

H2S-note

H_2S^+

Marrison J.D. 1951.

(7)

Bcp-3365-I

"J. Chem. Phys"

1951, 19, N 10,

1305-8

H_2S^+

Bq - 5486 - III

v 1953

Lindholm E.

(γ) (Research Notes)

p-1068-70.

Ionization and Fragment.
of molecules...

H_2S^+

Twist D.C. Mc Dowell C.A. 1958

Can. J. Chem., 1958, 36, 39.

Возбужденные состояния
ионов.

(ан. HF^+)

III-6845-69
1392-5484-III

H_2S^-

1966

2 Д189. Получение и свойства отрицательного иона H_2S^- . Bennett J. E., Mile B., Thomas A. Preparation and properties of the H_2S negative ion. «Chem. Commun», 1966, № 7, 182—184 (англ.)

При исследовании взаимодействия Na_2CO_3 и K_2CO_3 с H_2S (D_2S) наблюдалось образование иона H_2S^- (D_2S^-). Полосы поглощения иона H_2S^- обнаружены при $77^\circ K$ в спектре отражения продуктов взаимодействия в диапазоне 3000—11 000 Å. Спектр ЭПР показал, что донором электронов при образовании иона H_2S^- являются атомы щелочных металлов. Анализ спектров показал, что в системах, содержащих H_2S^- и D_2S^- имеет место взаимодействие электронов с двумя эквив. протонами или дейтронами. Предполагается, что в твердом H_2S и D_2S орбитали непарных электронов ограничивают свое действие только одной молекулой, образующей H_2S^- , D_2S^- . Библ. 12 назв. И. Г. ...

ф. 1967. 29

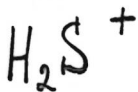
H_2S^-

1966

1 Б89. Получение и свойства отрицательного иона H_2S^- . Bennett J. E., Mile B., Thomas A. Preparation and properties of the H_2S^- negative ion. «Chem. Commun», 1966, № 7, 182—184 (англ.)

Исследованы спектры поглощения в видимой и УФ-области и спектры ЭПР ионов H_2S^- и D_2S^- , образующихся при р-ции атомов K и Na с H_2S и D_2S при 77° K. Спектр поглощения анионов обнаруживает широкую полосу в области 7000—10 600 Å и узкую полосу ~4000 Å. Результаты сравниваются с полученными ранее для H_2O . Полагают, что в то время как для ионов H_2O^- орбита неспаренного электрона распространяется на несколько молекул тв. H_2O , в тв. H_2S и D_2S только одна молекула образует отрицат. ион вследствие низких энергий вакантных 3d-орбит серы и малого дипольного момента тв. H_2S и D_2S . Ионы H_2S^- и D_2S^- устойчивы при т-рах 77—110° K. Я. Кимельфельд

X. 1967. 1

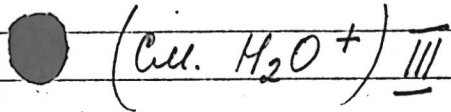


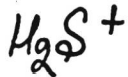
Fiquet - Fayard F., 1966

Guyon P. M.

Mol. Phys., 11, N1, 17

Преобразование и преддиссоциация во время диссоциации трехатомных молекул под действием электронного удара.



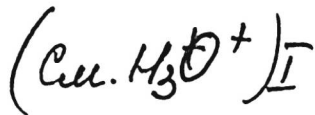


(AP) = 12, 41;
14, 14

Haney M. A.,
Franklin J. K.

1969

J. Chem. Phys.,
1969, 50, ~ 5, 2028



1970

 H_2S^+

Grotom.

CCOmp,

(y)

(148667w) High resolution photoelectron spectrometry of hydrogen sulfide and hydrogen selenide. Delwiche, Jacques; Natalis, Paul; Collin, Jacques E. (Inst. Chim., Univ. Liege, Liege, Belg.). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* 1970, 5(5-6), 443-55 (Eng). The He, Ne, and Ar high resolu. photoelectron spectra of H_2S and H_2Se were investigated. The adiabatic ionization energy corresponding to 2B_1 , 2A_1 , and 2B_2 states of H_2S^+ and H_2Se^+ were measured as well as values of the vibrational frequencies involved in the transitions from the neutral ground state 1A_1 to these 3 ionic states. A sudden loss of vibrational structure in the 2nd band of both compds. is interpreted as being due to a predissocn. process leading to S^+ or Se^+ ion formation. A cross section variation with photon energy for the transition to upper vibrational levels of the 2B_1 state, or autoionizing states as intermediate steps, is invoked to account for the extensive vibrational structure of the Ar spectrum of the 2 compds.

RCBBQ

148667w
 148667w
 148667w

(11) H_2Se^+

C.A. 1971. 74.26.

X

00716.8162

Ph. Ch XII 271

H₂S⁺ (vi, J, m. u) 1970

96201

B9-XII-271

Delwiche J., Natalis P. Photoelectron
spectrometry of hydrogen sulfide.

"Chem. Phys. Lett.", 1970, 5, N 9,

564-566

(англ.)

КНИЖНОЕ
ОПТИЧ.
0153 ПИФ

137 138

144

ВИНИТИ

H_2S^+

1971

16 Б131. Сравнение фотоэлектронных и оптических данных для ион-радикала H_2S^+ Dixon R. N., Duxbury G., Horani M., Rostas J. The H_2S^+ radical ion. A comparison of photoelectron and optical spectroscopy. «Mol. Phys.», 1971, 22, № 6, 977—992 (англ.)

Эмиссионный спектр в районе 4000—5000 Å, возникающий при возбуждении H_2S медленными электронами, идентифицирован как спектр иона H_2S^+ вследствие совпадения колебательной структуры оптической и фотоэлектронного спектров. Потенциальный барьер между изогнутой и линейной структурами равен 4600 см^{-1} , равновесное расстояние $H-S$ 1,358 Å, валентный угол $92^\circ 54'$. Рассмотрены правила отбора для колебательных переходов в фотоэлектронных спектрах. В. И. Нефедов

УСМ.

Стр-ра

X. 1972. 16

105972r H_2S^+ radical ion. Comparison of photoelectron and optical spectroscopy. Dixon, R. N.; Duxbury, G.; Horani, M.; Rostas, J. (Dep. Theor. Chem., Univ. Bristol, Bristol, Engl.). *Mol. Phys.* 1971, 22(6), 977-92 (Eng). The emission spectrum between 4000 and 5000 Å obtained by Horani, Leach and Rostas by controlled-energy electron excitation of H_2S belongs to H_2S^+ . The decrease and subsequent increase of the bending vibrational intervals in the $\tilde{A}^2A_1$ state of H_2S^+ and D_2S^+ indicates a barrier to linearity of approx. 4600 cm^{-1} . A preliminary rotational anal. of the spectrum leads to the following mol. parameters for the ground state: $r_0'' = 1.35_8$ Å, valence angle $92^\circ 54'$. A detailed comparison of the optical and photoelectron spectra has been made and selection rules for the photoelectron spectra are presented. To understand the vibronic patterns of both types of spectra it is necessary to consider in detail Renner-Teller vibronic interaction. A barrier to linearity in the 2A_1 state of H_2S^+ alone is insufficient to account for the interesting change in the spectrum of the $^2A_1 - ^1A_1$ transition at energies corresponding to the potential max.

C.A. 1972. 76. 18

H_2S^+

1971.

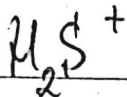
Herzberg G.

"Quarterly Rev."

1971, 25 v2

201-222

article 1687



1972

160610w Calculation of the vibrational envelope and bond angle in the first excited state of H_2S^+ from the photoelectron spectrum of hydrogen sulfide. Durmaz, S.; King, G. H.; Suffolk, R. J. (Sch. Mol. Sci., Univ. Sussex, Brighton, Engl.). *Chem. Phys. Lett.* 1972, 13(3), 304-6 (Eng). The barrier to linearity of H_2S was detd. as 4650 cm^{-1} from the position of min. vibrational spacing of the dominant progression of the 2nd band (at 2600 cm^{-1}) in the high-resolution photoelectron spectrum. Anal. of the vibrational spacing and Franck-Condon intensities gave a calcd. barrier of 5020 cm^{-1} , an equil. bond angle of 120° for the 1st excited state of H_2S^+ , a force const. of $1.4 \times 10^5 \text{ dyne/cm}$, and a zero-point energy of 540 cm^{-1} . The vibrational structure was retained after the max., but was more closely spaced.

Chem. Phys. Lett.

50

Chem. V.

Good. Chem.

C.A. 1972. 76. 26

H_2S^+

1972

6 Д312. Вращательный анализ электронного спектра излучения ион-радикала H_2S^+ . Duxbury G., Nogani M., Rostas J. Rotational analysis of the electronic emission spectrum of the H_2S^+ ion radical. «Proc. Roy. Soc. London.», 1972, A331, № 1584, 1109—1137 (англ.)

В области 400—500 нм фотографически зарегистрирован спектр излучения ион-радикалов H_2S^+ (I) и D_2S . Возбуждение осуществлялось с помощью техники скрещенных молекулярных пучков при энергии электронного источника 100 эв. Найдено, что спектр принадлежит к электронному переходу $^2A_1 \rightarrow ^2B_1$ в молекуле I, аналогичному переходу в молекулах NH_2 , PH_2 и AsH_2 . Проведен детальный вращательный анализ спектра и определена геометрич. структура основного и возбужденного электронного состояния I. Даны значения констант и проведено их сравнение с теоретически вычисленными. Библ. 32.

П. Ш.

ш.и

Ф. 1973. № 6

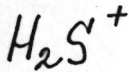
H_2S^+

1972

170863r Rotational analysis of the electronic emission spectrum of the H_2S^+ ion radical. Duxbury, G.; Horani, M.; Rostas, J. (Dep. Theor. Chem., Univ. Bristol, Bristol, Engl.). *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A* 1972, 331(1584), 109-37 (Eng). The emission spectra of H_2S^+ and D_2S^+ occurring in the 400-500-nm region were analyzed in detail. In the lower 3B_1 state both mols. are near oblate asymmetric tops, and from the rotational consts. an SH(SD) bond length of 0.135₈ nm and an HSH(DSD) angle of 92.9° were obtained. In the 3A_1 upper state of both mols. the equil. angle was ~127° and the SH(SD) bond length was 0.136₆ nm. The barrier to linearity in the excited state was ~4400 cm⁻¹ and transitions were obsd. from levels both below and above the barrier. The 2 combining states were derived from an electronic Π state which was split by static Renner interaction. The complicated ro-vibronic structure of the excited state was interpreted in terms of a model in which both the dynamic Renner effect and spin-orbit interaction are included. The 3A_1 state of H_2S^+ played an intermediate role between the analogous high-barrier mols. such as AsH_2 , and the low barrier mols. such as NH_2 .

(95. chem)
(u. h.)

C. A. 1972, II, N26.



(F)

8 Б119. Кинетическая энергия при диссоциации некоторых простых молекулярных ионов. Вода и сероводород. Jones E. G., Beynon J. H., Cooks R. G. Kinetic energy release in the dissociation of some simple molecular ions. Water and hydrogen sulfide. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 8, 3207—3212 (англ.)

Применена методика спектроскопии кинетич. энергий для изучения образования ионов S^+ из M^+ иона сероводорода и O^+ из M^+ иона воды. Образование S^+ в результате распада H_2S^+ идет по мономолек. р-ции преддиссоциации 1-го возбужденного состояния через состояние отталкивания $^4\text{A}_2$. В области классич. переходов эта р-ция протекает быстро в масштабе времени масс-спектрометрирования, но туннельные переходы через барьер происходят сравнительно медленно и дают метастабильные ионы, к-рые распадаются с переходом всей потенц. энергии в кинетич. Возбуждение основного состояния H_2S^+ путем столкновений приводит к возбужденным ионам, к-рые быстро диссоциируют через поверхность отталкивания $^4\text{A}_2$ и дают существенно возбужденную

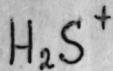
1972.

Х. 1973 № 8.

($v=2$) H_2 . Эта р-ция происходит с превращением 30% всей имеющейся в наличии энергии в энергию поступательного движения продуктов. Теплота образования S^+ , определенная исходя из потенциала его появления, требует только незначительной коррекции на избыточную энергию терма, связанную с разницей потенциальных энергий между областью перехода и основным состоянием продуктов, поскольку Пв отталкивания необычно плоская. Ионы H_2O^+ из основного состояния в результате столкновений возбуждаются и, теряя 22 ± 4 эв кинетич. энергии, приходят к состояниям с большой энергией возбуждения, к-рые приводят сразу к O^+ . (2D или

2P) и колебательно возбужденным H_2 . Измерения потенциалов появления не обеспечивают достаточно точной идентификации продуктов из-за термов с избытком энергии. Полученные результаты противоречат ранее сделанным выводам о том, что фрагментация под электронным ударом приводит к двум несвязанным атомам водорода.

Ю. В. Денисов



м.ч
цел.

Х. 1973
N 12.

12 В123. Вращательный анализ электронного спектра
испускания ион-радикала H_2S^+ . Duxbury G., Ho-
gani M., Rostas J. Rotational analysis of the electro-
nic emission spectrum of the H_2S^+ ion radical. «Proc.
Roy. Soc. London», 1972, A331, № 1584, 109—137 (англ.)

Исследованы спектры испускания H_2S^+ (I) и D_2S^+
(II) в области 400—500 нм, возбуждавшиеся с помощью
техники пересекающихся пучков, в к-рой коллимирован-
ный поток газа (H_2S или D_2S) возбуждался пучком
электронов с энергией ~ 100 эв. Проведен вращательный
анализ наблюдавшихся полос в спектрах испускания I
и II. При этом в случае основного электронного состоя-
ния X^2B_1 использовался гамильтониан нежесткой моле-
кулы с учетом центробежной поправки второго порядка
и членов, ответственных за спин-вращательное взаимо-
действие, а в случае возбужденного электронного со-
стояния $\tilde{A}$, 2A_1 использовался гамильтониан вида
 $H = H^{(2)}_{\text{bend}} + H_{\text{evr}} + H_r(b, c) + H_{\text{so}}$, где $H^{(2)}_{\text{bend}}$ — га-
мильтониан, содержащий координату большой амплиту-
ды θ и вращение вокруг оси α , $H_r(b, c)$ — вращатель-
ный гамильтониан для степеней свободы, для к-рых
вращательные постоянные и постоянные спин-орбиталь-
ного взаимодействия слабо зависят от координаты дви-
жения с большой амплитудой, H_{evr} — гамильтониан

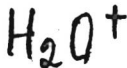
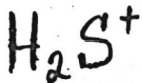
1973

электронно-колебательного взаимодействия, P_{so} — мильтоннан спин-орбитального взаимодействия. Определены и затабулированы молек. постоянные I и II: колебательные постоянные в состоянии $\tilde{X}^2B_1 - \omega_2^0 = 1164,65$ (I), $841,4 \text{ см}^{-1}$ (II); $X_{22}^0 = -5,65$ (I), $-2,8 \text{ см}^{-1}$ (II); величины термов Тоно в состоянии $\tilde{A}^2A_1$ для I ($0 \leq v \leq 7$) и II ($3 \leq v \leq 9$); вращательные постоянные и постоянные центробежного искажения I и II в состоянии $\tilde{X}^2B_1 (V'' = 0, 1, 2)$; вращательные постоянные в состоянии $\tilde{A}^2A_1$ для I ($2 \leq V \leq 7$) и II ($3 \leq V \leq 9$); постоянные спин-вращательного взаимодействия в состоянии $X(^2B_1)$ для I ($V_2'' = 0, 1, 2$) и II ($V_2'' = 0$). В состоянии X^2B_1 молекулы I и II являются почти сплюснутыми асимм. волчками, для к-рых из вращательных постоянных определена длина связи $r[S-H(S-D)] = 0,135_8 \text{ нм}$ и $\angle HSH(DSD) = 92,9^\circ$. В состоянии $\tilde{A}^2A_1$ $r = 0,136_9 \text{ нм}$ и $\angle HSH(DSD) \approx 127^\circ$. Для описания слож. I и II имеют геометрич. параметры: $r(S-H(S-D)) =$ ного вращательно-колебательно-электронного взаимодействия в состоянии $\tilde{A}^2A_1$. I и II оказалось также необходимым учесть динамич. эффект Реннера. Два электронных состояния 2A_1 и 2B_1 I и II коррелируют с двумя компонентами состояния $^2\Pi$ линейной молекулы. Оценена величина барьера перехода в линейную форму. I и II в состоянии $\tilde{A}^2A_1 \sim 4400 \text{ см}^{-1}$. А. П. Александров

1974

X 3-5167

BP-XI-4075



20 Б21. Расчеты электронного строения H_2S^+ и H_2O^+ неэмпирическим методом МО. Sakai H., Yamabe S., Yamabe T., Fukui K., Kato H. Ab initio MO calculations on the electronic structures of H_2S^+ and H_2O^+ . «Chem. Phys. Lett.», 1974, 25, № 4, 541—545 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в миним. базисе STO-3Г проведены расчеты электронного строения H_2S^+ (I) и H_2O^+ (II). Длины связей были фикс-

Электр.
Строение
расчет

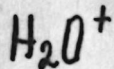
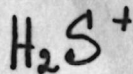
(+1)

B

X. 1974. N20

рованы и приняты равными 1,336 Å для I и 1,0 Å для II. Углы θ между связями варьировались. Расчеты проводились для 2B_1 , 2A_1 и 2B_2 состояний обоих катион-радикалов. Предв. расчеты показали, что вклад кватерной компоненты в волновую функцию неограниченного метода Хартри—Фока (НХФ) невелик, на основании чего пользовались непосредственно значениями энергии $E_{\text{НХФ}}$ без аннигиляции кватерной компоненты. На основе рассчитанных потенциальных кривых определены равновесные углы, энергии электронных 0—0-переходов, энергетич. барьеры по отношению к переходу в линейную форму, силовые константы и частоты деф. колебаний. Для равновесных значений θ рассчитаны электронные и спиновые заселенности, а также диаграммы распределения спиновой плотности.

И. Абронин



номенк.
номерн.
расшир.

45-5167

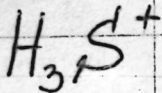
B91-X1-4045

1974

29863s/ Ab initio MO calculations on the electronic structures of hydrogen sulfide(+) (H_2S^+) and water(+) (H_2O^+) ions. Sakai, H.; Yamabe, S.; Yamabe, T.; Fukui, K.; Kato, H. (Fac. Eng., Kyoto Univ., Kyoto, Japan). Chem. Phys. Lett. 1974, 25(4), 541-5 (Eng). Ab initio MO calens. for the potential-energy curves of H_2S^+ and H_2O^+ were done to obtain theor. descriptions of the electronic structures and geometries of these systems. The results agree satisfactorily with experiment and show that both radicals are very similar both in geometry and in electronic structure.

C.A. 1974. 81. NY

(+1)



Электр.
структ.

Х. 1975
N 5

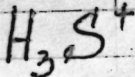
1974

УДК 542. Неэмпирический расчет электронного строения и барьера инверсии H_3S^+ . Yamabe Tokio, Aoyagi Tatsuhiro, Nagata Shinichi, Sakai Hideki, Fukui Kenichi. Ab initio calculation of the electronic structure and the barrier to pyramidal inversion for H_3S^+ . «Chem. Phys. Lett.», 1974, 28, № 2, 182—185 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе ОСТ-3ГФ исследовано электронное строение H_3S^+ (I). Равновесный валентный угол $\text{H}-\text{S}-\text{H}$ оценен в 96° , длина связи $\text{S}-\text{H}$ в 1,345 А (опыт для H_2S $92^\circ 14'$ и 1,336 А). Барьер пирамидальной инверсии I и сродство к протону H_2S оценены в 34,8 и 225,05 ккал/моль. Полученные результаты сопоставлены с лит. данными для родственных систем SiH_3^- , PH_3 , NH_3 , H_2S , H_3O^+ , H_2O . Показано, что в I электро-статич. отталкивание меньше, чем в H_3O^+ , что является причиной непланарности I в отличие от H_3O^+ . Отмечено, что при введении в I электронодонорных заместителей барьер инверсии должен понизиться.

В. Л. Лебедев

1974



Уо, геом.
• 1

3 Д211. Неэмпирические расчеты электронного строения и барьера пирамидальной инверсии H_3S^+ . Yama-be Tokio, Aoyagi Tatsuhiro, Nagata Shinichi, Sakai Hideki, Fukui Keiichi. Ab initio calculation of the electronic structure and the barrier to pyramidal inversion for H_3S^+ . «Chem. Phys. Lett.», 1974, 28, № 2, 182—185 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в миним. базисе слэтеровских ф-ций, каждая из которых аппроксимируется тремя гауссовскими ф-циями ОСТ-3Г, исследовано электронное строение H_3S^+ в основном состоянии. Приведена полная оптимизация геометрии. Найдено, что наиболее стабильной является пирамидальная форма (C_{3v}). ($r_{\text{SH}} = 1,345 \text{ \AA}$, $\angle \text{HSH} = 96^\circ$). Барьер пирамидальной ин-

Ф. 1975 №3

версии ($C_{3v} \rightarrow D_{3h}$ (плоская форма)) равен 34,8 ккал/моль. Значение сродства к протону для H_2S получилось равным 225,05 ккал/моль, а величины зарядов на атомах H и S 0,15 и 0,55 (C_{3v}) соответственно (0,214 и 0,358 (D_{3h})). Проведено исследование модельных соединений AS^+ , где A — водородоподобный атом с зарядом ядра, меняющимся от 0,9e (электронно-донорный заместитель) до 1,1e (электроотрицательный заместитель). Показано, что барьер инверсии меняется от 29 до 41,5 ккал/моль, заряд на атоме A уменьшается от 0,216 до 0,083, а на атоме S возрастает от 0,349 до 0,751. Полученные результаты согласуются с эксперим. данными.

В. А. Корсунов

$H_2S^{\pm}$

Hinckliffe A.

1975

Кб. мех.
расчет
М.П.

1486
XII

J. Mol. Struct., 1975,
27, No, 329-334.

См BH₃⁻ III

60326.9
Ch, Ph, TC

60326.9

SH₂, SH₂⁺, SH₂⁻ 1975
*4-11869

Kari Roy E., Csizmadia Imre G. *4-11869

A systematic ab initio LCAO-MO-SCF study of the ionization potentials, electron, proton, hydrogen and hydride affinities of SH_n molecules and ions. "Can. J. Chem." 1975, 53, N 24, 3747-3756 (см. SH₂; III)
(англ. дез. моран.)

562 567 5.79

0587 ЗАКВИНИТИ

Оттиски 3529

1975

H_2S

спектр
(fmi)

⊗ (41) fmi

ор 1976 № 4

4 Д205. Времена жизни вибронных состояний $\bar{A}^2A_1$, H_2S^+ . Möhlmann G. R., De Heer F. J. Lifetimes of the vibronic $\bar{A}^2A_1$ states of H_2S^+ . «Chem. Phys. Lett.», 1975, 36, № 3, 353—356 (англ.).

По эмиссии фотонов при электронном возбуждении H_2S (энергия электронов 150 эв) на полосах $\bar{A}^2A_1(0, v_2', 0) \rightarrow \bar{X}^2B_1(0, v_2'', 0)$ изучена кинетика распада и определены времена жизни вибронных состояний Σ и Π иона H_2S^+ . Рассмотрены подуровни состояний Σ $1 \leq v_2' \leq 7$ и Π $3 \leq v_2' \leq 6$, преддиссоциация которых происходит соответственно при $v_2' \geq 7$ и $v_2' \geq 6$. Времена жизни непреддиссоциированных Σ - и Π -подуровней составляют $(4,2 \pm 0,4) \cdot 10^{-6}$ и $(5,6 \pm 0,5) \cdot 10^{-6}$ сек, а преддиссоциированных $\Sigma(0, 7, 0)$ - и $\Pi(0, 6, 0)$ -подуровней $(2,3 \pm 0,3) \cdot 10^{-6}$ сек и $(1,6 \pm 0,3) \cdot 10^{-6}$ сек соответственно. Константа скорости столкновительной дезактивации вибронных состояний $\bar{A}^2A_1$ молекулами H_2S составляет $(2,3 \pm 0,3) \cdot 10^{-9}$ см³·моль⁻¹·сек⁻¹.

В. Ю. О.

51111.6005

Ch, Ph, TC, MGU

30 526 GR

1975

H_2S^+ , H_2S^-

* 45-10542

XII-1522
Raimondi M., Tantardini G.F., Simonetta M.
Ab initio valence bond calculations IV.
 H_2S , SH and related ions. "Mol. Phys.",
1975, 30, N 3, 703-712

(англ.)

0493 гмк

464 465 4 3 3

ВИНИТИ

60504.7261
Ch, TC

H₂ 8+ к/мб. номиз
29864

1976

* 4-12812

Balkis T., Gaines A.F., Özgen G.,
Özgen I.T., Flowers M.C.
Ionisation of hydrogen sulphide,
selenide and telluride by electron
impact.

"J.Chem.Soc.Faraday Trans.", 1976, Part 2,
72, N 3, 524-527 (англ.)

586 591 605.

0613 ВИНИТИ

H_2S^+

Karlsson Yelf. 1976

"Phys scr." 1976, 13, N4,
229-234 (anne)

(cu H_2S ; III)



H_2S^+

omnuek 5771

1974

(AH^+, γ)

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

Peer. H^+, III

1948

88: 200332p Emission spectra of hydrogen sulfide and sulfur dioxide by argon(+) ion impact. Fukutome, Hisao; Tsuji, Masaharu; Nishimura, Yukio (Res. Inst. Ind. Sci. 86, Kyushu Univ., Fukuoka, Japan). *J. Phys. Soc. Jpn.* 1978, 44(4), 1401-2 (Eng). By the impact of 2 keV_{Lab} Ar⁺ ion beam on H₂S, photoemission from the ionic and neutral products were obsd. in the 320-490 nm region: H₂S⁺(²A₁-X²B₁), SH⁺(A³Π-X³Σ⁻), SH(A²Σ⁺-X²Π), H(Balmer series). In the Ar⁺ + SO₂ reaction, only photoemission from the neutral species, SO₂(A¹B₁-X¹A₁) and SO(A³Π-X³Σ⁻), could be identified.

H₂S⁺SH⁺

SO

SO₂

SH

(+4) 

Dr. emmit
in the laboratory
of hydrogen



C.A., 1948, 88, N26



фотоиониз.
спектр.

1979

24 Б130. Исследование диссоциации ионов C_2H_2^+ , H_2S^+ и D_2S^+ в определенных энергетических состояниях методом спектроскопии фотоэлектрон-фотоионных совпадений. El and J. H. D. Dissociations of state-selected C_2H_2^+ , H_2S^+ and D_2S^+ ions studied by photoelectron-photoion coincidence spectroscopy. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1979, 31, № 1—2, 161—173 (англ.)

Спектры совпадений фотоэлектронов с фотоионами, образующимися в результате фотоионизации C_2H_2 , H_2S и D_2S , изучены при различ. фиксированных энергиях фотоэлектронов с анализом ионов по массам время-пролет-

ным методом. Установлено, что ионы C_2H_2^+ ($A^2\Sigma_g^+$) диссоциируют путем отщепления H с близкой к нулю кинетич. энергией вблизи порога р-ции (17,3 эв). Ионы H_2S^+ и D_2S^+ распадаются из состояния A^2A_1 на S^+ и $\text{H}_2(\text{D}_2)$ с передачей 80—20% энергии в кинетич. энергию продуктов распада, а из состояния B^2B_2 с отщеплением атомов H и передачей на поступательные степени свободы не более 30% энергии.

Е. Николаев

2-1979, № 4



1979

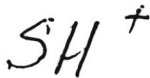
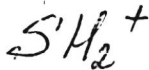
11 Д203. Последовательная метастабильная диссоциация трехатомных ионов. Молекулярный ион SH_2^+ .
Consecutive metastable dissociation of triatomic ions.
The SH_2^+ molecular ion. Mastan I., Pamula A., Mercea V. «Stud. Univ. Babeş — Bolyai. Phys.», 1979, 24, № 2, 3—13 (англ.; рез. рум.)

масс-
спектрометр.

Масс-спектрометрически исследован процесс последовательной спонтанной диссоциации ионов SH_2^+ по цепочке $\text{SH}_2^+ \rightarrow \text{SH}^+ \rightarrow \text{S}^+$. Найдено, что время распада SH_2^+ на SH^+ и H равно $5,54 \cdot 10^{-4}$ сек, а время распада SH^+ на S^+ и H есть $2,27 \cdot 10^{-5}$ сек. Обсуждаются возможные механизмы диссоциации. Так, распад SH_2^+ возможен за счет преддиссоциации из электронно-возбужденных состояний 2A_1 и 2B_2 , а распад SH^+ — из одного из состояний $^3\Sigma^-$, Δ^1 , $^1\Sigma^+$ и $^3\Pi$, в которых может образоваться SH^+ при распаде SH_2^+ . Б. Ф. Гордиец

Ф. 1980 № 11

1979



метастаб.
диссоциация

(+) [X]

X.1980 N 21

21 B95. Последовательная метастабильная диссоциация трехатомных ионов. Молекулярный ион SH_2^+ . Mastan I., Pamula A., Mercea V. Consecutive metastable dissociation of triatomic ions. The SH_2^+ molecular ion. «Stud. Univ Babeş-Bolyai. Phys.», 1979, 24, № 2, 3—13 (англ.; рез. рум.)

Обнаружены последовательные двухступенчатые спонтанные распады трехатомных молекулярных ионов сероводорода: $SH_2^+ \rightarrow SH^+ (m^* = 32,03) \rightarrow S^+ (m^* = 30,12)$. Ионизация происходила при бомбардировке электронами с энергией 70 эВ. Предполагается, что 1-я ступень последовательных распадов вызвана автоионизацией до нескольких ридберговских состояний, с послед. переходом к известным электронным состояниям молек. ионов SH_2^+ ($2A_1$ и $2B_2$). Вторая ступень может возникнуть благодаря преддиссоциации туннелированием ионов SH^+ из одного или нескольких электронных состояний. Сечения процессов равны, соответственно, $9,58 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2$ и $3,75 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2$. Времена жизни ионов SH_2^+ и SH^+ получены равными $5,54 \cdot 10^{-6}$ и $2,27 \cdot 10^{-6}$ с. М. Туркина

H_2S^+

Summa 10347

1980

ref. Mex,
factor

93: 192485b Ab initio MRD-CI study on H_2S^+ . Dissociation correlation diagram for the A^2A_1 and B^2B_2 electronic states. Hirsch, Gerhard; Bruna, Pablo J. (Univ. Bonn, 5300 Bonn, 1 Fed. Rep. Ger.). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* 1980, 36(1), 37-46 (Eng). A correlation diagram for the first three doublet and lowest quartet electronic states of H_2S^+ (vertical and intermediate regions as well as dissociation products) was obtained in ab-initio (multi-ref. double-excitation)(MRD)-CI calcns. Deficiencies are apparent in a previous diagram, where an avoided crossing between two $2A'$ states and the essential participation of a $4B_1$ (vertical region) state were not taken into account. The correlation scheme reported is in agreement with the existing exptl. results, and resolves the queries recently raised by J. H. D. Eland (1979).

C.A. 1980. 93 W 20

H_2S^+

Оттиски 10347 1980

1 Д87. Исследование H_2S^+ неэмпирическим методом конфигурационного взаимодействия. Корреляционные диаграммы для диссоциации в электронных состояниях $\tilde{A}^2A_1$ и $\tilde{A}^2B_2$. Ab initio MRD—Ci study on H_2S^+ . Dissociation correlation diagram for the $\tilde{A}^2A_1$ and $\tilde{B}^2B_2$ electronic states. Hirsch Gerhard, Bruna Pablo J. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1980, 36, № 1, 37—46 (англ.)

М.П.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом взаимодействия большого числа конфигураций рассчитана корреляционная диаграмма для 3 низших дублетных и низшего квартетного состояний H_2S^+ (вертикальная и промежуточная области и продукты диссоциации). Отмечены недостатки диаграмм, полученных ранее, где не учитывалось разрешенное пересечение двух состояний $^2A'$ и участие состояния 4B_1 . Полученные результаты согласуются с эксперим. данными и позволили провести их детальную интерпретацию.

Резюме

Ф. 1981 № 1

H_2S^+

оттиск 10347

1980

4 Б38. Неэмпирический расчет иона H_2S^+ методом конфигурационного взаимодействия с учетом двукратно возбужденных конфигураций относительно нескольких основных конфигураций. Корреляционная диаграмма диссоциации для электронных состояний $\tilde{A}^2A_1$ и $\tilde{B}^2B_2$.
Hirsch G., Bruna P. J. Ab initio MRD—CI study on H_2S^+ : Dissociation correlation diagram for the $\tilde{A}^2A_1$ and

Кв. мех,
расчет



2.1981.14

B^2B_2 electronic states. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1980, 36, № 1, 37—46 (англ.)

Для анализа различных каналов диссоциации иона H_2S^+ модифицированным методом конфигурац. взаимодействия с учетом двукратно возбужденных конфигураций, относительно нескольких основных конфигураций (ДВ-НОК) (см. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 67, 109) рассчитаны поверхности потенциальной энергии этого иона в его низколежащих электронных состояниях A^2A_1 и B^2B_2 . На основе полученных результатов построены полные корреляц. диаграммы диссоциации. Представлены относит. энергии для 6 различных ядерных конфигураций, все из к-рых играют важную роль для диссоциации, приводящей к различным продуктам. Проанализированы градиенты, соотв-щие удлинению связи S—H; изменению валентного угла и асимм. колебанию, а также вертикальная ионизация молекулы H_2S и область 2-го минимума $A(1^2A')$ соотв-щего 2B_2 при симметрии C_{2v} . Найдено, что электронные состояния 2A_1 и 2B_2 энергетически сильно отделены друг от друга и генетически связаны с поверхностями термов $1^2A'$ и $2^2A'$ соотв., хотя в действительности имеет место квазипересечение термов. Полученные данные подтверждают представления о возможности преддиссоциации с образованием $SH^+(^3\Sigma^-)$ и $H(^2S_g)$.

С. Долин

H_2S^+

ommuch 9839

1980

PH_2

✓ 93: 212497n A theoretical study of the lowest 2B_1 , 2A_1 , and 2B_2 electronic states in hydrogen sulfide monocation and a comparison with corresponding states in related systems.

Bruna, Pablo J.; Hirsch, Gerhard; Peric, Miljenko; Peyerimhoff, Sigrid D.; Buenker, Robert J. (Univ. Bonn, D-5300 Bonn 1 Fed. Rep. Ger.). *Mol. Phys.* 1980, 40(3), 521-37. (Eng). The potential energy surfaces of the 3 lowest lying states of H_2S^+ were examd. using large-scale CI calcs. Whereas the structural results for the X^2B_1 and A^2A_1 states agree with expt., the 2B_2 state exhibits an $[\text{S}-\text{H}_2]^+$ structure with large SH bond sepns. and a very small internuclear angle of 32° . Energies and wave functions were calcd. for the 3 vibrational modes in the X^2B_1 and A^2A_1 states of H_2S^+ and D_2S^+ and the corresponding Franck-Condon factors for the $A^2A_1-X^2B_1$ band were detd. A max. absorption intensity was predicted to occur for $\nu'_2 = 5-3$ for H_2S^+ and for $\nu'_2 = 7-8$ for D_2S^+ for the $A^2A_1-X^2B_1$ transition, the calcd. T_0 energy being $18,620 \text{ cm}^{-1}$. The potential energy curve of the 2B_2 state of PH_2 was also calcd. to give a full comparison with the other AH_2 systems: PH_2 , NH_2 , and H_2O^+ .

kb. max.
factor

Ⓜ (71)

C.A. 1980. 93 N 22

111-2048

H_2S^+

Оттиски 9839

1980

12 Д149. Теоретическое исследование низших 2B_1 , 2A_1 и 2B_2 электронных состояний H_2S^+ и сравнение с соответствующими состояниями родственных систем.
A theoretical study of the lowest 2B_1 , 2A_1 and 2B_2 electronic states in H_2S^+ and a comparison with corresponding states in related systems. Bruna Pablo J., Hirsch Gerhard, Perić Miljenko, Peyerimhoff Sigrid D., Buenker Robert J. «Mol. Phys.», 1980, 40, № 3, 521—537 (англ.)

м.п;
г. Москва

Методом конфигурационного взаимодействия в двух больших базисах сгруппированных гауссовых функций исследовано электронное строение H_2S^+ (I) в низлежащих состояниях X^2B_1 , A^2A_1 и B^2B_2 . Рассчитанная равновесная геометрия хорошо согласуется с эксперим.

Ф. 1980 № 12

XII-2048

данными и данными расчетов др. авт. В состоянии 2B_2 валентный угол равен 32° и расстояние $S-H$ велико, так что система представляет собой комплекс вида $[S \dots H_2]^+$. Также рассчитаны волн. ф-ции и энергетич. характеристики для всех трех колебательных мод состояний 2B_1 и 2A_1 I и D_2S^+ (II) и факторы Франка — Кондона; максимумы поглощения предсказаны для $\nu' = 5-6$ для I и $7-8$ для II для перехода $A^2A_1-X^2B_1$, энергия T_0 для к-рого оценена в $18\,620\text{ см}^{-1}$ (эксперим. значение $18\,520$). Полученные результаты сопоставлены с данными аналогичных расчетов для соответствующих состояний PH_2 , NH_2 и H_2O^+ и обсуждены закономерности для указанного ряда соединений. Также рассчитана потенц. кривая для состояния 2B_2 PH_2 .



оттиски 9839

1980

2 Б21. Теоретическое исследование низших электронных состояний 2B_1 , 2A_1 и 2B_2 в H_2S^+ и анализ соответствующих состояний в родственных системах. Bruna P. J., Hirsch G., Peric M., Peyermhoff S. D., Buenker R. J. A theoretical study of the lowest 2B_1 , 2A_1 and 2B_2 electronic states in H_2S^+ and a comparison with corresponding states in related systems. «Mol. Phys.», 1980, 40, № 3, 521—537 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия рассчитаны поверхности потенциальной энергии иона H_2S^+ в трех низколежащих электронных состояниях, 2B_1 , 2A_1 и 2B_2 . Для всех трех случаев проведена оптимизация геометрич. параметров, причем в состоянии 2B_2 ион имеет структуру $[\text{S} \dots \text{H}_2]^+$, к-рой соответствует неожиданно большое значение длины связи S—H и значение валентного угла, равное 32° . Для всех трех нормальных колебаний в возбужденных состояниях X^2B_1 и A^2A_1 ионов

 $\gamma; \epsilon; \eta$

геометрия

XII-2048

X.1981/12

H_2S^+ и D_2S^+ рассчитаны энергии и волновые функции, а также определены значения соотв-щих франк-кондоновских факторов для полосы $A^2A_1 \rightarrow X^2B_1$. Найдено, что максимум поглощения для перехода $A^2A_1 \rightarrow X^2B_1$ в H_2S^+ соответствует $\nu_2' = 5-6$, а в D_2S^+ $\nu_2' = 7-8$. Практически точно воспроизведено значение энергии T_0 — $18\,620\text{ см}^{-1}$ (эксп. значение $18\,520\text{ см}^{-1}$). Аналогичные расчеты выполнены и для других родственных систем AH_2 : PH_2 , NH_2 и H_2O^+ , для к-рых также определены оптим. значения геометрич. параметров в различных состояниях, вычислены вертикальные энергии возбужде-ния, энергии ионизации и проанализирована колебатель-ная структура.

С. Долин

H_2S^+

1980

Lorquet J.C, et al.

расч. нов.
методом
микро

J. chim. phys. et phys.-chim.
biol. 1980, 77, N 7-8,
719-24.

см. $H_2O^+ - III$

SH⁺
2

1980

Chem. rev.

94:182856c A theoretical study of the vibronic structure in the electronic spectrum of hydrogen sulfide radical cation. Peric, Miljenko; Krmar, Marija (Fac. Sci., Belgrade Univ., YU-11001 Belgrade, Yugoslavia). *Glas. Hem. Drus. Beograd* 1980, 45(11), 531-9 (Eng). A method is described for an ab initio calcn. of vibronic levels in triat. mols. exhibiting a strong Renner-Teller effect. It is based on polynomial expansions of the mol. potentials and the kinetic energy operator, and a variational calcn. of the energy levels and wave functions. The results for the $2\Pi_u$ state of SH⁺2 are reported.

C.A. 1981, 94, N22

1980

~~SH₂⁺~~SH₂⁺Кв. леех.
расчет

21 Б43. Теоретическое исследование вибронной структуры в электронном спектре SH₂⁺. Peric M., Krmar M. A theoretical study of the vibronic structure in the electronic spectrum of SH₂⁺. «Глас. Хем. друшт. Београд», 1980, 45, № 11, 531—539 (англ.; рез. сербскохорв.)

Описан неэмпирич. метод расчета вибронных уровней в трехатомных молекулах с сильным эффектом Реннера — Теллера. Используются полиномиальные разложения молек. потенциалов и оператора кинетич. энергии, с использованием к-рых становится возможным вариационный расчет энергетич. уровней и волновых ф-ций. Предложенный метод проиллюстрирован на примере расчетов колебательной структуры ²Π_u-полосы молек. иона SH₂⁺. Найдено хорошее согласие между рассчитанными вибронными уровнями и экспериментом: при абс. значениях энергий переходов порядка 20 000 см⁻¹ различия между расчетом и опытом не превышают ~100 см⁻¹.

С. Долин

20.21.1981

1980

 H_2S^- D_2S^-

18 Б1006. Ионизация быстрых атомов К при столкновении с H_2S и D_2S . Stockdale J. A. D., Reinhardt P. W. Collisional ionization of fast K atoms by H_2S and D_2S . «Chem. Phys. Lett.», 1980, 71, № 2, 274—276 (англ.)

С использованием установки со скрещенными пучками и электростатич. анализатором энергии с время-пролетной системой исследовался процесс $K + H_2S/D_2S \rightarrow HS^-/DS^- + K^+ + H/D$ для энергий атомов К от порога до $E \approx 100$ эВ. Измерены спектры кинетич. энергии образующихся ионов HS^-/DS^- при E от 13 до 57,4 эВ, а также энергетич. спектры ионов K^+ при E от 47,5 до 94,2 эВ. Показано, что энергия появления K^+ находится в соответствии с энергией появления HS^- или DS^- , к-рая в свою очередь с точностью $\pm 0,2$ эВ равна пределу диссоциации H_2S^- или D_2S^- в состоянии 2A_1 .

Л. Е. Ястребова

предел
диссоц.

x 1980 n 18

$SM_2^{\pm}$

1981

Bhattacharyya A.A.,
et al.

Кв. мех.
расщеп. J. Amer. Chem. Soc.,
1981, 103, N25, 7458 -
- 7468.

●
(вс. SN_2 ; III)

M_2S^+

1981
Clark Timothy.

кв. см.
расшир.

J. Comput. Chem.
1981, 2(3), 261-265.

(см. M_2S ; III)

H_2S^+

[Лит. 12144]

1981

2 Д130. Применение адиабатического подхода к эффекту Реннера в нелинейной трехатомной молекуле. The Renner effect in a bent triatomic molecule using the adiabatic approach. Duxbury G., Dixon R. N. «Mol. Phys.», 1981, 43, № 2, 255—274 (англ.)

Изложены основы двух методов расчета энергии вибронных уровней трехатомной молекулы при наличии сильного эффекта Реннера. В 1-м методе вибронные ф-ции являются собств. ф-циями аксиальной компоненты орбитального углового момента, а вибронное взаимодействие осуществляется главным образом электростатич. потенциалом. Во 2-м методе, который назван адиабатич. подходом, базис выбирается так, чтобы взаимодействие базисных состояний описывалось суммой взаимодействия орбитального момента с вращением вокруг оси a и электронным спином. Эти два метода применены к расчету энергии колебательных уровней с $v_2 \leq 20$ (при значениях вращательного квантового

М.Л



ср. 1982, 18, №2.

числа $K \leq 4$) электронных состояний $\tilde{A}^2A_1$ и $\tilde{X}^2B_1$ иона H_2S^+ и радикала NH_2 и состояния $X^2\Pi$ иона CO_2^+ .
Установлена полная эквивалентность результатов, полученных двумя методами. М. Р. Алиев



H_2S^+

[ommueu 12144] 1981.

Duxbury G., et al.

расчет
колебательных
уровней.

Mol. Phys., 1981,
43 (2), 255-74.

(Результаты
эксперимента)

SM₂

1981

Pandey R. P., et al.

Indian J. Chem., 1981,
A 20, 592-593.

perin,
u. u.

● (cu. LiH₂; III)

$[SM_2]^{n\pm}$

1981

Takahata Y., et al.

An. Acad. Brasil. Ciênc.,

1981, 53, N1, 93-99.

(первая
серия)

• (сер. $[CH_2]^{n\pm}$; III)

H_2S^+

(98)

7 Б1496. Фотоионизация $(H_2S)_n$, где $n=1-7$, в молекулярном пучке. Walters Edward A., Blais Norman C. Molecular beam photoionization of $(H_2S)_n$, $n=1-7$. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 9, 4208—4213 (англ.)

На фотоионизационном масс-спектрометре с вводом пробы в виде сверхзвукового молек. пучка измерены кривые эффективности фотоионизации (КЭФ) кластеров типа $(H_2S)_n$ ($n=1-7$), возникающих в молек. потоке H_2S , истекающем в вакуум со скоростью $\leq 7 \cdot 10^{-5}$ моль/с из области давл. 1000—1250 Торр. Измерения проводили в области длин волн от порога до 950 А при спектральном разрешении $\sim 3,75$ А. При давл. торможения 1240 Торр и действии света 1215,66 А масс-спектр содержит линии след. ионов (указаны их относит. интенсивности): H_2S^+ 1,00; $(H_2S)_2^+$ $7,3 \cdot 10^{-3}$; $(H_2S)_3^+$ $2,6 \cdot 10^{-3}$; $(H_2S)_4^+$ $8,2 \cdot 10^{-4}$; $(H_2S)_5^+$ $6,3 \cdot 10^{-4}$; $(H_2S)_6^+$ $2,5 \cdot 10^{-4}$; $(H_2S)_7^+$ $8,1 \cdot 10^{-5}$; $(H_2S)_8^+$ $2,7 \cdot 10^{-5}$. При $n=1-7$ получены след. потенциалы ионизации $(H_2S)_n$ соотв. (эВ): $10,449 \pm 0,006$; $9,74 \pm 0,01$; $9,63 \pm 0,01$; $9,61 \pm 0,01$; $9,58 \pm 0,01$; $9,50 \pm 0,02$; $9,63 \pm 0,03$.

g,

17
(+7)

X. 1981, 19, N 7.

Увеличение потенциала ионизации при переходе от $n=6$ к $n=7$ объяснено тем, что процесс $(\text{H}_2\text{S})_{m-1}(\text{H}_2\text{S})^+ + \text{H}_2\text{S} \rightarrow (\text{H}_2\text{S})_m \cdot (\text{H}_2\text{S})^+$, экзотермичный при малых m , становится эндотермичным при больших m . Теплоты этой р-ции $-H_0^0$ при $n=1-6$ соотв. таковы (ккал/моль): $17,0 \pm 0,3$; $3,2 \pm 0,3$; $1,2 \pm 0,3$; $1,4 \pm 0,3$; $2,6 \pm 0,5$; $-2,4 \pm 0,8$. Нестабильность $(\text{H}_2\text{S})_7^+$ по отношению к его распаду на $(\text{H}_2\text{S})_6^+ + \text{H}_2\text{S}$ показывает, что наблюдение $(\text{H}_2\text{S})_7^+$ в масс-спектрах обусловлено наличием активац. барьера для такого распада. Зависимость логарифма относит. содержания кластера типа $(\text{H}_2\text{S})_n$ от n спадает почти линейно с ростом n после резкого спада в промежутке от $n=1$ до $n=2$. Это указывает на отсутствие заметной предпочтительности образования кластеров с нек-рым определенным значением n , к-рое отмечалось в лит-ре, напр., в случае паров воды. Линейная зависимость потенциала ионизации кластеров типа $(\text{H}_2\text{S})_n$ от $1/n$ выполняется плохо, хотя согласно лит. данным для др. кластеров неметаллов она выполняется.

В. Е. Скурат

H_2S^+

1982

Ashfold M. N. R.,
Dixon R. N.

crekmp,
u. n.

Chem. Phys. Lett.,
1982, 93, N1, 5-10.

(corr. H_2S ; III)

H_2S^+

[Ommuck 13367] 1982

$A^2A_1 \leftarrow X^2B_1$

96: 171492y Observation of transitions to predissociated levels of hydrogen sulfide (H_2S^+)(A^2A_1) in a laser-ion beam experiment. Edwards, C. P.; Maclean, C. S.; Sarre, P. J. (Dep. Chem., Univ. Nottingham, Nottingham, UK NG7 2RD). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 87(1), 11-13 (Eng). Rotational lines in the $A^2A_1 \leftarrow \tilde{x}^2B_1$ electronic transition of H_2S^+ were obsd. by a laser-ion beam technique. The spectra are recorded by monitoring the prodn. of S^+ ions which arise from predissocn. of the A^2A_1 state.

C. A. 1982, 96, N20

H_2S^+

Оттиск

13367 1982

7 Д428. Наблюдения переходов на преддиссоциативные уровни $H_2S^+(\bar{A}^2A_1)$ в лазерных экспериментах с ионным пучком. Observation of transitions to predissociated levels of $H_2S^+(\bar{A}^2A_1)$ in a laser-ion beam experiment. Edwards C. P., Maclean C. S., Sarge P. J. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 87, № 1, 11—13 (англ.)

спектр,
переход на
преддиссоци-
ативные
уровни

ф. 1982, 18, № 7

На установке с коллинеарными пучками молекулярных ионов и лазерного излучения получен с высоким разрешением спектр ровибронных переходов в системе $\bar{A}^2A_1 \leftarrow \bar{X}^2B_1$ ионов H_2S^+ . При фиксированной частоте лазера $\sim 25\,000\text{ см}^{-1}$ плавная перестройка по спектру осуществлялась за счет эффекта Доплера при изменении энергии ионов в пределах 500—5000 эВ. Регистрация поглощения лазерного излучения производилась по току ионов S^+ , образующихся при возбуждении ионов H_2S^+ на преддиссоциативный ровибронный уровень состояния $\bar{A}^2A_1$. Кратко обсужден возможный механизм преддиссоциации $H_2S^+(\bar{A}^2A_1)$.

С. Литке

H_2S^+

1982

24 Б22. Исследование влияния электронной корреляции на теоретическое предсказание расщепления в нулевом поле молекулярных состояний $^2\Pi$. Hess Bernd A., Buenker Robert J., Marian Christel M., Peyerimhoff Sigrid D. Investigation of electron correlation on the theoretical prediction of zero-field splittings of $^2\Pi$ molecular states. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 89, № 6, 459—462 (англ.)

Для молекул H_2S^+ , BO , NO , CH , CO^+ , OH в состояниях $^2\Pi$ рассчитаны расщепления в нулевом поле, вызванные спин-орбитальным взаимодействием. Расчет проведен в рамках метода конфигурац. взаимодействия в двухэкспонентном базисе из сгруппированных гауссовых функций. Изучена зависимость расщепления от длины конфигурац. разложения. Проведено сравнение величин расщепления, полученных по теории возмущений в первом порядке и с помощью диагонализации матричного гамильтониана, включающего наряду с

М. П.



X. 1982, 19, N 24

электростатич. и спин-орбитальное взаимодействие. Отмечено, что для рассматриваемых молекул достаточно хорошее согласие с эксперим. величинами может быть получено при использовании волновой функции, включающей всего лишь ~ 1000 конфигураций.

Б. И. Жилинский



H_2S^+

1982

✓ Д131. Исследование электронной корреляции при теоретическом предсказании расщепления молекулярных состояний $^2\Pi$ в нулевом поле. Investigation of electron correlation of the theoretical prediction of zero-field splittings of $^2\Pi$ molecular states. Hess Bernd A., Buenker Robert J., Marian Christel M., Peyerimhoff Sigrid D. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 89, № 6, 459—462 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия с отбором конфигураций по отношению к многодетерминантной ссылочной ф-ции рассчитаны величины спин-орбитальных расщеплений электронных состояний $^2\Pi$ для молекул H_2S^+ , BO , NO , CH , CO^+ и OH . Базис АО состоял из стандартных наборов лепестковых гауссовых ф-ций типов s и p . Учет спин-орбитального взаимодействия проводился в первом порядке теории возмущений. Полученные в результате расчета значения параметров расщепления отличаются от экспериментальных не более чем на 1—5%.

А. И. Дементьев

расчет
М.П.

15

Р. 1983, 18, №1

H_2S^+

1982

/ 97: 98603z Investigation of electron correlation on the theoretical prediction of zero-field splittings of $^2\Pi$ molecular states. Hess, Bernd A.; Buenker, Robert J.; Marian, Christel M.; Peyerimhoff, Sigrid D. (Univ.-Gesamthochsch. Wuppertal, D-5600 Wuppertal, 1 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 89(6), 459-62 (Eng). First-order $^2\Pi$ zero-field splittings are computed for the H_2S^+ , BO, NO, CH, CO^+ and OH ground electronic states by employing ab initio multi-configuration wavefunctions and by including all one- and two-electron spin-orbit interactions in a gaussian AO basis explicitly in the theor. treatment.

pacus. $^2\Pi$ acs

meopem.

pacrem

(45) 

C.A. 1982, 97, N12

H_2S^+

1982

Miller J. C., Compton
R. N., et al.

chemp,
u. n.

J. Chem. Phys., 1982,
76, N 11, 5648-5649.

●
(see H_2S ; III)

54⁺

1983

10 Б1041. Метод КВ—НИК для изучения низколежащих электронных состояний. Приложение к молекулярным ионам элементов третьего периода типа AH_2^+ , AH^+ , AB^+ и HAB^+ . MRD—CI method for the study of low-lying electronic states. Application to second-row molecular ions of type AH_2^+ , AH^+ , AB^+ , and HAB^+ . Bruna Pablo J., Hirsch Gerhard, Buenker Robert J., Peyerimhoff Sigrid D. «Mol. Ions: Geom. and Electron. Struct. Proc. NATO Adv. Study Inst., Isle of Kos, Sept. 30—Oct. 10, 1980». New York; London, 1983, 309—354 (англ.)

расчет Si , и.п.

Описано приложение метода конфигурац. взаимодействия с построением одно- и двукратных возбуждений по отношению к набору исходных конфигураций (КВ—НИК) с отбором и экстраполяцией по энергии для расчетов энергетич. и структурных характеристик низколежащих электронных состояний простых молекул и

415

х. 1984, 19, N 10

ионов. Показано, какие результаты м. б. получены для ионов типа AH_2^+ и AH^+ , где $\text{A}=\text{S}$, P и Si ; O , N и C , а также для ионов AB^+ и HAB^+ , где A , $\text{B}=\text{C}$ и Si . Приведены корреляц. диаграммы, фрагменты поверхностей потенциальной энергии, спектроскопич. постоянные, энергии возбуждения в высшие электронные состояния, интенсивности электронных и колебательных переходов. Проведены сопоставления св-в в рядах изо-валентных и изоэлектронных соединений. А. В. Немухин

1983

 SH_2^+

5 Д127. Многоссылочный метод конфигурационного взаимодействия с учетом двукратных возбуждений (МСД-КВ) для изучения низколежащих электронных состояний. Применение к молекулярным ионам второго периода типа AH_2^+ , AH^+ , AB^+ и HAB^+ . MRD-CI method for the study of low-lying electronic states. Application to second-row molecular ions of type AH_2^+ , AH^+ , AB^+ , and HAB^+ . Bruna Pablo J., Hirsch Gerhard, Buenker Robert J., Peyerimhoff Sigrid D. «Mol. Ions: Geom. and Electron. Struct. Proc. NATO Adv. Study Inst., Isle of Kos, Sept. 30—Oct. 10, 1980». New York; London, 1983, 309—354 (англ.)

Г, М. П., Л.;

Изложена схема расчета потенц. поверхностей молекул в рамках многоссылочного метода конфигурац. взаимодействия с включением двукратных возбуждений (МСД-КВ) и приведены результаты расчета низколежащих электронных состояний ионов типа AH_2^+ ($\text{A}=\text{S}, \text{O}$ и Si). Построены корреляционные диаграм-

48

ср. 1984, 18, N5

мы процессов диссоциации ионов на $\text{AH}^+ + \text{H}$ и на $\text{H}_2 + \text{A}^+$. Выполнен анализ полученных потенц. поверхностей ионов AH_2 с точки зрения возможности их квазипересечения при переходе к менее симметричной ядерной конфигурации. Методом МСД-КВ рассчитаны вертикальные энергии возбуждений для ионов, SH^+ , PH^+ , SiH^+ , NH^+ , C_2^+ , CSi^+ и Si_2^+ . Проведен сравнительный анализ потенциалов ионизации для изовалентных пар PH^+/NH^+ и SiH^+/CH^+ . Рассчитан также потенциал ионизации молекулы HCSi и определена относит. стабильность изомеров HCSi^+ и CSiH^+ .
 Библ. 52. — А. И. Дементьев



H_2S^+

Om. 16343

1983

98: 206753e Effects of orbital angular momentum in hydrogen sulfide(1+). The Renner-Teller effect. Duxbury, G.; Jungen, C.; Rostas, J. (Dep. Nat. Philos., Univ. Strathclyde, Glasgow, UK G4 0NG). *Mol. Phys.* 1983, 48(4), 719-52 (Eng). The vibrational and K-type rotational levels of the X^2B_1 and the A^2A_1 states of H_2S^+ were fitted by least squares to give a pair of Born-Oppenheimer potential curves for the combining electronic states. An accurate description of the effects of orbital angular momentum on the energy level positions were obtained and relative transition moments for the vibronic bands of the $A^2A_1-X^2B_1$ transition were calcd. Relative transition moments for the photoelectron spectrum of H_2S (H_2S^+ , $A^2A_1 \leftarrow H_2S$, X^1A_1) were also evaluated. The effects of orbital angular momentum on the spin and rotational fine structure were considered in detail. The parameters for end over end rotation were calcd. directly from the bond lengths and potential curves, which were derived from the least squares fit to the vibrational and K-type structure. The erratic spin-orbit splittings and asymmetry parameters of the A^2A_1 state were reproduced with reasonable accuracy. Significant differences were obsd. between the effects of orbital angular momentum in H_2S^+ compared to its effects on NH_2 and H_2O^+ . These differences are assocd. principally with the shapes of the potential curves, the size of the spin-orbit coupling, and the near equality of the vibrational sepn. in the excited state region of H_2S^+ .

[Эффект
Реннер-Теллера]

кон. и транс-
уровни

X^2B_1 и A^2A_1 экв.
С. А. 1983, 98, ~ 24

H_2S^+

От. 16343

1983

15 Б77. Влияние орбитального углового момента в H_2S^+ Эффект Реннера — Теллера. Effects of orbital angular momentum in H_2S^+ . The Renner — Teller effect.

Duxbury G., Jungen Ch., Rostas J. «Mol. Phys.», 1983, 48, № 4, 719—752 (англ.)

По эксперим. данным о колебательных и вращательных состояниях построены потенциальные ПВ для двух электронных состояний X^2B_1 и $\bar{A}^2A_1$ молек. иона H_2S^+ . Рассчитаны относит. моменты вибронных полос для перехода $\bar{A}^2A_1 \rightarrow X^2B_1$. Определены также моменты перехода для фотоэлектронного спектра молекулы H_2S ($H_2S^+ \bar{A}^2A_1 \rightarrow H_2S X^1A_1$). Детально исследовано влияние орбитального углового момента на вращат. и спиновую ТС спектров. Найденные параметры позволяют полностью описать нерегулярный характер расщепления в $\bar{A}^2A_1$ -состоянии. Проведенное сравнение полученных результатов с аналогичным рассмотрением молекул NH_2 и H_2O^+ указывает на существенную зависимость системы энергетич. уровней от формы Пт и величины спин-орбитального взаимодействия.

Б. И. Жилинский

расчет м.п.

X. 1983, 19, N 15

H₂S

1983

Palke W. E., Kirtman
Bernard.

meop.
pacificus

J. Mol. Struct., 1983,
104, N1-2, 207-213.

(cell. H₂O, III)

H_2S^+

Um. 16583 1983

20 Б101. Изучение фотоионизации H_2S методом молекулярного пучка. Molecular beam photoionization study of H_2S . Prest H. F., Tzeng W.-B., Brom J. M., Ng C. Y. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1983, 50, № 3, 315—329 (англ.)

структура

Методом сверхзвукового молек. пучка масс-спектрометрически измерены кривые эффективности фотоионизации молекул H_2S с образованием ионов H_2S^+ , S^+ и HS^+ . Измерения проведены для диапазона длин волн излучения возбуждения от 645 до 1190 Å. На основе данных фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии фотопоглощения для H_2S структура в измеренных спектрах отнесена к возбуждению колебательных уровней автоионизационных ридберговских состояний nsa_1 ($n=5,6$) и nda_1 ($n=4,5$), сходящихся к $\tilde{A}^2A_1$ и $\tilde{B}^2B_2$ состояниям H_2S^+ соотв. С использованием полученных данных и лит. абс. сечений фотоионизации H_2S с образованием H_2S^+ сделаны оценки абс. значений сечений фотоионизации H_2S с образованием HS^+ и S^+ .

О. А. Басченко

X. 1983, 19, N 20

H_2S^+ Carrington Alan. 1984
Laser Appl. Chem. Proc. NATO
Adv. Study Inst. Laser Appl.
Chem., San Miniato, June
27 - July 11, 1982, New York;
London, 1984, 117-121.

(H_3^+ ; III)

H_2S^+

(OM-20357)

1984

Ibuki T.,

J. Chem. Phys., 1984,

81, N 7, 2915-2918.

факторы
Франка-
Кондона

H_2S^+

[om. 21592]

1985

SH_3^+

SH_3^{2+}

полетр,
сепрукт.,
инверсион.
барьер,
теор.
расчет.

Бондариш А. И.,
Чаркев О. П.

И.С. сепруктур. сеп-
лине, 1985, 26, №3,
158-181.

H_2S^+

1985

Р Б4389. Сечение поглощения света молекулами H_2S . Photoabsorption cross section of H_2S . Ibuki T., Yagishita Y., Ito K., Koizumi H., Yoshimi T., Morita M., Arai S., Hironaka K., Shinsaka K., Hatano Y. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 119, № 4, 327—330 (англ.)

В области длин волн 47—102 нм исследовано поглощение синхротронного излучения молекулами H_2S . Газ находили в ячейке, снабженной четырьмя коллекторами ионов при давл. $< 0,12$ Торр. Разрешающая способность монохроматора составляла 4 Å. Для $\lambda > 90$ нм распределение автоионизац. максимумов соответствует ридберговскому переходу $Sa_1 \rightarrow 6sa_1$ иона H_2S^+ . В области 77—99 нм доминируют прогрессивн ~~вал. кол.~~ v_1 .

спектр,
у

X. 1986, 19, №2

Обнаруженные новые пики приписаны ридберговским переходам $2b_2 \rightarrow nda_1$ ($n=4, 5$). В области $\lambda=55-77$ нм обнаружены три максимума, отвечающие энергии 18,2, 19,5 и 21,1 эВ, к-рые соответствуют электронным состояниям 1^4A_2 , 4B_1 и 2^4A_2 иона H_2S^+ и приписаны их вертикальным Пт ионизации. Л. Ю. Русин

SH₂

1985

MacLagan Robert G.A.R.
Kirtman Bernard.

u. n. Theor. chim. acta, 1985,
68, N 5, 407-417.

( H_2O ; III)

SH_2^+

(OM 24345)

1985

Perić et., Peyerimhoff S. D.,
et al.,

ab initio
расчет
энергетика
Рейнер-
Темпера

Int. Rev. Phys. Chem.,
1985, 4, N 2, 85-124.



H_2S^+

1987

Chau Foo Tim.

THEOCHEM 1987, 36,
173-89.

X^2B_1 ,
 A^2A_1 ,

empyк-
мұра

( cer. H_2O^+ ; I)

H₂S

1987

Mamada Keinosude.

u. 17.

Spectrosc. Lett., 1987,
20, N 6-7, 537-543.

(cur. ● H₂O; III)

H₂S⁺ (om-27414)

1985

Merzberg G.,

Proc. Indian. Natl. Sci.

(opp) Acad., 1985, A51, n.3,
495-521.

(сер. кородки с ommer. Merzberg).

H₂S

1987

4 Л195. Спектр молекулы H₂S вблизи 1,6 мкм.
The H₂S spectrum in the 1,6 μm spectral region. Le-
chuga-Fossat L., Flaud J.-M., Camy-Peyret C.,
Arcas P., Cuisenier M. «Mol. Phys.», 1987, 61, № 1, 23—
32 (англ.)

На фурье-спектрометре с разрешением 0,017 см⁻¹ ис-
следован спектр поглощения молекулы H₂S в области
6000÷6500 см⁻¹. Идентифицирована вращательная
структура полос $2\nu_1 + \nu_2$, $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ и $\nu_2 + 2\nu_3$ молекул
H₂³²S и H₂³⁴S. Анализ спектра выполнен с использо-
ванием приведенных вращательных гамильтонианов
Уотсона для основного и возбужденных состояний и
ангармонических и кориолисовых резонансов между
возбужденными колебательными состояниями (210),
(111) и (012). Определены значения вращательных
постоянных, постоянных квартичного и секстичного
центробежного искажения и резонансных параметров.
М. Р. Алиев

М.А.

ф. 1988, 18, №4

H₂S

1987

Norrbotten S.

Austral. J. Chem.,

ser. n. 1987, 40, N8, 1465-
-1470.

(cor.  NH₃; III)

$SM_2^+(2)$ [acc. 25904] 1987

Pople J. A.

$\Delta_f H^\circ$, J. Phys. Chem., 1987,
ser. n. 91, n 1, 155 - 162.



H_2^+

1988

7 Л201. ИК диодно-лазерная и микроволновая спектроскопия молекулярных ионов. Infrared diode laser and microwave spectroscopy of molecular ions. Hirota E. «Phil. Trans. Roy. Soc. London», 1988, A324, № 1578, 131—139 (англ.)

Представлен литер. обзор ряда спектроскопич. исследований молекулярных ионов FHF^- , HBF^+ , H_2Cl^+ , H_2S^+ , HCO^+ и DCO^+ , выполненных методами диодно-лазерной и микроволновой спектроскопии. Рассмотрено влияние электр. поля на дублеты I -типа, обусловленных переходами в колебательные состояния $v_2=1, 2$ ионов HCO^+ , DCO^+ ; для DCO^+ рассмотрен резонанс Ферми между v_1 и $4v_2^0$. В приближении Борна — Оппенгеймера с использованием теоремы Гелмана — Фейнмана выполнены оценки электронных распределений в ионах и представлено их сравнение с распределениями в нейтральных соединениях для 3 изoeлектронных серий: 1 — NH^- , OH и FH^+ , 2 — HBF^+ , HBO , HCO^+ , HCN , HNN^+ , HNC^+ и HOC^+ , 3 — NH_2^- , OH_2 и FH_2^+ . Библ. 24. В. К.

М.П.

(обзор)

XI
(45)

ф. 1988, 18, N 7

H_2S^+ com. 30490

1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 286.

H_2S^+

1995

122: 301509c Theoretical spectroscopic data for the X^2B_1 and A^2A_1 states of H_2S^+ . Lahmar, Souad; Ben Lakhdar, Zohra; Chambaud, Gilberte; Rosmus, Pavel (Departement de Physique, Universite de Tunis, Tunis, Tunisia). *THEOCHEM* 1995, 333(1-2), 29-37 (Eng). Coupled electron pair (CEPA) electronic wave functions were used to calc. the three-dimensional potential energy functions of the two lowest doublet states X^2B_1 and A^2A_1 of H_2S^+ . The near-equil. potential for the X^2B_1 state was used in variational calcs. of the ro-vibrational energy levels up to 10000cm^{-1} . Rotationally resolved absorption spectra of the three fundamental transitions were calcd. ab initio using the three-dimensional elec. dipole moment functions and the ro-vibrational eigenfunctions. The abs. line strengths are given for the most intense transitions.

X^2B_1 u
 A^2A_1 ccm.

C.A. 1995, 122, N24