

NH5

$\text{BeH}_2, \text{BH}_3, \text{CH}_4, \text{NH}_5, \text{OH}_2, \text{HF}$  (структура, 1977)  
10. мех. расчёт 14 9 13

IX 2999  
Hansen K.H., Frenkel E.,

Theor. Chim. Acta, 1971, 20, N2, 93-100  
(нем.)

Spin valence calculations in  
 $\text{AH}_n$  molecules. I. Molecular geo-  
metry of valence structures.

10 16  $\odot$  613  
Ch, 1971, 74, N12, 573967

$\text{NH}_5^+$

1977  
1) 7 Д176. Неэмпирические расчеты стабильности иона  $\text{NH}_5^+$ . Bugaets O. P., Zhogolev D. A. Ab initio calculations of the stability of the  $\text{NH}_5^+$  ion. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 45, № 3, 462—465 (англ.)

Проведены расчеты некоторых участков потенц. поверхности для иона  $\text{NH}_5^+$  в рамках метода МО ЛКАО-ССП с использованием миним. базиса из сгруппированных гауссовых лепестковых ф-ций. Рассчитаны также энергии фрагментов:  $\text{H}$ ,  $\text{H}_2^+$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{NH}_3^+$ ,  $\text{NH}_4^+$ . Для описания молекулярных систем с ненулевым спином использован неограниченный вариант метода Хартри—Фока. Показано, что  $\text{NH}_5^+$  ион является стабильным относительно диссоциации на  $\text{NH}_3$  и  $\text{H}_2^+$  или  $\text{NH}_3^+$  и  $\text{H}_2$ . Точности расчета, однако, недостаточно для ответа на вопрос о стабильности  $\text{NH}_5^+$  относительно диссоциации на  $\text{NH}_4^+$  и  $\text{H}$ . Обсуждена связь полученных результатов с расчетами изоэлектронной системы  $\text{NeH}_2^+$ . Б. И. Жилинский

Кв. мех.  
расчет  
стабиль-  
ности

ф. 1977. № 7

$\text{NH}_5^+$

1977

13 Б35. — Неэмпирические расчеты устойчивости иона  $\text{NH}_5^+$ . Bugaets O. P., Zhogolev D. A. Ab initio calculations of the stability of the  $\text{NH}_5^+$  ion. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 45, № 3, 462—465 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в различных базисах лепестковых ГФ с оптимизацией геометрич. параметров проведены расчеты нек-рых вероятных структур иона  $\text{NH}_5^+$  (I), а также энергетики процессов фрагментации I на  $\text{NH}_3$  и  $\text{H}_2^+$  (или  $\text{NH}_3^+$  и  $\text{H}_2$ ) (а) и  $\text{NH}_4^+$  и  $\text{H}$  (б). Расчеты проводились в формализме неограниченного метода Хартри — Фока. Найдено, что I устойчив относительно фрагментации типа (а). В случае фрагментации (б) аналогичного однозначного заключения сделать нельзя, поскольку в расчетах не учитывались вибронные эффекты. Учет  $d$ -АО не меняет полученной качеств. картины.

И. Абронин

кв. атом.  
фрагмент

X. 1977. № 13

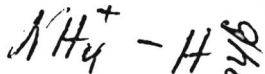
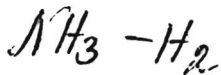
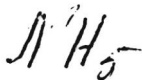
1977

 $NH_5^+$ ref. acc.  
fact.

+86: 127701k AB initio calculations of the stability of the  $NH_5^+$  ion. Bugaets, O. P.; Zhogolev, D. A. (L.V. Pisarzhevskii Inst. Phys. Chem., Kiev, USSR). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 45(3), 462-5 (Eng). Some fragments of the  $NH_5^+$  potential surface were calcd. with the SCF-LCAO-MO method by using a basis of linear combinations of Gaussian lobe functions. The  $NH_5^+$  ion is stable against dissoen. into  $NH_3 + H_2^+$  or  $NH_3^+ + H_2$ . Its stability with respect to decompn. into  $NH_4^+ + H$  was not resolved.

C.A. 1977 86 N18

оттиски 5067 1974



946

электр.  
эмисс.

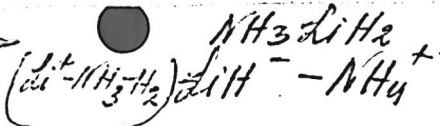
IX - 946

(71) 18

ф. 1974 № 10

10 Д327. Неэмпирическое исследование реакции аммоний-иона с гидрид-ионом и гидридом лития. Morosi Gabriele, Simonetta Massimo. An ab initio study of the reaction of ammonium ion with hydride ion and lithium hydride. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 47, № 2, 396—398 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО неэмпирически в базисе гауссовских орбиталей ОСТ/4—31 ГФ и полуэмпирически в валентном приближении ППДП/2 исследовано электронное строение  $\text{NH}_5$  (симметрия  $C_s$ ,  $C_{4v}$ ,  $D_{3h}$ ),  $\text{NH}_4^+ - \text{H}^-$ ,  $\text{NH}_3 - \text{H}_2$ ,  $\text{NH}_4^+ - \text{LiH}^-$ ,  $(\text{NH}_3\text{LiH}_2)$  и  $\text{Li}^+ - \text{NH}_3 - \text{H}_2$ . При расчете всех соединений проводилась частичная или полная оптимизация геометрии. Результаты расчетов обоими методами качественно согласуются между собой. Найдено, что наиболее стабильная конформация  $\text{NH}_5$  симметрии  $D_{3h}$ , а наименее ста-



бильная имеет симметрию  $C_{4v}$ , однако даже конформация  $D_{3h}$  на 138 ккал/моль менее стабильна, чем  $NH_3-H_2$  (молекула  $H_2$  расположена на оси третьего порядка со стороны атома N). Оптимальная геометрия  $NH_4^+-H^-$  имеет симметрию  $C_{3v}$ . Расчеты молекул, содержащих Li, показали, что наиболее стабильным является соединение  $-NH_4^+-LiH$  с длинами связей N—H и Li—H, равными 1,04 и 1,5 Å соответственно. Сделан вывод, что LiH обладает большой реакционной способностью.

В. А. Корсунов

NH<sub>5</sub><sup>2-</sup>

[Osmium 10606]

1980.

Blidewell ch.

publ.  
revised,  
many. u

J. Mol. Struct.,  
1980, 67, 121-132

сформулир.  
мелко

в издании 1980 г.



NH<sub>5</sub>

1980

18 Б33. О существовании NH<sub>5</sub>. Gründler W., Schädler H. D. Zur Existenz von NH<sub>5</sub>. «Z. Chem.», 1980, 20, № 3, 111 (нем.)

молекуляр.  
геометрия

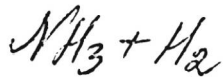
$\Delta E$

Методом ССП МО ЛКАО с использованием базиса плавающих сферич. гауссовых орбиталей (ПСГО) рассчитаны полные энергии NH<sub>5</sub> в различных геометрич. конфигурациях, при этом рассматривались две конфигурации молекулы с симметрией C<sub>s</sub> — одна конфигурация с двухцентровыми, двухэлектронными связями (C<sub>s</sub> I), другая — с трехцентровой, четырехэлектронной связью (C<sub>s</sub> II). Проведенные расчеты показали, что стабильность структур NH<sub>5</sub> возрастает в след. порядке: C<sub>s</sub> II > C<sub>2v</sub> > C<sub>3v</sub> > D<sub>3h</sub> > C<sub>s</sub> I > C<sub>4v</sub>. Большинство

№ 1980 № 18

структур являются нестабильными относительно распада  $\text{H}_2 + \text{NH}_3$ , так что всегда может происходить спонтанный распад молекулы на эти продукты. Относительно распада на  $\text{NH}_4^+ + \text{H}^-$  структура  $D_{3h}$  стабильна на 270 КДж/моль. Переход из этой структуры в более стабильные конфигурации  $C_{2v}$  и  $C_s II$  может произойти посредством псевдовращения. Из структуры  $C_s II$  может легко последовать отщепление уже структурно сформировавшейся молекулы  $\text{H}_2$ . При попадании ионов  $\text{H}^-$  на грань или ребро тетраэдра  $\text{NH}_4^+$  распад  $\text{NH}_5$  на  $\text{H}_2$  и  $\text{NH}_3$  может происходить и помимо перехода к структурам  $C_{2v}$  и  $C_s II$ .

И. А. Тополь



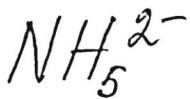
Оммуен 9333 / 1980

кв. мех.  
раскр  
Рудберг,  
Степан.

Kassab E., et al.

Chem. Phys. Lett.,  
1980, 70 (1), 151-154.

масс-спектр,  
реакция



1984

Kalcher J., Rosmus P.,  
Quack M.

Can. J. Phys., 1984, 62,  
N 12, 1323-1327.

(see. ●  $\text{NH}_4^-$ ; III )

NH<sub>5</sub>

1987

Reed Alan E., Schleyer  
Paul von Rague.

u.n.

Chem. Phys. Lett., 1987,  
133, N 6, 553-561.

(car.  SiH<sub>5</sub><sup>-</sup>; III)

$NH_5^+$

1988

14 Б1065. Теоретическое рассмотрение структуры аммонизированного  $NH_5^+$ . Some theoretically based speculations on the structure of ammoniated  $NH_5^+$  / Kasab E., Fouquet J., Evleth E. M. // Chem. Phys. Lett.— № 3—4.— С. 279—290.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП в базисе 4—31 ГФ, дополненном диффузной 3s-АО, рассчитаны равновесные структуры соединений  $NH_5^+$  и  $N_2H_8^+$ , а также энергетика р-ций их образования и распада. Показано, что минимумам на гиперповерхности  $NH_5^+$  соответствуют слабо связанные комплексы  $NH_3^+$  с  $H_2$  и  $NH_4^+$  с  $H$ , а  $N_2H_8^+$  имеет димерную структуру, аналогичную структуре  $Na_2^+$ . Предположено, что экспериментально полученный аммонизированный  $NH_5^+$  (// Chem. Phys. Lett.— 1988, 143.— С. 13) является на самом деле аммонизированным  $N_2H_8^+$ , представляющим собой ридбергову катион-радикальную пару, метастабильную по отношению к распаду на  $H$  и аммонизированный  $NH_4^+$ . Это соединение может быть устойчиво только в виде кластеров  $N_2H_8^+(NH_3)_n$ ,  $n=8-10$ . Н. В. Харчевникова

М.А.



X. 1989, n 14

$\text{NH}_5^+$

OM 31629

1988

\* 6 Д114. Некоторые теоретические рассмотрения структуры аммонированного  $\text{NH}_5^+$ . Some theoretically based speculations on the structure of ammoniated  $\text{NH}_5^+$  / Kassab E., Fouquet J., Evleth E. M. // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 153, № 6.— С. 522—526.— Англ.

В приближении неограниченного метода Хартри — Фока проведены неэмпирич. расчеты структур аммонированных комплексов  $\text{NH}_5^+$ . За исключением некоторых слабосвязанных комплексов  $\text{NH}_4^+$  с H и  $\text{NH}_3^+$  с  $\text{H}_2$  не обнаружено значительных минимумов на гиперповерхности основного состояния  $\text{NH}_5^+$ . Однако следующий гомолог,  $\text{N}_2\text{H}_8^+$ , имеет димерную структуру  $\text{NH}_4^+\text{NH}_4$ , аналогичную  $\text{Na}_2^+$ . Рассчитанная энергия связи в  $\text{N}_2\text{H}_8^+$  равна 0,63 эВ, а расстояние между атомами N—N 4,4 А. Такие частицы могут быть получены экспериментально протонированием моноаммонированных ридберговских радикалов  $\text{NH}_4$ . Они, вероятно, метастабильны по отношению к потере атома H с образованием аммонированного иона  $\text{NH}_4^+$ . Аммонированные  $\text{N}_2\text{H}_8^+$  могут

М.А.

(H) X

ср. 1989, № 6

$\text{NH}_4^+ \text{NH}_4$

быть стабильными только в кластерах средних размеров.  
Г. К.





$[NH_3 H_2]^+$  1992  
Ischtwan Josef,  
Smith B. J. et al.

потенц.  
поверх.,  
ab initio  
расчет

J. Chem. Phys. 1992,  
97(2), 1191-210.

(см. ●  $[He H_2]^+$ ; III)

$NH_5^+$

1992

Radom Leo.

Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes

1992, 118-119, 339-68.

структур.  
параметр,  
vi, единицы.  
измеров, y,  
обзор.

(  $CH_4O^+$ ; III)

1997

thermodn. two state transition  
 128: 66700w  $\text{XH}_5^{2+}$  Dications and  $\text{XH}_6^{3+}$  Trications (X = N, P, and As). Rasul, Golam; Prakash, G. K. Surya; Olah, George A. (Donald P. and Katherine B. Loker Hydrocarbon Research Institute, University of Southern California, Los Angeles, CA 90089-1661 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1997, 119(52), 12984-12985 (Eng), American Chemical Society. Structures and stabilities of  $\text{XH}_5^{2+}$  dications and  $\text{XH}_6^{3+}$  trications (X = N, P, and As) were calcd. at the MP2/6-31G\*\* and QCISD(T)/6-311G\*\* levels of theory. The  $\text{C}_{4v}$  sym. 1,  $\text{C}_s$  sym. 3 and  $\text{C}_s$  sym. structure 7 were found to be the energy-min. for the  $\text{NH}_5^{2+}$ ,  $\text{PH}_5^{2+}$  and  $\text{AsH}_5^{2+}$  dications, resp. Each of the structures 3 and 7 contains a three-center two-electron (3c-2e) bond. Similarly, the  $\text{D}_{3h}$  sym. 2,  $\text{C}_{2v}$  sym. 6, and  $\text{C}_{2v}$  sym. structure 10 were found to be the energy-min. for the  $\text{NH}_6^{3+}$ ,  $\text{PH}_6^{3+}$  and  $\text{AsH}_6^{3+}$  trications, resp. The structures 6 as well as 10 were

characterized with two 3c-2e bonds and two 2c-2e bonds. Thermodyn. of the different modes of dissocns. of the di- and trications were also discussed.

~~These structures are the isolated~~

(+2)  $\Delta$

C.A. 1998, 128, N6

1)  $\text{PH}_5^{2+}$ ,  $\text{PH}_6^{3+}$   
 2)  $\text{AsH}_5^{2+}$ ,  $\text{AsH}_6^{3+}$



1998

130: 57439g Structure and properties of  $\text{NH}_5^{2+}$ : a dication with two 2-electron 3-center bonds. Del Bene, Janet E.; Watts, John D.; Bartlett, Rodney J. (Department of Chemistry, Youngstown State University, Youngstown, OH 44555 USA). *Int. J. Quantum Chem.* 1998, 70(4/5), 1003-1007 (Eng), John Wiley & Sons, Inc.. The dication  $\text{NH}_5^{2+}$  has been studied by state-of-the-art quantum chem. techniques.  $\text{NH}_5^{2+}$  is a square-based pyramid with  $C_{4v}$  symmetry. The apical H is bonded to N with a 2-electron covalent bond, while the other H atoms are bonded to N through degenerate 2-electron 3-center bonds. No other local min. exists on the potential energy surface. A  $C_{2v}$  transition state linking equiv.  $C_{4v}$  structures is only 1.35 kcal mol<sup>-1</sup> higher in energy. The barrier to deprotonation is 26.4 kcal mol<sup>-1</sup>.

cmp -pa,  
cmafrenbH,  
meop. pacit

C.A. 1999, 130, N 5

1999

F: NH<sub>5</sub><sup>+</sup>

P: 3

131:134888      The formation of the cluster ions NH<sub>5</sub><sup>+</sup> and (NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>H<sub>2</sub><sup>+</sup> and ab in calculation study of their structures. Li, Lian Bin; Liu, Xiang Hong; Wan Xiu Yan (State key Laboratory of Molecular Reaction Dynamics, Dalian Inst of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, Peop. Re China). Chin. Chem. Lett., 10(4), 321-324 (English) 1999      The mass spectra of cluster ions (NH<sub>3</sub>)<sub>n</sub>H<sub>2</sub><sup>+</sup> with n<4 were measured for th first time using a MPI mass spectrometer. The structures of NH<sub>5</sub><sup>+</sup> and (NH were calcd. using GAUSSIAN-94 package finding stable structures for both

C.A. 1999, 131