектронной спектроскопии пороговых электронов применен для исследования динамики процесса фотоионизации, отвечающего поглощению в полосе $(\text{NO}^+)X^1\Sigma^+ (v^+=0, N^+) \leftarrow (\text{NO})A^2\Sigma^+ (v=0, N_A, J_A=N+\frac{1}{2})$. Впервые реализован метод измерения близ-

М.П.

(7) NO



ф. 1988, 18, № 8.

ких к нулю кинетич. энергий фотоэлектронов, свободный от наложения выталкивающего электрич. поля в области ионизации. Совместно с охлаждением молекул NO в сверхзвуковой струе это позволило достигнуть энергетич. разрешения $\sim 0,5$ мэВ (~ 4 см $^{-1}$). Для возбуждения использовались два перестраиваемых лазера на красителях. По эксперим. данным определен 1-й потенциал ионизации NO: $74719 \pm 0,5$ см $^{-1}$. Анализ зависимости формы спектра от квантовых чисел промежуточного возбужденного состояния $A^2\Sigma^+$ позволил авторам сделать вывод о сильной зависимости углового момента перехода от величины N_A . М. Т.

NO^+

[om. 26576]

1987

Sears T. J.,

бидишор.
эксперим.
исследов.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans, 1987, Pt 2, 83,
N1, 111-126.



NO^{2+}

(Om 31925)

1988

Bernard M. J., Hel-
lner L., et al.,

(A27-X25⁺) J. Chem. Phys. 1988,
89 (10), 6554-5.



C.A. 1988, 109, N 26, 239844

NO²⁺

от 31925

1988

13 Б1127. Наблюдение испускания $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ в NO^{2+} . Observation of the $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ emission in NO^{2+} . / Besnard M. J., Hellner L., Dujardin G. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 10.— С. 6554—6555.— Англ.

Методом фотоион-фотонных совпадений исследован переход $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ в спектре испускания иона NO^{2+} . Линейная экстраполяция отношения числа совпадений к числу зарегистрированных ионов как ф-ция энергии фотонов дает оценку вертикальной энергии возбуждения, $40,4 \pm 2,0$ эВ. Это хорошо согласуется с ожидаемой энергией возбуждения для появления испускания $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ и доказывает, что заселение состояния $A^2\Pi$ NO^{2+} происходит в результате прямой двойной ионизации молекул NO в основном электронном состоянии. Обсуждена возможность наблюдения спектра диспергированной Фл $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ NO^{2+} . В. М. Ковба

М.А.

х. 1989, N 13

NO^{2+}

Дм 31925

1988

7 Л355. Наблюдение излучения NO^{2+} ($A^2\Pi-X^2\Sigma^+$).
Observation of the $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ emission in NO^{2+} / Bes-
nard M. J., Hellner L., Dujardin G. // J. Chem. Phys.—
1988.— 89, № 10, С. 6554—6555.— Англ.

Методом фотоион-фотонных совпадений зарегистриро-
вано излучение NO^{2+} ($A^2\Pi-X^2\Sigma^+$). Показано, что со-
стояние NO^{2+} ($A^2\Pi$) заселяется, главным образом, в
процессе прямой двойной фотоионизации. Обсуждены
трудности, регистрации спектра флуоресценции NO^{2+}
($A^2\Pi-X^2\Sigma^+$). В. С. Иванов

($A^2\Pi-X^2\Sigma^+$)

ф. 1989, № 7

NO⁺

1988

Peterson Kirk A.,
Woods R. Claude.

J. Chem. Phys. 1988, 89, 28,
u. n. C. 4929-4944.

(cur. ALF; III)

NO⁺

DM-32470

1989

Dingle T.W.; Muzinaga S.,
et al.,

(15⁺) J. Comput. Chem. 1989, 10,
N6, 753-769.

Contraction of the Well-
Tempered • Gaussian Basis

Sets: The First-Row
Diatomic Molecules.

NO²⁺

от 31608

1989

9 J1225. Первое экспериментальное наблюдение колебательно-возбужденного NO²⁺(X²Σ⁺, A²Π). First experimental observation of vibrationally excited NO²⁺(X²Σ⁺, A²Π) / Hamdan M., Brenton A. G. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 155, № 3.— С. 321—324.— Англ.

Методом трансляционной спектроскопии высокого разрешения с возбуждением при столкновениях с атомами гелия исследованы электронно-колебательные переходы между нижними связанными состояниями X²Σ⁺, A²Π и B²Σ⁺ молекулярного иона NO²⁺. Две группы колебательных переходов со средними энергиями 0,22 и 0,17 эВ в трансляционных спектрах идентифицированы как переходы X²Σ⁺, 7 ≥ v ≥ 3 ↔ v = 0 и A²Π, 6 ≥ v ≥ 3 ← v = 0. Полученные значения энергий переходов хорошо согласуются с результатами неэмпирич. расчетов. Обсуждены различия в эффективности заселения колебат. уровней при возбуждении столкновениями с электронами и тяжелыми частицами.

Е. П. Смирнов

М.П.

ф. 1989, № 9

NO^{2+}

DM 31608

1989

17 B1147. Первое экспериментальное наблюдение колебательно возбужденных ионов NO^{2+} ($X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$). First experimental observation of vibrationally excited NO^{2+} ($X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$) / Hamdan M., Brenton A. G. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 155, № 3.— С. 321—324.— Англ.

Исследованы переходы с участием трех наиболее низколежащих связанных электронных состояний $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$ и $B^2\Sigma^+$ иона NO^{2+} . Измерены спектры поступат. энергии ионов после их неупругого рассеяния на мишени из атомов He. Ионы NO^{2+} получались при ионизации молекул NO электронным ударом (100 эВ), затем ускорялись до энергии 6 кэВ и далее с помощью двух электростатич. анализаторов энергии определялись энергии ионов после столкновений. При столкновениях возможно протекание след. процессов: $\text{NO}^{2+} (X^2\Sigma^+) + \text{He} \rightarrow \text{NO}^{2+} (A^2\Pi, B^2\Sigma^+) + \text{He} - \Delta E$, $\text{NO}^{2+} (A^2\Pi, B^2\Sigma^+) + \text{He} \rightarrow \text{NO}^{2+} (X^2\Sigma^+) + \text{He} + \Delta E$, $\text{NO}^{2+} (X, A, B) + \text{He} \rightarrow \text{NO}^{2+} (X, A, B) + \text{He}$ (в последнем случае

М.А.

X.1989, N17

при столкновении меняется лишь колебат. состояние иона). В спектре наблюдались 3 основных пика 1,5; 3,3 и 4,9 эВ, отнесенных к переходам $A^2\Pi \leftarrow X^2\Sigma^+$, $B^2\Sigma^+ \leftarrow A^2\Pi$ и $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$. Наблюдались также пики, связанные с переходами $X^2\Sigma^+(v=7-2 \leftarrow v=0)$, $A^2\Pi(v=3-6 \leftarrow v=0)$, $X^2\Sigma^+(v=3-7 \leftarrow v=0)$. Средние колебат. интервалы в состояниях $X^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi$ составляют, соотв., 0,22 и 0,17 эВ, что хорошо согласуется с результатами неэмпирич. расчетов (соотв., 0,242 и 0,159 эВ).

В. М. Ковба

ЮТ
ЭВ К
п р

NO^{2+}

(Om 31608)

1989

110: 182237c First experimental observation of vibrationally excited oxonitrogen($2+$) (NO^{2+}) $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$). Hamdan, M.; Brenton, A. G. (Mass Spectrom. Res. Unit, Univ. Coll. Swansea, Swansea, UK SA2 8PP). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 155(3), 321-4 (Eng). Transitions among the 3 lowest $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$ and $B^2\Sigma^+$ bound states of NO^{2+} were investigated by means of high-resoln. (0.08-0.35 eV FWHM) translational energy spectroscopy (TES). As well as electronic transitions between the ground and the two lowest electronic excited states, the spectra clearly show 2 distinct groups of vibrational transitions having av. vibrational spacings of 0.22 and 0.17 eV resp. The two groups of vibrational levels are assigned to transitions involving NO^{2+} ($X^2\Sigma^+$, $7 \geq v \geq 3 \leftrightarrow v = 0$) and ($A^2\Pi$, $6 \geq v \geq 3 \leftrightarrow v = 0$). The measured vibrational spacings are in accord with the values of 0.159 and 0.242 eV predicted by the latest ab initio calcs.

($X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$)

C.A. 1989, 110, ~20

NO⁺ (Om. 33198) 1989

~ Kuo C.-H., Beggs C. B.,
Kemper P. R., et al.;

Chem. Phys. Lett,
1989, 163, N 4/5, 291-

296

Experimental



Measurement

of the Radiative Lifetime
of NO^+ ($X^1\Sigma^+$, $v=1, 2$ and 3).

NO^+

(OM. 31876)

1989

Marsden C.F., Smith B.F.,

ess. noem.,
ab initio
pacem

J. Mol. Struct. Theo-
Chem. 1989, 187, 337-
-357.

NO-

(OM. 31876)

1989

Marsden C.F., Smith B.F.,

Calc. noem.,
ab initio
program

J. Mol. Struct. Theo-
Chem. 1989, 187, 337-
- 357.

NO-

1989

/ 112: 207104p Vibrational autodetachment of NO-. Tanguay,
Normand Albert (Brown Univ., Providence, RI USA). 1989. 131 pp.
(Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA9002307. From
Diss. Abstr. Int. B 1990, 50(5), 3498.

C.A. 1990, 112, N22

(all-optic)

NO⁻

1989

Travers M. J., Cowles D. C.
et al.

Ac,
u.n.

Chem. Phys. Lett. 1989.
164, N5. C. 449-455.

(Cor.  O₂; III)

NO⁺

1989

Wong Ming Wah,
Nobes Ross H. et al.

расчёт
спектр-
тры
и Do

J. Chem. Phys. 1989.
91 (5), 2971-9.

(see  Ne; III)

NO⁺

Om 33555

1990

17 Б1050. Теоретические радиационные времена жизни NO⁺(X¹Σ⁺). Theoretical radiative lifetimes in NO⁺(X¹Σ⁺) / Chambaud G., Rosmus P. // Chem. Phys. Lett.— 1990.— 165, № 5.— С. 429—431.— Англ.

В расширенном гауссовом базисе, включающем f-ф-ции, многоконфигурац. методом ССП в полном активном пространстве с послед. учетом конфигурац. вз-влия рассчитаны потенциальная кривая и ф-ция дипольного момента основного состояния молекулы NO⁺ в области межъядерных расстояний 1,5—2,8 ат. ед., что позволило оценить времена жизни состояний с $v=1-6$ как 88, 45, 31, 24, 20, 17 мс, соответственно. В. И. Пупышев

М.П.

X. 1990, N 17

NO⁺

[Im 33555]

1990

(X¹Σ⁺)

$\tilde{\nu}$, *vacuum*

/ 112: 127925s Theoretical radiative lifetimes in nitrosyl ion (NO⁺(X¹Σ⁺)). Chambaud, Gilberte; Rosmus, Pavel (LPCR, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1990, 165(5), 429-31 (Eng). Potential energy and dipole moment function for the electronic ground state of the NO⁺ ion were calcd. from highly correlated CASSCF-CI electronic wave functions. The radiative lifetimes of the vibrational states are compared with 2 different exptl. measurements and previous theor. data. The CASSCF-CI lifetimes are: 88, 45, 31, 24, 20 and 17 (for $v = 1$ to 6; all values in ms).

C.A. 1990, 112, N14

NO^+ [Om 34716] 1990

Fenistein S., Heringer M.,
et al.,

Chem. Phys. Lett.,

1990, 172 ●, N1, 89-93

Radiative relaxation of NO^+

(X, v=1-4)

NO-

[Om. 33760]

1990

Macalogue J., Suzer L,
et al.,

comp
of

sample- J. Phys. Chem. 1990, 94,
use N 5, 1759 - 1764.

Chemical Ioni ● zation Dis-

charge of N_2O for Matrix
Infrared Spectroscopic Study
of Isolated Anions.

NO⁻

UM 35981

1990

Jacob M.E., Thompson W.E.,

London. J. Chem. Phys. 1990, 93,
check N11, 7609-7621.

The vibrational spectra of mo-
lecular ions isolated in solid
neon. IV NO⁺, ● NO⁻, ONNO⁺,

and ONNO.

NO⁺

1990

— 24 Б1297. Колебательные спектры молекулярных ионов, изолированных в твердом неоне. IV. NO⁺, NO⁻, ONNO⁺ и ONNO⁻. The vibrational spectra of molecular ions isolated in solid neon. IV. NO⁺, NO⁻, ONNO⁺, and ONNO⁻ / Jacox Marilyn E., Thompson Warren E. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 11.— С. 7609—7621.— Англ.

18655
35987
OM

М. А.

Изучены ИК-спектры ионов NO и его димера, изолир. в матрицах из Ne при 5 К. Матрицы получали соосаждением смеси Ne:No с пучком атомов неона, возбужденных МВ-разрядом. Фотоионизация и ионизация Пеннинга приводила к стабилизации ионов NO и его димера в матрицах. К NO⁺ отнесена полоса 2345,2 см⁻¹, к NO⁻ — 1369,9 см⁻¹. Сильная полоса при 1619,2 см⁻¹ и слабая — при 2095 см⁻¹ отнесены к колебаниям ν_5 и ν_1 транс-ONNO⁻, полоса 1424,1 см⁻¹ отнесена к цис-ONNO⁺. Также наблюдались полосы транс- и цис-ONNO. Сравнение газофазных частот цис-ONNO и ONNO₂ с соотв-щими матричными частотами, позволило сделать вывод, что матричный сдвиг для ионов димера NO меньше 1%. Пред. сообщение см. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93.— С. 7622.

(73)

XI

X. 1991, № 24

Г. В. Чертихин

NO^+

[OM. 34834]

1990

Keo Chau-Hong,
Wyttenbach T, et al.,

$(a^3\Sigma^+)$
 τ J. Chem. Phys., 1990,
92, N 8, 4849 - 4855
Radiative • lifetimes

of metastable $O_2^+(a^4\Pi_u)$
and $NO^+(a^3\Sigma^+)$.

NO⁺

DM 34825

1990

19 B1029. Радиационные времена жизни состояния $X^1\Sigma^+$ молекулы NO⁺. Radiative lifetimes for the $X^1\Sigma^+$ state of NO⁺ / Partridge Harry, Langhoff Stephen R., Bauschlicher (Jr.) Charles W. // Chem. Phys. Lett.— 1990.— 170, № 1.— С. 13—16.— Англ.

Получены очень точные значения радиац. времен жизни колебат. уровней с $v=1-5$ состояния $X^1\Sigma^+$ молекулы NO⁺ и изучена их чувствительность к выбору базисов как в одно-, так и в многочастичном пространствах. Одночастичные базисы строились в формализме атомных натуральных орбиталей на основе наборов сгруппир. гауссовых орбиталей, наиболее точным из к-рых был [13s8p6d4f2g/5s4p3d2f1g]. МО находились методом ССП в полном активном пространстве. Корреляция электронов учтена методами конфигурац. вз-вня с несколькими исходными конфигурациями и усредненного функционала связанных пар. Ошибка в рассчитанных значениях времен жизни не превышает 5%, что позволило авторам сделать вывод о неправильном эксперим. определении этих величин для уровней с $v=2$ и 3.

В. Б. Павлов-Веревкин

М. П.

X. 1991, № 19

NO⁺

от 36 000 1990

† 10 Д113. Теоретическое изучение спектроскопии NO⁺. Theoretical study of the spectroscopy of NO⁺ / Partridge Harry, Langhoff Stephen R., Bauschlicher Charles W., Jr. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 10.— С. 7179—7186.— Англ.

Спектроскопия молекулы NO⁺ изучена с помощью метода конфигурац. взаимодействия с набором исходных конфигураций. В фотоэлектронном спектре пик при 21,7 эВ связан с (2) ³Π состоянием (*c*³Π) и колебат. прогрессия с центром при 23,4 эВ связана с адиабатич. состоянием (3) ¹Π (*B*¹Π). Дана характеристика несколькими дополнительными связанными состояниями с энергиями связи большими 1 эВ. Для многих состояний приведены радиационные времена жизни. Проводится сравнение с имеющимися эксперим. данными. Работа представляет интерес в связи с широкой распространенностью этого иона в системах, содержащих N и O в процессах химии высоких энергий. Г. К.

М. П.

ср. 1991, № 10

NO⁺

(cm. 36 000)

1990

теоретическое
исследование,
расчет

114: 52330z Theoretical study of the spectroscopy of the nitrosyl ion (NO⁺). Partridge, Harry; Langhoff, Stephen R.; Bauschlicher, Charles W., Jr. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(10), 7179-86 (Eng). The spectroscopy of the NO⁺ mol. was studied using multireference configuration-interaction calcs. The peak at 21.7 eV in the photoelectron spectrum of NO is assigned to the (2)³I state (c³I) and the vibrational progression centered at 23.1 eV is assigned to the diatomic (3)¹I state (B¹I). Several addnl. bound states with binding energies in excess of 1 eV are characterized in the present work. Radiative lifetimes are presented for many of the states.

C.A. 1991, 114, N6

NO⁺

от 36 000 1990.

22 Б1031. Теоретическое изучение спектроскопии NO⁺. Theoretical study of the spectroscopy of NO⁺ / Partridge Harry, Langhoff Stephen R., Bauschlicher Charles W. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 10.— С. 7179—7186.— Англ.

Методом конфигурац. вз-вия с несколькими исходными конфигурациями рассчитаны адиабатич. потенциальные кривые, спектроскопич. постоянные r_e , ω_e , $T_e(\text{NO}^+)$, $T_e(\text{NO})$ и моменты перехода для большого числа электронных состояний молекулы NO⁺. При расчете использован базис $(13s8p6d4f)/[4s3p2d1f]$ натуральных АО. Оценены времена жизни 5 нижних колебат. уровней электронных состояний $A^1\Pi$, $2^1\Sigma^+$, $2^1\Pi$, $b^3\Pi$, $w^3\Delta$, $bc^3\Delta$, $bc^3\Sigma^-$, $2^3\Delta$ и 5Π . Результаты использованы для отнесения линий в фотоэлектронном спектре NO. Так, пик при 21,7 эВ отнесен к состоянию $2^3\Pi$, а колебат. прогрессия с центром при 23,1 эВ — к диабатич. состоянию $3^1\Pi$. Предсказано существование нескольких новых связанных электронных состояний с энергией связи больше 1 эВ. В. Б. Павлов-Веревкин.

М. А.

17(4) NO

X. 1991, N 22

NO⁺

(DM 35041)

1990

Scuseria G.E., Hamilton
T.P., et al.,

kb. mex.
pacrem

J. Chem. Phys., 1990, 92,
N1, 568-573.

An assessment for the full
coupled cluster ● method in-

cluding all single, double,
and triple excitations: The
diatomic molecules LiH ,
 Li_2 , BH , LiF , C_2 , BeO , CN^+ ,
 BF , NO^+ , and F_2 .

NO⁻

1991
Boehm R.C., Zohr Lawrence;

J. Comput. Chem. 1991,
ll. n. 12, N 1, C. 119 - 125

(Cell. ● ND₃⁺; III)

NO^+

Boehm R.C., Lohr Lawrence L., 1991

J. Comput. Chem. 1991,
12, N1, C. 119-125

(all NO_3^+ ;  III)

$^{15}\text{NO}^{2+}$

1991

115: 37758x Optical spectrum of the nitrogen-15 monoxide cation. Cossart, D.; Cossart-Magos, C. (Inst. Phys. Chim. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 147(2), 471-7 (Eng). A new emission band at 2653 Å has been recorded using a special low pressure, hot cathode, magnetically confined elec. discharge through ^{15}NO vapor as a source. Assuming that this band belongs to the $\text{B}^2\Sigma^+-\text{X}^2\Sigma^+(0,0)$ transition of the $^{15}\text{NO}^{2+}$ ion, the mol. consts. deduced from the anal. agree well with those calcd. from isotopic relations applied to the corresponding values obtained for the natural species previously published.

$\text{B}^2\Sigma^+-\text{X}^2\Sigma^+$
(0-0)

M.A.

C.A. 1991, 115, N 4

NO⁺

1991

115:145345u Diode laser spectroscopy of the vibrational fundamental of nitrosyl ion(1+). Ho, W. C.; Ozier, I.; Cramb, D. T.; Gerry, M. C. L. (Dep. Phys., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Z1). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 149(2), 559-61 (Eng). Several vibrational transitions were measured for NO⁺ in a discharge using a diode laser spectrometer. The wavenumbers and mol. consts. are reported.

Koniam -
Cramb,
M.A.

C.A-1991, 115, N14

NO⁺

Am 35520

1991

114: 132693q The $b^3\Pi_r \rightarrow a^3\Sigma^+$ transition of nitrosyl ion(1+) near 6000 cm⁻¹. Huber, K. P.; Vervloet, M. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 146(1), 188-99 (Eng). Emission arising from the $b^3\Pi \rightarrow a^3\Sigma^+$ transition of NO⁺ was excited in collisions of NO mols. with helium metastable species. The 0-1 band near 6000 cm⁻¹ was recorded by Fourier transform spectrometry at an apodized resolu. of 0.05 cm⁻¹. The rotational anal. reveals a perturbation of $b^3\Pi$ ($v = 0$) by $a^3\Sigma^+$ ($v = 6$) consistent with the near-coincidence of the corresponding peaks in the photoelectron spectrum. The strength of the interaction is in satisfactory agreement with a similar perturbation of $A^1\Pi$ ($v = 0$) by $b^3\Sigma^-$ ($v = 5$).

$b^3\Pi_r - a^3\Sigma^+$

M.N.

C.A. 1991, 114, N 14

NO⁺

Ом. 35520

1991

16 Б1249. Переход $b^3\Pi_r \rightarrow a^3\Sigma^+$ NO⁺. вблизи 6000 см⁻¹. The $b^3\Pi_r \rightarrow a^3\Sigma^+$ transition of NO⁺ near 6000 cm⁻¹ / Huber K. P., Vervloet M. // J. Mol. Spectrosc.— 1991.— 146, № 1.— С. 188—199.— Англ.

В диапазоне 5650—6700 см⁻¹ измерена (фурье-спектрометр, разрешение 0,05 см⁻¹) вращат. структура полосы 0—1 перехода $b^3\Pi_r \rightarrow a^3\Sigma^+$ в спектре испускания иона NO⁺. Спектр возбуждался при столкновениях молекул NO в виде эффузионного пучка с метастабильными атомами гелия получающимися при прохождении свободной струи через коронарный разряд постоянного тока. Анализ спектра осложнялся необходимостью учитывать многочисленные возмущения вызванные вз-нем верхнего состояния $b^3\Pi$ ($v=0$) с близлежащим состоянием $a^3\Sigma^+$ ($v=6$). Значения рассчитанных молекулярных постоянных $^{14}\text{N}^{16}\text{O}^+$ (в см⁻¹): состояние $a^3\Sigma^+$ ($v=1$)— $T=x$, $B=1,326843$, $D=6,073 \cdot 10^{-6}$, $\lambda = -1,89037$, $\lambda_D = 8,7 \cdot 10^{-6}$, $\gamma = -4,498 \cdot 10^{-3}$; состояние



М.А.

X. 1991, N 16

$a^3\Sigma^+ (v=6) - T = x + 5858,3$, $B = 1,2359$, $\lambda = -1,9$; со-
 стояние $b^3\Pi_r (v=0) - T = x + 5967,3417$, $A = 69,6989$,
 $A_D = -2,011 \cdot 10^{-4}$, $B = 1,640989$, $D = 6,050 \cdot 10^{-6}$, $\lambda =$
 $= -0,0889$, $o + p + q = 1,6492$, $p + 2q = 6,96 \cdot 10^{-3}$, $q =$
 $= 1,176 \cdot 10^{-4}$. Параметры матричных элементов $\langle b^3\Pi,$
 $v=0 | H_{\text{возм}} | a^3\Sigma^+, v=6 \rangle$ описывающие вз-вне отдель-
 ных компонент указанных триплетов равны (в см^{-1})
 2,688 (α) и 0,0335 (β). В. М. Ковба

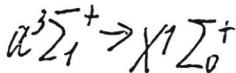


NO⁺

1991

3 Б1012. Теоретическое изучение запрещенного по спину дипольного излучательного перехода $a^3\Sigma_1^+ \rightarrow X^1\Sigma_0^+ \text{ NO}^+$. A theoretical treatment of the $a^3\Sigma_1^+ \rightarrow X^1\Sigma_0^+$ spin-forbidden dipole-allowed radiative transition in NO^+ /Manaa M. Riad, Yarkony David R. //J. Chem. Phys. —1991. —95, № 9. —С. 6562—6566. —Англ.

Проведены неэмпирич. исследования радиац. х-к запрещенного по спину дипольного перехода $a^3\Sigma_1^+ \rightarrow X^1\Sigma_0^+$ иона NO^+ . Захват заселенности спин-орбитальными состояниями симметрии $^1\pi_1$ и $^3\pi_0$ учитывался в первом порядке теории возмущений, а вз-вие $a^3\Sigma_1^+$ с близким состоянием $A^1\pi_1$ — с помощью квазивыврожденной теории возмущений. Волновые ф-ции электронных состояний рассчитаны в базисах $(8s5p2d)$ и $(9s6p3d)$ методом конфигурац. вз-вия на МО усредненного по состояниям многоконфигурац. метода ССП. Спин-орбитальное вз-ве описывалось



Х. 1993, № 3

точным микроскопич. гамильтонианом Брейта — Паули. Размерность пространства конфигураций превышала миллион. Получены спектроскопич. постоянные и дипольные моменты переходов для состояний $A^1\Sigma^+$, $a^3\Sigma^+$, $b^3\pi$ и $A^1\pi$. Радиацион. времена жизни низших колебат. уровней состояния $a^3\Sigma_1^+$ имеют порядок 0,5 с, что согласуется с эксперим. оценкой. Модель, учитывающая влияние только одного состояния $A^1\pi_1$, дает качественно правильные результаты.

А. А. Бучаченко

NO⁺

1991

8 Д87. Теоретическое рассмотрение спин-запрещенного дипольно-разрешенного перехода $a^3\Sigma_1^+ \rightarrow X^1\Sigma_0^+$ в NO⁺. A theoretical treatment of the $a^3\Sigma_1^+ \rightarrow X^1\Sigma_0^+$ spin-forbidden dipole-allowed radiative transition in NO⁺ / Манаа М. R., Yarkony D. R. // J. Chem. Phys.— 1991.— 95, № 9.— С. 6562—6566.— Англ.

Неэмпирическим методом рассчитаны радиационные времена жизни для спин-запрещенного дипольно-разрешенного перехода $a^3\Sigma_1^+ \rightarrow X^1\Sigma_0^+$ в NO⁺. Этот переход оказывается возможным в результате возмущений, индуцированных спин-орбитальным взаимодействием, которое рассматривалось в приближении Брейта — Паули. Для переходов $(a^3\Sigma^+, v) \rightarrow X^1\Sigma^+$ получены значения времен жизни: 455, 467, 478, 488 и 495 мс для $v=0, 1, 2, 3, 4$ соответственно. Эти результаты согласуются с эксперим. значением $\tau=530(+300, -100)$ мс.

М. П.



ФР: 1992, № 8

NO⁺

[Om. 35798]

1991

Takahashi M., Ozeki H.,

Spencer Kimura K.,

Chem. Phys. Lett. 1991,

181, N2-3, 255-258.

A new high  - resolution

threshold photoelectron
analyzer: observation of
rotational structure of
 NO^+ cation.

NO^+

[Dm. 35347]

1991

(X^{1Σ⁺})

Nytenbach T., Beggs C.,
et al.,

Chem. Phys. Lett.,
1991, 177, N3, 239-246.

NO⁺

1991

115: 142801d Potential functions of excited states for nitrosyl ion (NO⁺). Xu, Zongrong; Rian, Zhiyue (Huaxi Med. Univ., Chengdu, Peop. Rep. China 610041). *Wuli Huaxue Xuebao* 1991, 7(3), 342-4 (Ch). A potential energy function has been derived for 10 excited states of NO⁺, which can be represented as $V(r) = -D_e(1 - (1 + \alpha(r) \exp(\gamma(r)W(r) + D_e + \Delta T_e))$. The cubic force consts. evaluated from this function, are in agreement with the spectroscopic data. Therefore, this simple function can be successfully used for most of the excited states for NO⁺.

номери.
кривые,
таблицы

C.A. 1991, 115, N 14

NO⁺

1992

117: 220420m Investigation of nitrogen oxide ion (NO⁺) ...
siver fluoride ions (SF⁺ and SF²⁺) by means of translational
energy spectroscopy. Hamdan, M. (Glaxo Res. Lab.
Verona, Italy). *Collision Processes Ion, Positron, Electron* ...
Beams Matter, Proc. Lat. Am. Sch. Phys. 1991 (Pub. 1992).
(Eng). Edited by De Azevedo e Souza, Ana Cecilia. World
Singapore, Singapore. The electronic states of NO⁺, SF⁺ and
ions were investigated by relatively high resolu. (0.1 eV FWHM)
translational energy spectroscopy (TES). The spectra pertaining
the two singly charged ions display a no. of excitation and
de-excitation features which can be attributed to transitions between
the ground and a no. of low lying excited electronic states. The
of SF²⁺ scattered by H shows no such features, however the
induced dissocn. of the same ion clearly indicates that such a
involves more than one dissociative electronic state.

(МЕРМОН.
СВ.СМОН.)

(1) X

SF⁺, SF²⁺



C.A. 1992,

117, N22

NO²⁺

1992

116: 262857u Theoretical potential curves for the A²II and X²Σ⁺ states of oxonitrogen(2+) (NO²⁺) and an experimental search for the A-X transition. Pettersson, L. G. M.; Siegbahn, P. E. M.; Brostroem, L.; Mannervik, S.; Larsson, Mats (Inst. Theor. Phys., Univ. Stockholm, S-113 46 Stockholm, Swed.). *Chem. Phys. Lett.* 1992, 191(3-4), 279-86 (Eng). Potential curves for the X²Σ⁺ and A²II states of NO²⁺ were calcd. using large ANO basis sets including g functions and CASSCF/second-order ACPF methods. On the basis of these calcns. resonant photodissocn. of NO²⁺ via the A²II-X²Σ⁺ transition is searched for by means of a collinear fast ion beam laser app. The failure to observe the A-X transition is discussed.

X²Σ⁺, A²Π,
nomeris. p-III,
neop. p-IV

C.A. 1992, 116, N26

NO^{2+}

1994

Dawber G., McConkey
A.G. et al.

пример-
конкрет

J. Phys. B. 1994. 27,
N 11. C. 2191-2209.

(ср.  N_2^+ ; III)

NO⁺

1994

120: 280794h A theoretical description of the $b^3\Pi \rightarrow a^3\Sigma^+$ transition of NO⁺. Hutter, Stephan J.; Hess, Bernd A.; Marian, Christel M.; Samzow, Reinhard (Inst. Phys. Theor. Chem., Univ. Bonn, D 53115 Bonn, Germany). *J. Chem. Phys.* 1994, 100(3) 5617-25 (Eng). MR-CI methods were used to calc. the potential-energy curves for the ground state and several low-lying excited electronic states of the NO⁺ ion. Spectroscopic parameters were obtained in good agreement with existing exptl. data. To establish a one-to-one correspondence between the exptl. known term energies of the recently detected $b^3\Pi \rightarrow a^3\Sigma^+$ transition (K. H. Huber and M. Vervloet, 1991) and ab-initio data, it was necessary to include explicitly spin-orbit and rotational coupling. Spin-orbit matrix elements were evaluated by using the microscopic Breit-Pauli Hamiltonian. The off-diagonal coupling matrix elements, $\langle b^3\Pi | H_{so} | a^3\Sigma^+ \rangle$ and $\langle b^3\Pi | L | a^3\Sigma^+ \rangle$, were found to depend strongly on the internuclear sepn. The calcd. vibrationally averaged fine-structure parameter of the $b^3\Pi$ state for $v = 0$ (67.21 cm⁻¹) was found to be in very good agreement with the value detd. exptl. (69.699 cm⁻¹).

$b^3\Pi \rightarrow a^3\Sigma^+$
(теор. расчет)

C.A. 1994, 120, N 22

NO²⁺

1994

Mercouris Th., Petsalakis I.,
et al.,

M.N. J. Phys. B. - 1994, 27, N 16,
p. 519-524.

P.N.X. N 17, 1995, 17 5 1235

NO²⁺

1995

8 Б139. Точные неэмпирические функции потенциальной энергии для двухзарядных двухатомных молекул. Accurate ab initio potential energy functions for doubly charged diatomics / Bennett F. R. // J. Chem. Phys. — 1995. — 103, № 9. — С. 3613—3620. — Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в полном активном пространстве с учетом КВ по отношению к нескольким исходным конфигурациям в корреляционно-согласованных поляризованных базисах от двух- до пятиэкспонентного для валентной оболочки рассчитаны потенциальные кривые для ряда экспериментально исследованных состояний NO²⁺ и N₂²⁺. Оценены предельные значения, отвечающие полным базисам, и получены очень точные величины спектроскопич. постоянных. Библ. 42. Н. Л.

потенц.
кривые,
теор. расчет

⑦

X. 1996, N 8

NO²⁺

1995

123: 179832f Accurate ab initio potential energy functions for doubly charged diatomics. Bennett, Frederick R. (Inst. Physikalische Chemie, Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1995, 103(9), 3613-20 (Eng). Potential energy functions for a set of exptl. characterized electronic states of NO²⁺ and N₂²⁺ have been calcd. using a series of correlation consistent basis sets ranging from cc-pVDZ through to cc-pV5Z. By exploiting the convergent properties of the correlation consistent basis sets, complete basis set limit approxns. of each calcd. point on the potential energy surfaces can be extrapolated in a simple fitting procedure. The resultant complete basis set approximated potential energy functions are able to yield very accurate spectroscopic consts. outperforming the pure ab initio potentials in reproducing exptl. detd. data.

ab initio
paren



N₂²⁺

(1)



C.A. 1995, 123, N 14

1995

F: NO+2

P: 3

8B139. Точные неэмпирические функции потенциальной энергии для двухзарядных двухатомных молекул. Accurate ab initio potential energy functions for doubly charged diatomics / Bennett F. R. // J. Chem. Phys. - 1995. - 103, N 9. - С. 3613-3620. - Англ.

эмпирическим методом ССП МО ЛКАО в полном активном пространстве с учетом КВ по отношению к нескольким исходным конфигурациям в корреляционно-согласованных поляризованных базисах от двух- до пятиэкспонентного для валентной оболочки рассчитаны потенциальные кривые для ряда экспериментально исследованных состояний $\text{NO}\{2+\}$ и $\text{N}[2]\{2+\}$. Оценены предельные значения, отвечающие полным базисам, и получены очень точные величины спектроскопич. постоянных. Библ. 42.

Р.Ж.Х. N.8, 1996.

NO²⁺

1996

11Б132. Точное неэмпирическое исследование спектроскопических характеристик и динамики $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ -системы NO^{2+} . A large-scale ab initio study on the spectroscopy and dynamics of the $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ system of NO^{2+} / Bennett Frederick R. // Chem. Phys. Lett.— 1996 .— 250, № 1 .— С. 40—46 .— Англ.

Неэмпирическим методом ССП в расширенных базах и с учетом электронной корреляции в рамках различных вариантов изучены спектроскопич. характеристики и динамика $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ -системы NO^{2+} . Объяснены причины неудовлетворительных результатов эксперим. спектроскопич. исследования системы и предложена схема необходимых экспериментов. В. Л.

М.А.

X. 1997, № 11

NO²⁺

1996

124: 214661u A large-scale ab initio study on the spectroscopy and dynamics of the A ²Π-X ²Σ⁺ system of NO²⁺. Bennett, Frederick R. (Institut fuer Physikalische Chemie der Universitaet Basel, Klingelbergstrasse 80, CH-4056 Basel, Switz.). *Chem. Phys. Lett.* 1996, 250(1), 40-6 (Eng). The results of a large scale ab initio study on the spectroscopy and dynamics of the A ²Π-X ²Σ⁺ system of NO²⁺ are presented. The 2-fold objectives are to provide an explanation as to why previous high-resoln. spectroscopic studies on this system have failed, and to serve as a guide for future exptl. studies of this system.

A²Π-X²Σ⁺

C. A. 1996, 124, N 16

NO⁺

DM-38532

1996

Wulfsv A.L.,

констан.
распада,
консерв.

Chem. Phys. Lett.,
1996, 263, 79-83.

NO -

1996

Ki, Kiangzhy,
Paldus, Josef

миср -
расчет
некрасн.
Ессмелт

J. Chem. Phys., 1996;
104 (23), 9555-62.

F: NO+

P: 3

131:176722 Rotational-resolved pulsed field
ionization photoelectron stud NO+(a 3.SIGMA.+,v+=0-
16) in the energy range of 15.6-18.2 eV.

Jarvis, G. Song, Y.; Ng, C. Y. (Chemical

Science Division, Lawrence Berkeley National Laboratory,
Berkeley, CA 4720, USA). J. Chem. Phys., 111(5), 1937-
1946 (English) 1999 The authors have obtained
rotationally resolved pulsed field ionization
photoelectron (PFI-PE) spectra of NO in the energy range
of 15.6-18.2 eV, covering ionization transitions of
NO+(a 3.SIGMA.+,v+=0-16,J+) .ltwarw. N
2.PI.3/2,1/2,v''=0,J''). The PFI-PE bands for NO+(a
3.SIGMA.+,v+=1-5,7-1 14,16) obtained in this expt.
represent the 1st rotationally resolved spectroscopic

(of. 39787)

1999

data for these states. The simulation of these PFI-PE band provides accurate mol. consts. for NO+(a 3.SIGMA.+, v+=0-5, 7-10, 12-14, 16), including ionization energies, vibrational consts. ($\omega_e = 1295.2 \pm 1$ cm⁻¹, $\omega_e x_e = 15.198 \pm 0.002$ cm⁻¹), and rotational consts. ($B_e = 1.3501 \pm 0.0070$ cm⁻¹, $\alpha_e = 0.0206 \pm 0.0001$ cm⁻¹). As obs the PFI-PE study of NO+(X 1.SIGMA.+), this expt. reveals a generally incr trend for the max. ΔJ value and intensities of higher .

NO^+

1999

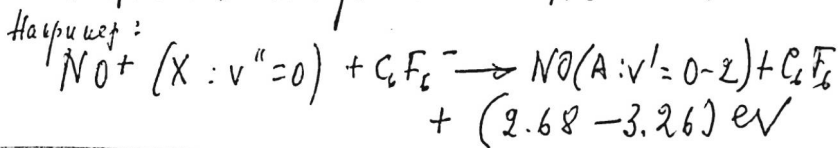
Masaru Tsuji

"The Influence of Vibration Excitation of NO^+
($X'\Sigma^+; v''$) on the Formation of NO^* by the
 $\text{NO}^+ + \text{C}_6\text{F}_6^-$ Neutralization Reaction at
Thermal Energy" Bull. Chem. Soc. Jpn 72,
227-233 1999

Привести ΔH° реакции, оценить 4) EA C_6F_6
(0.52 eV), колеб. расщ. NO ($A: v' = 0-2$)
 NO ($C: v' = 0$)
 NO ($D: v' = 0, 1$)

и ионизационных смещ. констант NO и NO^+

Например:



F: NO+

P: 3

1999

131:108516 Radiative lifetime measurement of the a 3.SIGMA.+ metastable state of NO+ using a new type of electrostatic ion trap. Wester, R.; Bhushan, K. G.; Altstein, N.; Zajfman, D.; Heber, O.; Rappaport, M. L. (Department of Particle Physics, Weizmann Institute of Science, Rehovot 76100, Israel). J. Chem. Phys., 110(24), 11830-11834 (English) 1999 A new type of ion trap is used to measure the radiative lifetime of the NO+(a 3.SIGMA.+) metastable state. The ion trap is designed to store ion beams with an energy of a few keV and is well suited for the study of metastable states. The measured value for the radiative lifetime is $\tau = 760 \pm 30$ ms, in good agreement with the last exptl. values of Calama and Yoshino [J. Chem. Phys. 101, 9480(1994)], and with the theor. value of Kuo et al. [J. Chem. Phys. 92, 4849(1990)].

C.A. 1999, 131

NO⁺

DM 41 126

2001

135: 310273s Rotational-resolved pulsed field ionization-photoelectron study of NO⁺ ($A'^1\Sigma^-$, $v^+ = 0-17$) in the energy range of 17.70-20.10 eV. Song, Y.; Ng, C. Y.; Jarvis, G. K.; Dressler, R. A. (U.S. Department of Energy and Department of Chemistry, Ames Laboratory, Iowa State University, Ames, IA 50011 USA). *J. Chem. Phys.* 2001, 115(5), 2101-2108 (Eng), American Institute of Physics. Partially rotationally resolved pulsed field ionization-photoelectron (PFI-PE) spectra were obtained of NO in the energy range of 17.70-20.10 eV, covering ionization transitions of NO⁺ ($A'^1\Sigma^-$, $v^+ = 0-17$, J^+) $\rightarrow$ NO ($X^2\Pi_{3/2,1/2}$, $v'' = 0$, J''). The PFI-PE bands for NO⁺ ($A'^1\Sigma^-$, $v^+ = 0-17$) obtained here represent the 1st spectroscopic data that allow the direct detn. of rotational consts. for these states. As in previous studies, the PFI-PE bands are simulated using the Buckingham-Orr-Sichel model as an empirical scheme to derive reliable spectroscopic consts. The simulation, together with comparison with previous He I photoelectron

check $A'^1\Sigma^-$
We, Wele 49.

C.A. 2001, 135, N21

data, also provided information on intensity enhancements of PFI-PE bands. Accurate spectroscopic consts. for NO^+ ($A'^1\Sigma^+$, $v^+ = 0-17$) obtained in the present study include ionization energies, vibrational consts. ($\omega_e = 1272.03 \pm 1.45 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e x_e = 11.924 \pm 0.188 \text{ cm}^{-1}$, and $\omega_e y_e = -0.059 \pm 0.007 \text{ cm}^{-1}$), and rotational consts. [$B_e = 1.3562 \pm 0.0024 \text{ cm}^{-1}$, $\alpha_e = 0.01780 \pm 0.00061 \text{ cm}^{-1}$, and $\gamma_e = -(1.574 \pm 0.328) \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$]. The simulation indicates that continuum photoelectron states can be formed with orbital angular momenta $l \leq 5$, which corresponds to the max. total angular momentum transfer of $|\Delta J| = 13/2$. Since the dominant rotational branches obsd. are $\Delta J = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2, \pm 7/2$, and $+9/2$, continuum photoelectron states are predominantly produced in $l = 0-3$ in the threshold photoionization of NO ($X^2\Pi_{3/2,1/2}$) to form NO^+ ($A'^1\Sigma^+$, $v^+ = 0-17$).