|  |
| --- |
|  |
| Рис. 1. Зависимость энергий молекулярных орбиталей NH2N2+  от межъядерного расстояния NH2—N2+. |

|  |
| --- |
|  |
| Рис. 2. Трассировка молекулярных орбиталей NH2N2+.  ***При сканировании энергии, с учетом пространственного подобия МО, можно определить что заполненные орбитали***  ***молекулярного азота трансформируются в орбитали № 1, 3, 4, 6, 9, 10, 11 катиона NH2N2+.*** |

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| Рис. 3. Энергетическая диаграмма молекулярных орбиталей при взаимодействии N2 и NH2+ c образованием NH2N2+. | |

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| Рис. 4. Особый случай, трансформация МО11 и МО14 NH2N2+, в молекулярные орбитали N2 и NH2+ соответственно,  с очень медленным разделением, вплоть до d(NH2+—N2)>50Å | |

|  |
| --- |
| Таблица 1.  **Энергия молекулярных орбиталей** |
|  |
|  |
| ***Занятые орбитали молекулярного азота понижают свою энергию на 2,063 Eh(102,5 %), а орбитали NH2+ катиона повышают***  ***энергию на 0,0588 Eh (-2,5 %).*** |

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Occupied molecular orbitals** | | | | | | | |
| № **MO** | **E(MO N2)** | **E MO(NH2+)** | **E MO(NH-N2+)** | **DE MO(N2)** | **DE MO(NH2+)** | **DE MO** | **%** |
| 1 | -14,450116 |  | -14,813807 | -0,363691 |  | -0,363691 | 28,97 |
| 2 |  | -14,889393 | -14,747831 |  | 0,141562 | 0,141562 | -11,28 |
| 3 | -14,44860 |  | -14,719726 | -0,271126 |  | -0,271126 | 21,60 |
| 4 | -1,13 |  | -1,458669 | -0,323683 |  | -0,323683 | 25,78 |
| 5 |  | -1,265568 | -1,298670 |  | -0,033102 | -0,033102 | 2,64 |
| 6 | -0,57 |  | -0,965855 | -0,400000 |  | -0,400000 | 31,86 |
| 7 |  | -0,891819 | -0,886050 |  | 0,005769 | 0,005769 | -0,46 |
| 8 |  | -0,744735 | -0,809290 |  | -0,064555 | -0,064555 | 5,14 |
| 9 | -0,471908 |  | -0,747709 | -0,275801 |  | -0,275801 | 21,97 |
| 10 | -0,47 |  | -0,738254 | -0,266329 |  | -0,266329 | 21,21 |
| 11\* | -0,438559 |  | -0,6 | -0,162383 |  | -0,162383 | 12,93 |
| **Sum** | **-31,981949** | **-17,791515** | **-51,786803** | **-2,063013** | **0,049674** | **-2,013339** |  |
| **%** | **61,76** | **34,36** |  | **102,47** | **-2,47** |  |  |
| **Unoccupied molecular orbitals** | | | | | | | |
|  | **E MO(N2)** | **E MO(NH2+)** | **E MO(NH-N2+)** | **dE MO(N2)** | **dE MO(NH2+)** | **dE MO** | **%** |
| 12 | -0,04 |  | -0,338540 | -0,298794 |  | -0,298794 | 23,80 |
| 13 |  | -0,265744 | -0,3 |  | -0,033564 | -0,033564 | 2,67 |
| 14\* |  | -0,610093 | -0,235372 |  | 0,374721 | 0,374721 | -29,85 |