

1979

1979

12

02

Н2

11 Д599. Изучение ламинарного водородного диффузионного пламени в воздухе методом комбинационного рассеяния света. Aeschliman D. P., Cummings J. C., Hill R. A. Raman spectroscopic study of a laminar hydrogen diffusion flame in air. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1979, 21, № 4, 293—307 (англ.)

Исследованы спектры комб. рас. ламинарного воздушно-водородного пламени при возбуждении лазерной линией 488,0 нм мощностью 1,5 Вт. Проведен теоретический расчет интенсивностей линий в колебательно-вращательных спектрах газообразных молекул N_2 , O_2 и H_2 . Описана конструкция эксперим. установки для регистрации спектров комб. рас. пламен. Идентифицированы компоненты вращательной структуры в спектрах комб. рас. N_2 и H_2 и Q-ветви колебаний в спектрах N_2 и O_2 . Определены значения T -ры ($2200^\circ K$) и конц-ии продуктов

колеб.-
- вращат.
спектр

(+2) X

ф. 1979, N 11

горения в пламени. Отмечено существенное различие
эксперим. и теоретич. профилей т-ры и конц-ии про-
дуктов горения в пламенах, причем реальная зона
пламени больше по диаметру и длине. Предположено,
что различие теоретич. и эксперим. параметров пламе-
ни не могут быть объяснены погрешностями скорости
потока газа, а также способом усреднения временных
и пространств. характеристик пламени и обусловлены
недостатками использованной численной модели пла-
мени. Библ. 24.

И. В. А.

1979

N₂

4 Д177. Расчет энергий двухзарядных молекулярных ионов методом HAM/3. Energies of doubly-charged molecular ions calculated using HAM/3. Åsbrink L., Fridh C., Lindholm E. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1979, 32, № 1, 93—96 (англ.)

Методом HAM/3 рассчитаны полные энергии N₂, CO, H₂O, NH₃, CO₂, N₂O, C₃O₂, C₂H₆, бензола, толуола, нафталина и их двухзарядных катионов. Полученные результаты согласуются с потенциалами появления ионов в масс-спектрах и данными оже-спектроскопии. Отмечено, что хотя в случае N₂ и бензола основные состояния дикатионов, по-видимому, должны быть триплетными, различия в энергиях триплетного и синглетного малы. В. Л.

расчет

(Е; А.Р.)

(+7) [X]

Ф. 1980 № 4

N₂

1949

6 Б110. Расчеты энергий двухзарядных молекулярных ионов методом BAM/3. Åsbrink L., Fridh C., Lindholm E. Energies of doubly-charged molecular ions calculated using HAM/3. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1979, 32, № 1, 93—96 (англ.)

Методом BAM/3 («Int. J. Quant. Chem.», 1978, 13, 331; 14, 737) рассчитаны нейтральные молекулы и двукратно заряженные положительные ионы N₂, CO, H₂O, NH₃, CO₂, N₂O, C₃O₂, бензола, толуола и нафталина и определены потенциалы появления (ПП) соотв-щих ионов. Рассчитанные ПП сопоставлены с эксперим. значениями, полученными методами масс-спектрометрии и оже-электронной спектроскопии. Отличие рассчитанных ПП от эксперим. составляет ~1 эВ и имеет ту же величину, что и разброс эксперим. ПП, полученных различными методами.

В. Фаустов

A.P.,

(+6) ☒

ж-1980.№6

1949

N₂

from

(спектр)

9 Д419. Силы осцилляторов полосы $W^3\Delta_u - X^1\Sigma_g^+$ молекулярного азота. Benesch William. Oscillator strengths for the $W^3\Delta_u - X^1\Sigma_g^+$ band system of molecular nitrogen. «Phys. Rev.», 1979, A19, № 2, 445—451 (англ.)
 На основании полученных спектров поглощения N₂ исследован сильно запрещенный переход $W^3\Delta_u - X^1\Sigma_g^+$.

0.1949, N9

В испускании $W \rightarrow X$ колебательные состояния ($v > 0$) терма $W^3\Delta_u$ должны слабо проявляться из-за пересечения с термом $B^3\Pi_g$, приводящего к переходам $W^3\Delta_u \rightarrow B^2\Pi_g$. Для колебательного уровня $W(0)$ может оказаться превалирующим переход $W \rightarrow X$ (благодаря наличию частотного фактора ν^3), что должно регистрироваться в области 2000 Å. Появлению УФ-излучения способствует сильное заселение уровня $W(0)$ низкоэнергетич. электронами. Определены силы осцилляторов различных переходов $W \leftarrow X$ и на основании этих значений вычислены времена жизни состояний $W(v)$.

В. Л. Бахрах

N₂

[common 9180]

1979

Brescansin L. M. et al

M. n.
Ei
y

J. Chem. Phys., 1979, 71,
n 12, 4923-30

Cu H₂ i III.

№2

1979

13 B223. Поведение вращательно-трансляционного спектра газообразного N_2 с изменением плотности. Buontempo U., Cansolo S., Dore P., Maselli P. Density behaviour of rototranslational spectrum of gaseous N_2 . «Mol. Phys.», 1979, 38, № 6, 2111—2115 (англ.)

спектр
плотности

Изучены вращательно-трансляц. спектры поглощения в области $10-400 \text{ см}^{-1}$ газ. азота при давл. вплоть до крит. при комн. т-ре. Обнаружено, что плотность влияет гл. обр. на низкочастотную часть контура линии, в то время как ВЧ-часть от плотности почти не зависит. На основании анализа моментов полученного спектра показано, что форма линий определяется сверткой вращательного и трансляц. факторов. Определены 2-й и 4-й моменты трансляц. фактора. Обнаружено, что нормированный 4-й момент растет с возрастанием плотности, а 2-й момент трансляц. профиля от плотности не зависит. Эффект объяснен возможным сужением вращательного контура в центральной области и возрастанием хвостов контура линии с увеличением плотности.

С. Б. Осин

Х 1980 N 13

N₂

f₀₀12

столкнов.
возбужд.

75-79
9 Д418. Столкновительное возбуждение состояния В молекул N₂. Carlson Thomas A., Durić Nada, Erman Peter, Larsson Mats. Collisional transfer to the B state in N₂. «Phys. scr.», 1979, 19, № 1, 25—28 (англ.)

Получены разрешенные во времени спектры испускания газообразного N₂, возбуждавшиеся импульсным электронным пучком. Исследована зависимость спектров в полосе $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$ ($v'=2, \dots, 12$) от давления N₂ и буферных газов He, Ne и Ar в диапазоне $6 \cdot 10^{-4} - 2 \cdot 10^{-2}$ мм рт. ст. Обнаружено резкое увеличение времен жизни состояний с $v'=6, 7, 11$ и 12 и соответствующих интенсивностей в спектрах при росте давления N₂ или смеси N₂ с буферными газами. Эффект объяснен наличием резонансного возбуждения состояния В(N₂) в столкновениях с метастабильными частицами. Отмечено, что механизм энергетич. обмена окончательно не установлен и требует более детального изучения. Оценка скорости столкновительного возбуждения состояния В(N₂) дала $\sim 10^{-10}$ см³сек⁻¹молек⁻¹. Определена сила осциллятора для 0—0-перехода исследованной системы: $f_{00}^{abc} = (1,69 \pm 0,15) \cdot 10^{-3}$. Библ. 16. М. Т.

ф. 1979, N 9

12

спектр

ж. 1979, N 11

1979

11 Б1336. Испускание света в вакуумной УФ-области электронно-возбужденными молекулами N_2 . Излучательное время жизни N_2 в состоянии $a^1\Sigma_u^-$. Cassassa M. P., Golde M. F. Vacuum UV emission by electronically-excited N_2 : the radiative lifetime of the $N_2(a^1\Sigma_u^-)$ state. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 60, № 2, 281—285 (англ.)

В области послесвечения электрич. разряда постоянного тока в смеси N_2 —Ar состава 1:100 при полном давл. 1—5 мм изучены спектры испускания N_2 в диапазоне 140—200 нм. Расстояние от зоны разряда до зоны регистрации спектра соответствовало времени прохождения газового потока ~ 1 мсек. Наблюдали излучение света с уровней $v'=0$ электронных состояний $a^1\Pi_g$ и $a^1\Sigma_u^-$ молекул N_2 , а также намного более слабое излучение с уровней $v'=1$ и 2 N_2 ($a^1\Pi_g$). Для системы полос запрещенного перехода $N_2(a^1\Sigma_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+)$ ($0, v''$) распределение интенсивностей представлено след. выражением для момента электронного перехода: $R_e(r) = 0,300 + 3,30 \cdot 10^3 \exp(-70,6r)$, где r — r -центрond этого перехода, величина k -рого варьирует

в диапазоне 0,120—0,136 нм. Излучательное время жизни τ $N_2(a')$ -состояния сильно зависит от вращательного квантового числа J , меняясь в 500 раз в диапазоне изменения J от 1 до 31: при $J=1$ $\tau > 1$ сек, а при больших значениях J $\tau \sim$ нсек, мсек. Среднее эффективное значение $\tau = 0,017$ сек. Оно уменьшается с ростом τ -ры. Показано, что главный канал тушения молекул $N_2(a^1\Pi_g, v=0)$ столкновениями с атомами Ag состоит в образовании $N_2(a^1\Sigma_g^-, v=0)$. На основании полученных данных представлена след. картина превращений синглетных возбужденных молекул N_2 в зоне послесвечения. В разряде в разбавленных смесях N_2 с Ag преобладает возбуждение в $N_2(a')$ -состояние. Распад высоковозбужденных уровней $N_2(a')$ и $N_2(a)$ излучательным путем или путем столкновительной релаксации $a \leftrightarrow a'$ происходит за время $\sim 10^{-4}$ сек, так что через промежуток времени 1 мсек, когда наблюдается послесвечение, преобладает заселение уровня $N_2(a', v=0)$. Дезактивация этого уровня может происходить несколькими путями: 1) излучательным — непосредственно с этого уровня или через $N_2(a, v=0)$ после столкновительного возбуждения, причем оба эти процесса имеют близкие скорости; 2) путем столкновительного тушения с переходом в низшие электронные состояния — непосредственно из $N_2(a', v=0)$ — состояния или косвенным путем через $N_2(a, v=0)$ — состояние. Показано, что второй процесс не является определяющим: по оценкам его константа скорости не превышает $\sim 10^{-14}$ см/молекула·сек.

В. Е. Скурат

1979

N₂Электр-
-возбужд.
молекула

6 Д429. Эмиссия электронно-возбужденной молекулы N_2 в вакуумной УФ-области: радиационное время жизни состояния $N_2(a'^1\Sigma_u^-)$. Casassa M. P., Golde M. F. Vacuum UV emission by electronically-excited N_2 . The radiative lifetime of the $N_2(a'^1\Sigma_u^-)$ state. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 60, № 2, 281—285 (англ.)

С разрешением 0,25 и 0,05 нм исследовано излучение $N_2(a'^1\Sigma_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+)$ в смеси N_2 ($\approx 1\%$) и Ar. На основе обнаруженной экспоненц. зависимости момента электронного перехода от межъядерного расстояния выполнена оценка радиационного времени жизни состояния $N_2(a'^1\Sigma_u^-)$. Отмечена необычность эмиссионных свойств этого состояния: резкая зависимость радиационного времени жизни от энергии вращательного движения молекулы. Так, при изменении вращательного квантового числа от 1 до 31 время жизни состояния меняется от 1 сек до нескольких мсек. Проанализирован механизм индуцированных столкновениями переходов в системе N_2 —Ar и показано, что основным каналом распада состояния $N_2(a, v=0)$ является релаксация в состояние $N_2(a', v=0)$.

А. В. Н.

сп. 1979, № 6

N₂

[Summich 8327 / 1979]

Kb, α ex,
factor,
E,

Castro E.A.

Int. J. Quant. Chem.,
1979, 15, 355-358.

N₂

XIII - 5534

1979

4 Д412. Переработка таблицы Деландра для первой отрицательной системы переходов молекулы N₂.
A reinvestigation of the Deslandres table of the nitrogen first negative system. Chevaleyre J., Perrot J. P. «Phys. Lett.», 1979, A73, № 3, 175—176 (англ.)

4.17.

С высоким разрешением сфотографирован спектр испускания молекул N₂ в области 18000—31000 см⁻¹. Спектр возбуждался импульсным микроволн. разрядом в смеси N₂/Ne. Анализ вращательной структуры полос системы $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$ позволил отождествить ряд ранее не наблюдавшихся полос и внести поправки в таблицу Деландра.

Ф. 1980 N 4

[number 8514]

N₂

DeFrees D. J., et al 1979

paper
published
concern

J. Amer. Chem. Soc.,
1979, 101 (45), 4085-89

(see, H₂; IV)

опиши: 7608 1979

N₂

13 Б522. Спектр азота в твердом состоянии в области вакуумного ультрафиолета, чистый азот и азот в матрице неона. Dregir B., Holmes I., Sauer M., Scullman R. Vacuum ultraviolet spectrum of nitrogen in the solid state; pure and trapped in a neon matrix. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 61, № 2, 370—374 (англ.)

спектр

С использованием синхротронного излучения в качестве источника возбуждения проведены измерения спектра отражения для тв. N₂ в области длин волн 500—1300 Å. Толщина слоев тв. N₂ варьировалась от 35 до 5250 Å. Измеренный спектр отражения хорошо согласуется с известными спектрами поглощения тв. N₂ в области длин волн 900—1000 Å. Проведены также измерения спектра отражения N₂ в матрице Ne при соотношениях N₂/Ne: 1/500, 1/100, 1/10, 1/1 и 10/1. В этих спектрах при возрастании концентрации N₂ наблюдается сдвиг минимума поглощения в область больших длин волн.

И. А. Тополь

Х. 1979, № 13

N₂

B47-XI-6249
Dunlap B. J. et al

1979

paper

J. Chem. Phys., 1979, 71,
n 12, 4993-99

Ze, Do
u. n.



Cu H₂

III

1979

№2

5 Д185. Неэмпирические расчеты поляризуемостей и электрон-молекулярных адиабатических поляризационных потенциалов по методу самосогласованного поля. Ч. III. N₂. Ab initio self-consistent-field polarizabilities and electron-molecule adiabatic polarization potentials. III. N₂. Eades Robert A., Truhlar Donald G., Dixon David A. «Phys. Rev.», 1979, A20, № 3, 867—878. (англ.)

кв. мех.
расчет

Произведены расчеты статической дипольной поляризуемости α молекулы азота в однородном электрич. поле, а также адиабатич. потенциалов взаимодействия молекулы N₂ с точечным зарядом $-e$, расположенным на расстоянии r от центра молекулы (на оси молекулы или на плоскости, проходящей через центр молекулы перпендикулярно к линии связи). Расчеты выполнены для различных базисных наборов гауссовского типа, содержащих 18—48 сжатых гауссовых ф-ций. Найдено, что поляризуемости и адиабатич. поляризации по-

Ф. 1980 № 5

тенциалы довольно сильно зависят от числа базисных ф-ций. Обсуждение результатов, полученных для 9 различных базисов, приводит к следующим выводам: точность расчетов не пострадает, если использовать базисные ф-ции, центрированные на середине связи (что дает значительную экономию вычислительного труда); в базис необходимо включить диффузные s -, p - и d -орбитали, роль которых особенно велика в расчетах α_1 ; при использовании нескольких десятков сжатых гауссовых ф-ций точность расчета поляризуемости составляет $\sim 10\%$, а при малом числе базисных ф-ций (18 и 26 ф-ций) погрешность расчета поляризуемости составляет соответственно 26 и 31%. ——— В. Н. Р.

ommuu 8424

1979

N₂

M. R.

91: 65544d High-resolution Fourier spectrometry of diatomic nitrogen-14 infrared emission spectrum. Analysis of the (2-0) band of the $W^3\Delta_u \rightarrow B^3\Pi_g$ system. Effantin, C.; D'Incan, J.; Bacis, R.; Verges, J. (Lab. Spectrom. Ionique, Univ. Claude Bernard, Lyon I, F-69621 Villeurbanne, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 76, 204-20 (Eng). The rotational anal. of the (2-0) band of the $W^3\Delta_u \rightarrow B^3\Pi_g$ system of $^{14}\text{N}_2$ was performed from high resolu. Fourier records. The exptl. wavenumbers were reduced to mol. parameters by using an iterative nonlinear least-squares procedure. The values obtained for the $v = 2$ level of the $W^3\Delta_u$ state are (cm⁻¹): $T = 12,563.5132$, $A = 5.7091$, $e = 0.4502$, $B = 1.427647$, $D = 5.648 \times 10^{-6}$, $p = 0.0115$.

Q. A. 10429118

оттиски 8424

№2

1 Д370. Исследование ИК-спектра излучения высоко-
го разрешения молекулы $^{14}\text{N}_2$ на фурье-спектрометре
высокого разрешения. Анализ полосы (2—0) системы
 $W^3\Delta_u \rightarrow B^3\pi_g$. High resolution Fourier-spectrometry of
 $^{14}\text{N}_2$ infrared emission spectrum. Analysis of the (2—0)
band of the $W^3\Delta_u \rightarrow B^3\pi_g$ system. Eflantin C., D'In-
can J., Bacis R., Verges J. «J. Mol. Spectrosc.»,
1979, 76, № 1-3, 204—220 (англ.)

1979

М. П.

С помощью Фурье-спектрометра с разрешением
 $\approx 0,01 \text{ см}^{-1}$ исследованы ИК-спектры излучения моле-
кул $^{14}\text{N}_2$ и $^{15}\text{N}_2$, возбужденных в разряде. Идентифици-
рована вращательная структура колебательной полосы
2—0 системы электронного перехода $W^3\Delta_u \rightarrow B^3\pi_g$. Оп-
ределены значения молекулярных констант для состоя-
ния $W^3\Delta_u$: $T=12563,5132$, $A=5,7091$, $C=0,4502$, $B=$
 $=1,427647$, $D=5,648 \cdot 10^{-6}$, $p=0,0115$ (все в см^{-1}).
М. Р. Алиев

Ф. К. Р. А. И.

от ттсс 8424

1970

4 Б133. Фурье-спектроскопия высокого разрешения инфракрасного спектра испускания молекулы $^{14}\text{N}_2$. Анализ полосы 2—0 системы $W^3\Delta_u - B^3\Pi_g$. Effantin C., D'Incan J., Bacis R., Verges J. High Resolution Fourier Spectrometry of $^{14}\text{N}_2$ Infrared Emission Spectrum. Analysis of the (2—0) Band of the $W^3\Delta_u \rightarrow B^3\Pi_g$ System. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 76, № 1—3, 204—220 (англ.)

Измерена и проанализирована вращательная структура полосы 2—0 перехода $W^3\Delta_u - B^3\Pi_g$ в ИК-спектре испускания ($\sim 3000 \text{ см}^{-1}$) молекулы $^{14}\text{N}_2$. Спектр измерялся с помощью фурье-спектрометра высокого разрешения. В спектре выделено 42 ветви, из к-рых 18 наиболее интенсивных ветвей отнесены к главным ветвям ($\Delta\Sigma=0$) перехода $^3\Delta - ^3\Pi$ с учетом спинного удвоения в обоих состояниях и Λ -удвоения в трех $^3\Pi$ подсостояниях. Абс. нумерация по I проводилась методом комбинац. разностей. Получены след. молек. постоянные $^{14}\text{N}_2$ ($W^3\Delta_u$, $v=2$) (в см^{-1}): T (относительно уровня $v=0$, $J=0$ состояния $A^3\Sigma_u^+$) = 12563,5132, $A=5,7091$, $e=0,4502$, $B=1,427647$, $D=5,648 \times 10^{-6}$, $P=0,0115$. В. М. Ковба

21980.14

summary 8422

1979

91: 46785s Analysis of the (0-0), (1-0), and (2-0) bands of the $B^3\Pi_g \rightarrow A^3\Sigma_u^+$ system of diatomic nitrogen-14 and -nitrogen-15. Effantin, C.; Amiot, C.; Verges, J. (Lab. Spectrom. Ionique Mol., Univ. Lyon I, 69621 Villeurbanne, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 76, 221-65 (Eng). The (0-0), and (2-0) bands of the $B^3\Pi_g \rightarrow A^3\Sigma_u^+$ emission system of $^{14}\text{N}_2$ and $^{15}\text{N}_2$ and $^{15}\text{N}_2$ were recorded under high resolu. with a Fourier transform interferometer. The whole set of wavenumbers was reduced to mol. parameters by a complete fitting procedure. The mol. consts. for the $\delta = 0, 1, 2$, levels of the $B^3\Pi_g$ state and for the $v = 0$ level of the $A^3\Sigma_u^+$ state were computed and tabulated; equil. consts. were derived for the $B^3\Pi_g$ state.

$^{14}\text{N}_2$
 $^{15}\text{N}_2$

M. H.

C.A. 1979, 91, N6

8422

167 20

112

1 Д320. Анализ полос 0—0, 1—0 и 2—0 системы $B^3\Pi_g \rightarrow A^3\Sigma_u^+$ молекул $^{14}\text{N}_2$ и $^{15}\text{N}_2$. Analysis of the (0—0), (1—0), and (2—0) bands of the $B^3\Pi_g \rightarrow A^3\Sigma_u^+$ system of $^{14}\text{N}_2$ and $^{15}\text{N}_2$. Effantin C., Amiot C., Verges J. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 76, № 1-3, 221—265 (англ.)

112

Спектр испускания молекулярного N в области 2500—15 000 см^{-1} исследован с высоким разрешением методом фурье-спектроскопии. Выполнен вращательный анализ полос 0—0, 1—0 и 2—0 системы $B^3\Pi_g \rightarrow A^3\Sigma_u^+$ молекул $^{14}\text{N}_2$ и $^{15}\text{N}_2$. Определены молекулярные постоянные для уровней $v=0, 1, 2$ состояния $B^3\Pi_g$ и $v=0$ состояния $A^3\Sigma_u^+$. Для состояния $B^3\Pi_g$ рассчитаны также равновесные константы. Библ. 16. В. С. Иванов

9.1980.112

4 Б141. Анализ полос 0—0, 1—0 и 2—0 системы $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+ {}^{14}\text{N}_2$ и ${}^{15}\text{N}_2$. Effantin C., Amiot C., Verges J. Analysis of the (0—0), (1—0), and (2—0) Bands of the $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$ System of ${}^{14}\text{N}_2$ and ${}^{15}\text{N}_2$. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 76, № 1—3, 291—265. (англ.)

С помощью фурье-интерферометра с высоким разрешением измерена вращательная структура полос 0—0, 1—0 и 2—0 перехода $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$ в спектре испускания молекул ${}^{14}\text{N}_2$ и ${}^{15}\text{N}_2$. Спектр возбуждался в безэлектродном разряде. Получены след. значения молек. постоянных ${}^{14}\text{N}_2$ (приведены также данные для ${}^{15}\text{N}_2$); состояние $A^3\Sigma_u^+ - B_{\Sigma\text{эфф.}} = 1,445763$, $D_{\Sigma} = 5,792 \times 10^{-6}$, $H_{\Sigma} = -3,1 \times 10^{-12}$, $\gamma_{\Sigma\text{эфф.}} = -0,002715$, $\varepsilon_{D\Sigma} = 1,6 \times 10^{-6}$, $\gamma_{D\Sigma} = 1,4 \times 10^{-8}$; состояние $B^3\Pi_g - \omega_e = 1734,0614$, $\omega_e x_e = 14,4371$, $A_e = 42,2556$, $\alpha_A = 0,0465$, $B_e = 1,637864$, $\alpha_B = 0,018110$, $\beta_B = -54 \times 10^{-6}$, $D_e = 5,840 \times 10^{-6}$, $\alpha_D = 0,036 \times 10^{-6}$, $p_e = -9,05 \times 10^{-3}$, $q_e = -1,74 \times 10^{-4}$, $\bar{A}_{De} = 0,73 \times 10^{-4}$, $\bar{\gamma}_e = -8,6 \times 10^{-4}$ (в см^{-1}).

В. М. Ковба.

Commun 8301

1979

N₂

CO

BF

HF

(K_c
cum. corr.)

90: 177253u Vibrational force constants for diatomic molecules from rigid pseudoatoms. Epstein, Joel; Stewart, Robert F. (Dep. Chem., Carnegie-Mellon Univ., Pittsburgh, Pa.). *J. Chem. Phys.* 1979, 70(4), 1798-801 (Eng). The quadratic vibrational force const. for a diat. mol. can be evaluated from generalized x-ray scattering factors if the expansion contains at least dipole scattering factors and if the 1st deriv. of these functions with respect to R are known. Rigid pseudoatoms are defined as the finite multipole set, $[L/K]$, of generalized x-ray scattering factors detd. at R_e . For this case, the quadratic force const. est. depends on the pseudoatom charge d. on the neighboring nucleus and on the pseudoatom contribution to the field gradient about the neighboring nucleus. A previous est. for H₂ is in error. The ests. of k_e for N₂, CO, BF, and FH from [2/2] rigid pseudoatoms are calcd. and are too large by >50%. The radial relaxation terms reduce these values to the correct k_e .

(+3) ⊗

C.A. 1979, 90, N22

1979

N2

Feldman D.

сериализован: "Opt. Continuer." 1979, 29,
дл. рефлекс N1, 64-42

сер. N1/2 - II

1979

N₂

CO

4 Д145. Самосогласованное вычисление электронной структуры N₂ и CO ячеечным вариационным методом. Self-consistent calculation of the electronic structure of N₂ and CO by the variational cellular method. Ferreira Luiz G., Leite José R. «Phys. Rev.», A20, № 3, 689—699 (англ.)

Ячеечный вариационный метод (ЯВМ), общая формулировка которого для молекул и кристаллов дана авторами ранее («Phys. Rev.», 1978, A18, 335) применен к изучению электронной структуры двухатомных молекул. Отмечены два главных достоинства предложенного метода по сравнению с самосогласованным X_α -методом рассеянных волн (ССП— X_α —РВ): устранение ячейного приближения и произвола в разбиении молекулярного пространства. Построен точный самосогласован-

расчет
по
кривым

41

Ф. 1980 № 4

ный одноэлектронный потенциал в пределах ячеек, вычислена полная молекулярная энергия, а также обсужден вопрос о выборе ячеек. Вычислены потенц. кривые основного состояния молекул CO и N₂ и орбитальные энергии связей. Результаты сравниваются с данными, полученными ограниченным методом Хартри-Фока и методом ССП— X_α —РВ. Сделан вывод о том, что ЯВМ является более точным (отклонение от эксперим. энергий связей и равновесных расстояний менее 10%), по крайней мере для двухатомных молекул. В. В. Россихин



N₂

92: 31144d The ${}^5\Pi_u - {}^5\Sigma_g^+$ transition in dinitrogen. Krauss, M.; Neumann, D. B. (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Bureau Stand., Washington, DC 20234 USA). *Mol. Phys.* 1979, 37(6), 1661-7 (Eng). Accurate electronic energy curves and wave functions of the ${}^1{}^5\Pi_u$ and ${}^1{}^5\Sigma_g^+$ states of N_2 were calcd. by the MC-SCF method. The calcd. equil. bond length and bond energy for the ${}^5\Pi_u$ state agree reasonably with ests. based on predissocn. of the $C^3\Pi_u$ state. The vertical transition energy, ${}^5\Pi_u - {}^5\Sigma_g^+$, was calcd. to be $\sim 1.8-1.9$ eV. The calcd. transition probability is zero asymptotically but increases rapidly with decreasing sepn., due to the different $s-p$ mixing in the MOs of the 2 states. At an internuclear distance of $1.6\text{\AA}$ the transition probability is $\sim 2 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ (lifetime $5 \mu\text{s}$) for the ground vibrational level. The dominant contributions to the transition probability arise from the nonorthogonality of the MC-SCF MOs of the 2 states.



C.A. 1980.92, N4

24 Б11. Переход ${}^5\Pi_u \rightarrow {}^5\Sigma_g^+$ в N_2 . Krauss M., Neumann D. B. The ${}^5\Pi_u \rightarrow {}^5\Sigma_g^+$ transition in N_2 . «Mol. Phys.», 1979, 37, № 6, 1661—1671 (англ.)

1979

Многоконфигурационным методом самосогласованного поля (МК ССП) рассчитаны потенциальные кривые низших состояний ${}^5\Pi_u$ и ${}^5\Sigma_g^+$ молекулы N_2 , коррелирующие с диссоциац. пределом $N(^4S) + N(^2D)$. Приведены также результаты для второго ${}^5\Pi_u$ состояния, связанного с пределом $N(^4S) + N(^2P)$. Отмечено наличие невысокого барьера на потенциальной кривой первого состояния ${}^5\Pi_u$. Проанализировано изменение вкладов различных электронных конфигураций в полную энергию рассматриваемых состояний при изменении межъядерного расстояния. Энергия вертикального перехода ${}^5\Pi_u \rightarrow {}^5\Sigma_g^+$ оценена в 1,8—1,9 эв, что должно приводить к линиям поглощения в области 690—650 нм. Показано, что момент перехода между данными состояниями быстро меняется с межъядерным расстоянием R . Вероятность перехода возрастает с уменьшением R и достигает $2 \times 10^5 \text{ сек}^{-1}$ при $R = 1,6 \text{ \AA}$. Время жизни основного колебательного уровня состояния ${}^5\Pi_u$ оценено в 5 мсек. Наиболее существенные вклады в вероятность перехода связаны с неортогональностью МО обоих состояний в приближении МК ССП.

А. В. Немухин

N_2

м. н.
потенц.
кривые

2. 1979, 124

N₂

7 Д371. ВУФ-спектроскопия высокого разрешения изолированных в матрицах молекул с использованием синхротронного излучения: N₂ в Ne. High resolution VUV matrix isolation spectroscopy using synchrotron radiation: N₂ in Ne. Gürtler P., Koch E. E.—Contributed Papers from the XIV. th European Congress on Molecular Spectroscopy, Frankfurt, 1979. Part 2. — «J. Mol. Struct.», 1980, 60, 287— (англ.) 1979

спектр
поглощения

С высоким разрешением получен спектр поглощения молекул N₂ в Ne-матрице. В спектре идентифицированы как разрешенные переходы с состояния $b^1\Pi_u$ и $b^1\Sigma_u^+$, расположенные в области 12,4—14,0 эв, так и запрещенные переходы в состояния $W^1\Delta_u$ и $a^1\Pi_g$ в области 8,0÷11,0 эв. Все четыре перехода содержат длинные прогрессии резких полос ($\Gamma \sim 10$ мэв) вследствие снятия в матрице возмущений, обусловленных взаимодействиями с ридберговскими состояниями. В результате анализа спектра с привлечением соображений симметрии сделано заключение, что молекулы N₂ ориентированы в матрице в направлении (1,1,1). Для многих полос прогрессий наблюдалась тонкая структура, обусловленная динамич. взаимодействиями возбужденных молекул с матрицей.

В. С. Иванов

ф. 1980. п 7

N₂

ЗР-ХІ- 6332 1979

Гусев Г. А. и др.

(Г)
З.А. Гусев.

Ис. открыт. Звезда 1979,
20, N 5, 777-80

евр. F₂-III

Ne

1979

Hall M. B., et al.

Int. J. Quantum Chem.,
Quantum Chem. Symp.
1979, 13, 195-203.

(y)
(u, w, z)



cel. H₂O - III

N₂

спектр
показан.

193

1 Д369. Температурная зависимость индуцированного столкновениями поглощения в газообразном N₂. The temperature dependence of collision-induced absorption in gaseous N₂. Harries J. E. «J. Opt. Soc. Amer.», 1979, 69, № 3, 386—393 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения сжатого газообразного азота при давл. до 70 атм. в области 20—200 см⁻¹ при т-рах 200, 293, 320 и 353° К, индуцированные столкновениями молекул. Интегральные и спектральные изменения интенсивности при изменении т-ры описаны показательным законом. Наблюдаемый спектр связан с вращательными переходами молекул. Сравнением рассчитанной интенсивности спектра с опытными данными определен квадрупольный момент молекулы Q. Эта величина найдена также с использованием соотношений Крамерса — Кронига. Полученные величины хорошо согласуются между собой и с опубликованными ранее. Зависимость величины Q от т-ры указывает на неудовлетворительность теоретич. представлений. Наблюдаемые спектры использованы для расчетов спектральных свойств атмосферы в холодных районах планеты. Показана необходимость учета индуцированного спектра азота в таких расчетах. Библ. 33.

М. Тонков

Ф. 1980.112

1979

№2

9 Д462. Определение температуры по колебательно-вращательным ветвям Q в спектрах комбинационного рассеяния. Hill R. A., Mulac D. P., Aeschliman D. P., Flower W. L. Temperatures from rotational-vibrational Raman Q-branches. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1979, 21, № 3, 213—220 (англ.)

Спектр
К.Р.,
интенсивн

Разработана математич. процедура определения т-ры и плотности газа по спектру изотропного комб. рас. двухатомных молекул в основном электронном состоянии $^1\Sigma$. На примере N_2 выполнены расчеты интенсивности и производных от интенсивности по обратной т-ре с учетом полос горячих переходов с уровней до $v=4$ и т-р $1500-3000^\circ K$ и влияния аппаратной ф-ции прибора. Определены точки, в которых нужно измерять спектр для получения наибольшей точности в значениях т-ры и плотности. Метод иллюстрируется анализом спектра пламени метан/воздух, найденные значения т-ры и плотности равны соответственно $1888^\circ K$ и $0,115 \text{ кг/м}^3$.

М. Тонков

Ф. 1979, №9

N₂

Hubač J, et al. 1979

papers
sources

Chem. Phys. Lett.,
1979, 62 (3), 584-88

●
(see BH; 14)

N₂

commun 8785

1979

Huber-Wä'chli P,
et al.

Радан
енерг
Wi

Chem. Phys. Lett; 1979,
64 (2,3), 233-36.



N₂

ommuu 7806

1979

Inglesfield J. E.

onepus

Chen

Mol. Phys., 1979, 37

factor (3), 889 - 903

№2

имени 7765 1979

имени

Janča J; Talser A.

сметр.
мкми

Czechoslov. J. Phys.

1979, B29, (3)

329-37.

(C³N₂, B³N₂)

1979

N₂H₂CO₂

92: 101658a Evaluation of molecular quadrupole moments of nitrogen, hydrogen, and carbon dioxide from the broadening of rotational lines of highly asymmetric molecule acetaldehyde. Johri, G. K.; Gupta, S. (Phy. Dep., Dayanand Anglo Vedic Coll., Kanpur, 208 001 India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1979, 17(6), 377-80 (Eng). Mol. quadrupole moments of N₂, H₂ and CO₂ were evaluated from the broadening of the 4 rotational lines of MeCHO. An interruption function under the Anderson's theory [formulated by G. K. Johri and S. L. Srivastava (1977)] was used in the calcs. in which only dipole-quadrupole interaction were considered.

квadrupольн.
момент.

(+2) ☒

Q. A 1080. 92 N 12

1979

N₂C₂Molecular
charge

91:181825v On the bond order of diatomic carbon and molecular nitrogen. Jug, Karl; Bussian, Bernd M. (Theor. Chem., Univ. Hannover, D-3000 Hannover, Fed. Rep. Ger.). *Theor. Chim. Acta* 1979, 52(4), 341-4 (Eng). The commonly adopted bond order values of C₂ and N₂ are critically investigated with a new bond order concept. Ab initio calcs. with extended basis sets suggest that C₂ can be described by a double to triple bond closer to acetylene than to ethylene and N₂ by a triple bond. The basis set dependence is discussed. Also a relation between the no. of basis functions, MO's and non-vanishing eigenvalues of the bond order parts of the d. matrix is presented.

(41)

D

C. A. 1979, 9, N22

N₂

Lomnick 8459 1979

Ritacca K., et al.

u.n.

Chem. Phys. Lett.

1979, 65 (2), 206-211

N2

[номер 8480]

1979

Kononov D. D., et al.

Chem. Phys. Lett. 1979, 65,
N3, 494-99.

фрагмент
кривых
номериз. и
привед. вал.



сел. В2 - II

1949

N₂

11 Д445. Нарушение теоремы Купманса и интенсивные полосы «встряски» в фотоэлектронном спектре валентной оболочки молекул N₂. Kosugi Nobuhiro, Kuroda Haruo, Iwata Suehiro. Breakdown of koopmans' theorem and strong shake-up bands in the valence shell region of N₂ photoelectron spectra. «Chem. Phys.», 1979, 39, № 3, 337—349 (англ.)

(y)

Неэмпирическим методом с учетом конфигурац. взаимодействия рассчитаны поправки к значениям первых трех потенциалов ионизации молекулы N₂, предсказываемым теоремой Купманса. Анализ результатов расчета показал, что наибольшие поправки, например к энергии орбитали v , обусловлены процессом $ij \rightarrow k\infty$ ($i, j \neq v$), т. е. процессом возбуждения электрона с орбитали Φ_i или Φ_j на вакантную Φ_k с одновременной ионизацией другой орбитали. Отмечено, что при наличии указанных взаимодействий следует ожидать присутствия интенсивных полос «встряски» валентной оболочки N₂ в фотоэлектронном спектре в области 24—32 эв. Значения рассчитанных потенциалов ионизации хорошо согласуются с экспериментальными. Библ. 33.

М. Т.

CP. 1979, N 11

№ 2

фотоэлектр.
спектр

22 Б143. Нарушение теоремы Купманса и интенсивные сателлиты монополюного возбуждения в валентной области фотоэлектронного спектра N_2 . Kosugi Nobuhiro, Kuroda Haruo, Iwata Suehiro. Breakdown of Koopmans' theorem and strong shake-up bands in the valence shell region of N_2 photoelectron spectra. «Chem. Phys.», 1979, 39, № 3, 337—349 (англ.)

1979

Выполнен неэмпирич. расчет молекулы N_2 в базисе сгруппированных гауссовых ф-ций $9s5p-4s2p$, дополненном гауссовыми функциями s - и p -типа, центрированными посередине связи $N-N$. Полученные заполненные МО, а также вычисленные с помощью потенциала иона виртуальные орбитали, использованы для рассмотрения нескольких ионных состояний молекулы N_2 методом КВ. Для первых трех энергий ионизации получены след. результаты (эв, в скобках приведены эксперим. значения): $X^2\Sigma_g^+(3\sigma_g^{-1})$ 15,16 (15,60) $A^2\Pi_u-(1\pi_u^{-1})$ 16,57 (16,98) и $B^2\Sigma_u^+(2\sigma_u^{-1})$ 18,73 (18,78). Обсуждены корреляц. поправки различных типов к одноэлектронным энергиям. Показано, что основная поправка к энергии ионизации орбитали ν обусловлена многоэлектронным процессом, соответствующим воз-

2. 1979, № 2

возбуждению одного электрона с орбитали i на орбиталь k и ионизации др. электрона с орбитали j ($i \rightarrow k, j^{-1}$), где $i, j \neq v$. Эта поправка, необходима для правильного описания последовательности уровней (теорема Купманса дает обратный эксперим. порядок первых двух уровней). Логичные результаты получены для первых трех энергий ионизации молекулы CO. Из расчетов следует, что сильное смещение состояний v^{-1} и $i \rightarrow k, j^{-1}$ обуславливает также интенсивные сателлиты в фотоэлектронных спектрах N_2 в области энергий связи 24—35 эв. Вычисленные энергии сателлитов хорошо согласуются с эксперим. данными. Проведено обсуждение синглетных и триплетных возбуждений $i \rightarrow k$ в терминах метода валентных схем. Результаты сопоставлены с лит. данными расчетов методом функций Грина и методом ур-ний движения.

М. М. Гофман

1979

N2

12 Д121. Переход $^5\Pi_u - ^3\Sigma_g^+$ в N_2 . The $^5\Pi_u - ^3\Sigma_g^+$ transition in N_2 . Krauss M., Neumann D. B. «Mol. Phys.», 1979, 37, № 6, 1661—1671 (англ.)

Многоконфигурационным методом ССП рассчитаны потенц. кривые электронных состояний $^5\Pi_u$ и $^5\Sigma_g^+$ молекулы N_2 . Базис включал расширенный набор слэтеровских АО s -, p - и d -типов. Рассчитанные значения R_e и D_e состояния $^5\Pi_u$ хорошо согласуются с эксперим. данными, полученными при изучении преддиссоциации состояния $C^3\Pi_u$. Вертикальная энергия перехода $^5\Pi_u - ^5\Sigma_g^+$ составила 1,8—1,9 эв. Рассчитана также вероятность этого перехода для различных межъядерных расстояний. При $R=1,6$ Å вероятность перехода составляет $2 \cdot 10^5$ сек $^{-1}$, что соответствует времени жизни основного колебательного уровня 5 мксек. Отмечается, что большая вероятность перехода и ее резкая зависимость от межъядерного расстояния являются следствиями изменения $s-p$ -смешивания в МО двух состояний.

А. Дементьев

рассчит
потенц.
кривых

Ф.1979 N12

L-N₂
(тверд.)

грозная
полоса

2. 1979, N 19

19 Б168. Индуцированная интенсивность и форма
полос системы $W'\Delta_u - X'\Sigma_g^+$ в спектре чистого твердого $\alpha\text{-N}_2$. Kunsch P. L., Boursey E. Induced intensity and band shape of the $W'\Delta_u - X'\Sigma_g^+$ system in pure solid $\alpha\text{-N}_2$. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 2, 731—735 (англ.) 1979

Рассмотрен механизм индуцирования орбитально-запрещенного перехода $W'\Delta_u - X'\Sigma_g^+$ в спектре чистого тв. $\alpha\text{-N}_2$. Для описания возбужденных состояний использованы одноцентровые орбитали возмущенные статич. крист. полем. Крист. поле, образованное квадрупольными моментами молекул, смешивают состояния $'\Delta_u$ и $'\Pi_u$, в результате чего имеет место заимствование интенсивности диполь-разрешенных переходов $'\Pi_u - X'\Sigma_g$ ($'\Pi_u$ — состояния ридберговской серии ($\text{N}_2 + A^2\Pi_u$) $hd\delta_g$). Статически индуцированная интенсивность перераспределяется внутри фононной структуры стоковского типа через полносимм. локальные колебания циклов и либрац. колебания (последние вносят значительно меньший вклад). Зависимость стоковского параметра и ширины нуль- и однофононных полос от внутримолек. фактора Франка — Кондона свидетельствует об уменьшении стоковского возбуждения фононов с ростом делокализации в результате межмолек. вибронного резонанса.

В. М. Ковба

N₂
(mb.)

$w^1\Delta_u - X^1\Sigma_g$

1949
129822g Induced intensity and band shape of the $w^1\Delta_u$ $\leftarrow X^1\Sigma_g^+$ system in pure solid α -nitrogen. Kunsch, P. L.; Boursey, E. (Phys. Chem. Lab., ETH-Zent., Zurich, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1979, 70(2), 731-5 (Eng). The crystal-field induced intensity and the band shape of the $w^1\Delta_u \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ transition in pure solid N₂ are treated theor. The static crystal field generated by the mol. quadrupoles mixes $^1\Delta_u$ and $^1\Pi_u$ states and its magnitude suffices to explain the obsd. intensity of the transition in the solid. The band shapes can be interpreted as Stokes-type multiphonon structures due to totally sym. local breathing modes with a weaker librational contribution. The dependence of the Stokes parameter and of the widths of the zero- and 1-phonon bands on the intramol. Franck-Condon factor illustrates that the Stokes-type excitation of phonons is diminished by increased delocalization through intermol. vibronic resonance.

C.A. 1979, 20, N16

N₂

сттмш 8797

1979

4 Д147. Коррелированная электронная плотность
для N₂. Correlated electron density of N₂. Lauer Gün-
ther, Meyer Hermann, Schulte Karl-Wil-
helm, Schweig Armin, Hase Hans-Lothar.
«Chem. Phys. Lett.», 1979, 67, № 2—3, 503—507 (англ.)

электр.
плотность

ф. 1920 № 4

Выполнены расчеты электронной плотности молекулы N_2 с учетом корреляционных эффектов. Расчеты производились в гауссовых базисах различного качества, наилучший из которых включал ф-ции s -, p -, d - и f -типа. В расчетах методом КВ учитывались все одночастичные и часть двухчастичных (ДВ) возбуждений. Вклад остальных ДВ оценивался методом теории возмущений. В лучшем расчете получено значение энергии корреляции, равное $-0,3824$ ат. ед. (71% полной энергии корреляции). Учет корреляции не изменяет существенно образом картины изменения распределения электронной плотности при образовании молекулы, полученной в приближении ССП, и не устраняет наблюдаемых расхождений между теорией и экспериментом.

В. И. Барановский

N₂

ommuen 8617

1979.

Lauer G., et al.

monks.

receptus

Theor. chim. acta,
1978, 52, 319-328

(N₂)

оттиски 4495

1979

Lochmann R., Нобза Р.

равнов.
расстояние

Int. J. Quant. Chem.
1979, XV, 73-81.

N₂

1979

Lores R. L., et al.

gaseous-
nitrogen
molecules

Chem. Phys. Lett;
1979, 63 (1), 77-81

●
(corr. N₂⁺; III)

N₂

Commune 9746 | 1979

Mehandru S. P.
et al.

pubrobes.
descriptus
Ze

Proc. Indian Nat.
Sci. Acad., 1979,
A45 (5), 367-71.



(cm. Li₂; III)

N_2

CO_2

кв. мкх,
расчет

(+1) $\boxtimes$

ф. 1580.112

7970
2 Д172. Зависимость молекулярных свойств молекул N_2 и CO_2 от геометрии расположения ядер: поляризуемости, квадрупольные и дипольные моменты. Molecular properties of N_2 and CO_2 as functions of nuclear geometry. Polarizabilities, quadrupole moments, and dipole moments. Morrison Michael A., Hay P. Jeffrey. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 9, 4034—4043 (англ.)

В приближении Хартри—Фока—Рутана в базисе сжатых гауссовых ф-ций выполнены расчеты статич. поляризуемостей, квадрупольных моментов и одноэлектронных энергий основного состояния молекул CO_2 и N_2 . Получены зависимости указанных характеристик от геометрии расположения ядер. Расчеты статич. поляризуемости проводились методом конечного поля. Для изучения влияния эффектов корреляции на молекулярные свойства были проведены расчеты по обобщенному методу ВС для молекулы N_2 . Показано, что учет эффектов корреляции при вычислении поляризуемостей приводит к заметному изменению компоненты $\alpha_{||}$ и почти не меняет $\alpha_{\perp}$. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментами и с данными других расчетов.

А. И. Панин

7573

N₂
O₂
NO

классификация,
у;

21 БЗЗ. Роль локализации в предсказании формы линий рентгеноэлектронных спектров N₂, O₂ и NO, связанных с остовной ионизацией. Müller Jiri, Ågren Hans, Goscinski Osvaldo. Role of localization in the prediction of core ESCA lineshapes of N₂, O₂ and NO. «Chem. Phys.», 1979, 38, № 3, 349—359 (англ.)

Ограниченным методом Хартри — Фока для открытых оболочек проведены расчеты поверхностей потенциальной энергии основных состояний молекул N₂, O₂ и NO и соотв-щих молек. ионов, возникающих при удалении электрона из остова (с 1s-AO). Использован базис трехэкспонентных гауссовых ф-ций. При сравнении потенциалов ионизации, полученных по теореме Купманса. и по разности энергий молекулы и. иона, сделаны вы-

(+2) ☒



20.10.79/124

воды о роли релаксационных эффектов при основной ионизации. Прослежены изменения при ионизации в значениях равновесных геометрических параметров, силовых постоянных и градиентах электрического поля. Показано, что эти изменения хорошо согласуются с известными правилами, сформулированными в ранних исследованиях основной ионизации молекул. По рекуррентной формуле Ансбахера рассчитаны факторы Франка — Кондона. Полученные результаты использованы для анализа формы линий в электронных спектрах молекул. Отмечено, что согласие с экспериментальными результатами может быть достигнуто, только если основные вакансии являются локализованными при хартри-фоковском подходе. Ширины линий обоих мультиплетных компонент парамагнитных молекул O_2 и NO должны быть различными. Последний эффект имеет большое значение для интерпретации электронных спектров высокого разрешения парамагнитных образцов.

А. В. Немухин

N₂

(omnium 8313)

1979

Noor Mohammad S.

"Physica" 1979, BC 96, N3,
410-21

судно
пача
судно



суд. 92 - III

N₂

Ohwada 8901

1979

Ch. N. 8901

Ohwada K.
spectrochim. acta,
1979, A35, 1353-57.

№2

1979
12 Б951. Парциальные сечения рассеяния электрона на молекуле N_2 . Расчет вращательного и колебательного возбуждения, а также упругого рассеяния в приближении сильной связи и в поляризационном борновском приближении при нерезонансных энергиях. Onda Kunizo, Truhlar Donald G. State-to-state cross sections for electron impact on N_2 . Close coupling and polarized. Born calculations for rotational and vibrational excitation and pure elastic scattering at nonresonant

расчет
вращ.-колеб.
возбужд.



2.1980. №12

energies. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 12, 5107—5122 (англ.)

Вычислены сечения возбуждения для колебательных и вращательных состояний, а также сечение упругого рассеяния электрона на молекуле N_2 с энергиями столкновения 10 и 50 эВ. Для расчетов используются потенциал статич. обмена и поляризац. потенциал, а ур-ния рассеяния решаются в приближении сильной связи для вращательных состояний и методом внезапных возмущений для колебательных состояний. Вычисленные абс. сечения соударения для переходов во все вращательные состояния (сумма по всем $j' \neq 0$), для колебательного возбуждения ($j'=0$, $v'=1$ и 2), и колебательно-вращательного возбуждения (сумма по всем $j' \neq 0$, $v'=1$ и 2). Найдено, что влияние усреднения по колебательным состояниям на полное сечение рассеяния мало. Получено хорошее согласие с экспериментом для сечения рассеяния, просуммированного по всем вращательным состояниям, а также для колебательного возбуждения при $v'=1$ для углов рассеяния $\theta \geq 30^\circ$. Рассчитанные сечения рассеяния сравниваются с результатами ранее выполненных расчетов. А. И. Майергойз

№2

2 Б1069. Равновесная химическая кинетика в ионизированной смеси. Poissant G., Prud'homme R.
Chemical kinetics at equilibrium of an ionized mixture.
«Acta astronaut.», 1979, 6, № 7—8, 977—984 (англ.)

1979

равновесия,
температура,

химическая

Проведены расчёты равновесных концентраций заряженных частиц и атомов азота в смесях N_2 и H_2O при 1500—6000°К и давл. $10-10^4$ Па. При расчетах использована схема р-ций, включающая 43 процесса. Показано, что в зависимости от условий, подмешивание H_2O в плазму N_2 может как увеличивать, так и уменьшать степень ионизации. Выявлены наиболее важные элементарные процессы и разработана методика расчета по методу частичных равновесий. И. О. Лейпунский

21880.12

N2

92:11549m Excitation of molecular vⁱ .
resonant scattering of electrons. Radtsig
(Inst. At. Energ. im. Kurchatova, Moscow,

1979

ring
G. B.
Esp.

Teor. Fiz. 1979, 77(4), 1313-25 (Russ). A general approach is proposed for finding the cross section for vibrational excitation of mols. by slow-electron impact in the resonance region. The approach is based on the formalism of time perturbation theory. An expression is obtained for the cross section for vibrational excitation of diat. mols. in the limiting case of a const. width of the ion decay level. A theory of resonant excitation of diat. mols. is developed by employing the classical description of nuclei in mol. particles. The results of the calcs. performed in various approxns. are compared with each other and with the exptl. data for N₂ mols.

*practem
noneperi.
ceretue
ko. yd.
bozo.*

● *Beats*

C. A. 1980.92, N2

№2

1979

10 Д177. Теоретическое исследование осто́вно-возбужденного валентного состояния N_2 с энергией 400 эв. Rescigno T. N., Orel A. E. Theoretical study of the 400 eV core-excited valence states of N_2 . «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 7, 3390—3394 (англ.)

Рассчитан потенциал ионизации (ПИ) молекулы N_2 , соответствующий удалению осто́вного электрона с возбуждением в валентные состояния $^1\Pi_u$ и $^1\Pi_g$, и силы осцилляторов этих переходов (f). Расчеты выполнялись методом КВ в расширенном гауссовом базисе, включающем диффузные и поляризующие ф-ции, с учетом и без учета ограничений на симметрию МО. Согласно с эксперим. значениями ПИ и f (ПИ=400,86 эв и $f=0,12 \pm 0,05$) получено лишь в том случае, если расчет выполнен с локализованной 1σ -орбиталью (ПИ=399,18, $f=0,118$). Расчеты с делокализованной МО 1σ дают ПИ $\approx 410 \div 413$ эв, $f \approx 0,13 \div 0,42$. В. И. Барановский

(7)

Ф. 1979, №10

N₂

21 Б29. Теоретическое изучение остовно-возбужденных валентных состояний N₂ с энергией возбуждения 400 эв. Kescigno T. N., Orel A. E. Theoretical study of the 400 eV core-excited valence states of N₂. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 7, 3390—3394 (англ.)

В рамках ограниченного метода конфигурац. взаимодействия исследованы возбужденные состояния ¹Π_{u,g} молекулы N₂, соотв-щие возбуждению с энергией ~400 эв 1σ-орбиталей остова на верхние валентные орбитали. На первом этапе расчетов для конечного и начального состояний использованы функции, вычисленные методом ССП МО ЛКАО, причем были учтены все однократно возбужденные конфигурации, вносящие вклад в состояния симметрии ¹Π_g или ¹Π_u. На следующем этапе однократно занятые орбитали 1σ_{u,g} и 1π_g были фиксированы и были учтены все двукратно возбужденные конфигурации. Кроме того, проведены расчеты с локализованными 1σ-орбиталями при учете всех однократно возбужденных конфигураций. При этом расчеты проведены для симметрии молекулы

расчет E_i



2.1979, №21

С_{оотв.} Резу. латы расчетов показали, что основным эффектом, влияющим на величину энергии возбуждения и обобщенную силу осциллятора для переходов $^1\Sigma_g - ^1\Pi_{u,g}$ является орбитальная релаксация при наличии локализованной 1σ -дырки. Энергия возбуждения в состояние $^1\Pi_u$ (399,12 эв), лежащего на 0,06 эв ниже состояния $^1\Pi_g$, и обобщенная сила осциллятора (0,118) хорошо согласуется с эксперим. значениями (400,86 эв и 0,12 соотв.). Отмечено, что при учете существенно большего числа конфигураций как для основного, так и возбужденных состояний, введение локализованных 1σ -орбиталей в базис не является необходимым.

И. А. Тополь

N₂

ommuch 7915

1979.

Schmeisser J. et al.

geomos.
creep.

Chem. Phys. Lett., 1979,
62 (1), 51-56.



(ecor. CO; III)

№2

1979
Schoenung S. M., et al.

интенсивн.
полос

Combust. and Flame,
1979, 35(2), 207-211.

(см. O_2 , III)

N₂

1979

Stockbauer R.

J. Chem. Phys. 1979, 40, N5,
2108-14.

розмоз.
енектр.

см. H₂ - 115

1979

№ 2

№ 4 Д446. Расчеты ab initio интенсивности спектра комбинационного рассеяния молекулы N_2 . Ab initio calculation of the Raman intensity of the N_2 molecule. Svendsen E. Norby, Oddershede Jens. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 7, 3000—3005 (англ.)

С помощью нестационарного метода Хартри—Фока рассчитан тензор динамич. поляризуемости молекулы азота как ф-ция межъядерного расстояния R . Приведены величины главных значений тензора для $R=1,70 \div 2,45$ ат. ед. массы при возбуждении светом с длиной волны $\lambda=435,8$ нм, а также главные значения тензоров поляризуемости и производной поляризуемости в точке $R_e=2,074$ ат. ед. массы для $\lambda=1000 \div 100$ нм и статич. величины. По этим данным вычислены сечения рассеяния и степень деполяризации полосы основного тона N_2 , находящиеся в удовлетворительном согласии с эксперим. результатами. Рассчитаны интенсивности колебательно-

кв. мех.
расчет

Ф. 1980 N 4

вращательных линий ветвей O , Q и S до $J=50$ с учетом влияния центробежного растяжения. Оценено различие в величинах матричного элемента анизотропии для O - и S -ветвей. Библ. 27.

М. Тонков



1979

N-N

Ne-Ne

расчет
модели

□

(+2) одна
связи-взаим

Ф. 1980 N 5

5 D148. Приближение Томаса—Ферми для двух-
атомных систем. II. Корреляционные диаграммы для
N—N и Ne—Ne. Thomas-Fermi approach to diatomic
systems. II. Correlation diagrams for N—N and Ne—Ne,
Toepfer A., Gross E. K. U., Dreizler R. M.
«Phys. Rev.», 1979, A 20, № 5, 1808—1815 (англ.)

Для систем N—N и Ne—Ne решены уравнения типа
Хартри—Фока—Слейтера с одноэлектронными потен-
циалами полученными в моделях Томаса—Ферми и То-
маса—Ферми—Дирака—Вайцзекера полуаналитич. ме-
тодом, предложенным ранее (см. реф. 5D147). Построе-
ны корреляционные диаграммы зависимости орбиталь-
ных энергий от межъядерных расстояний, и результаты
сравнены с хартри-фоковскими результатами и результа-
тами, полученными в модели варьировемого экранирова-
ния. Сравнение показывает, что использование прибли-
жения Томаса—Ферми при построении эффективного
одночастичного потенциала предпочтительнее, т. к. ве-
дет к корреляционным диаграммам, практически совпа-
дающим с корреляционными диаграммами, построенны-
ми в неэмпирическом хартри-фоковском приближении.
А. Дементьев

№2

Lommu 92761

1979

Urban M., Kello V.

расчет
крупных
коммент.
данных
и.и.

Mol. Phys., 1979,
38 (5), 1621 - 33.

●
(Peri. BH; III)

1979

N₂

2 Б175. Исследование с высоким разрешением диполь-запрещенных состояний N₂ методом спектроскопии энергетических потерь электронов с низкой энергией. Wilden D. G., Hicks P. J., Comer J. High resolution studies of dipole-forbidden states of N₂ using low-energy electron energy-loss spectroscopy. «J. Phys.», 1979, В12, № 9, 1579—1590 (англ.)

Для молек. азота измерены с высоким разрешением (0,025—0,040 эв) спектры энергетич. потерь электронов при энергиях удара на 0,5—100 эв выше порогового возбуждения и углах рассеяния от 2 до 60°. В области

J; E_i

XIII - 5600

МНУ
211

2. 1980. N2

энергетич. потерь 5—11,5 эв идентифицированы системы полос переходов $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow a^1\Pi_g$, $W^3\Delta_u$, $W'\Delta_u$, $a''\Sigma_u^-$, $C^3\Pi_u$, $A^3\Sigma_u^+$, $B^3\Sigma_u^-$, $B^3\Pi_g$. В нек-рых системах ($a-X$, $W-X$, $a'-X$, $B-X$, $A-X$) наблюдалась колебательная структура (прогрессии по $v' \leq 15$). Кроме того, обнаружены четыре слабые полосы, не принадлежащие ни одному из известных в этой области состояний N_2 . Для перехода $W-X$ исследовано угловое распределение интенсивности. В интервале энергии 14—16 эв обнаружено шесть полос с угловым распределением интенсивности типичным для диполь-запрещенных переходов, к-рые не связаны ни с одним из известных ранее состояний N_2 . Выше ионизац. предела (в области 16—19 эв) наблюдались три новые ридберговские серии (квантовые дефекты равны 0,70, 0,62, 0,38), сходящиеся к уровню $v=0$ состояния $B^2\Sigma_u^+ + N_2^+$ (18,75 эв). В диапазоне 19—25 эв наблюдались ридберговские серии, сходящиеся к состоянию $c^2\Sigma_u^+ + N_2^+$, а также очень слабая прогрессия полос ($\sim 19,8$ эв), не принадлежащая ни одной из известных ридберговских серий.

В. М. Ковба

№2

1979

11 Д294. Исследование с высоким разрешением дипольно-запрещенных состояний N_2 методом спектроскопии потерь энергии медленными электронами. Wilden David G., Hicks Peter J., Comer John. High resolution studies of dipole-forbidden status of N_2 using low-energy electron energy-loss spectroscopy. «J. Phys.», 1979, B12, № 9, 1579—1590 (англ.)

Проведены эксперим. исследования спектра потерь энергии электронов, сталкивающихся с молекулами азота при углах рассеяния $2-60^\circ$ и энергии электронного пучка, превышающей порог возбуждения от 0,5 до 100 эв. Была исследована область спектра потерь энергии от 5 до 25 эв с разрешением 0,025 эв. Начиная с 11 эв и ниже наблюдаемый спектр полностью расшифрован. Использовались данные для дипольно-запрещенных состояний, полученные ранее из экспериментов, в которых был исследован эмиссионный спектр молекулы N_2 . Для одного из состояний $w^1\Delta_u$ детально исследовано угловое распределение электронов. Между 14,30

0095

XIII -

эксперим.
исследов.
спектра
потерь
энергии
электронов

оп. 1979, N 11

и 15,90 эв обнаружено шесть пиков с угловыми распределениями типичными для дипольно-запрещенных переходов, которые нельзя отождествить с наблюдаемыми ранее состояниями молекулы N_2 . При малых энергиях столкновения, больших углах рассеяния и потери энергии, превышающей порог ионизации, обнаружены новые ридберговские серии, сходящиеся к уровню с $v=0$ состояния $B^2\Sigma_u^+$ молекулярного иона N_2^+ . Полученные эксперим. данные сравниваются с имеющимися расчетами энергий ридберговских состояний.

В. С.

оттиски 8075 1979

N_2

CO

BF

показаны,
кривые

9 Д156. Универсальные базисные наборы в расчетах молекул. Wilson Stephen, Silver David M. Universal basis sets in molecular calculations. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 63, № 2, 367—369 (англ.)

Матричным методом Хартри-Фока проведены расчеты N_2 , CO и BF . Использованы универсальные базисные наборы слэтеровских ф-ций (см. Silver D. M., Wilson S., «J. Chem. Phys.», 1978, 69, 3787) $30\sigma 12\pi 12\pi$ s- и p-симметрии и $36\sigma 18\pi 18\pi$ s-, p- и d-симметрии. Длины связей варьировались в интервале 1,75—2,50 ат. ед. Приведены потенц. кривые и энергетич. характеристики. Результаты расчетов хорошо согласуются с данными, полученными с оптимизированными по энергии базисами.

В. Л. Лебедев

(+2.) ☒

ф. 1979, 19

N₂

CO

BF

расчет
молекулы(12) ☒

X. 1979, N 18

18 B16. Универсальные базисные наборы в молекулярных расчетах. Wilson Stephen, Silver David M. Universal basis sets in molecular calculations. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 63, № 2, 367—369 (англ.)

Исследована возможность использования универсальных базисных наборов в молек. расчетах, позволяющих с одними и теми же значениями молек. интегралов рассчитывать различные молекулы. С этой целью методом ССП МО ЛКАО проведены расчеты молекул N₂, CO и BF в их основных состояниях при различных межъядерных расстояниях в окрестности равновесных значений для этих соединений, соотв. 2,074, 2,132 и 2,386 ат. ед. Один и тот же базис «хорошо темперированных» («J. Chem. Phys.», 1973, 59, 5936) орбиталей слейтеровского типа (ОСТ) с экспонентами $\zeta_i = \alpha \beta^{i-1}$, $i=1,2,\dots,M$. Для 1s, 2p и 3d функций принято соотв. $\alpha=0,5$, $\beta=1,55$, $M=9$; $\alpha=1,0$, $\beta=1,60$, $M=6$; $\alpha=1,5$, $\beta=1,65$, $M=3$. Интегралы по ОСТ вычисляли для каждого рассматриваемого межъядерного расстояния с помощью программы ALCHEMY и использовали их для всех трех молекул. Найдено, что если ограничиться только s и p-ОСТ, то согласно с расчетами в обычных, оптимизированных для отдельных атомов, базисах неудовлетворительно, но расчеты в spd-базисе приводят к хорошим результатам.

1979

8075

отмечен

№2

10 Д1010. Механизм возбуждения лазерного перехода в ИК-области $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$ в молекуле N_2 .

1979

Excitation mechanism of the $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$ in laser transition in N_2 molecule. Yasuda Yukio, Sokabe Noburu, Murai Akira. «Mem. Fac. Eng. Osaka City Univ.», 1979, 20, 221—232 (англ.)

Исследован механизм возбуждения лазерного перехода $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$ в ИК-области в молекулах N_2 . Путем теоретич. анализа экспериментально наблюдаемой величины времени задержки импульса генерации ИК-излучения относительно импульса генерации УФ-излучения ($C^3\Pi_u - B^3\Pi_g$) показано, что верхний уровень состояния $B^3\Pi_g$ ИК-лазера возбуждается в результате непосредственного столкновения с электронами и в каскадных процессах при генерации УФ-излучения в случае низких давлений. При высоких давлениях возбуждение этого уровня происходит за счет переноса энергии возбуждения от молекул в метастабильном состоянии $a^1\Pi_g$ при их столкновении с невозбужденными молекулами. Проанализирован механизм развития во времени величин, характеризующих процесс генерации УФ- и ИК-излучения. Библ. 25.

М. И. С.

и.к. сдвиг
при лазерн.
возбужд.

Р 1980 №10

аттест 8425

1979

№ 2

Электр.
спектр.

1 Д321. Спектр поглощения N_2 в вакуумной УФ-области при высоком разрешении. Полосы системы $c_4^1 \ ^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$. High-resolution VUV absorption spectrum of N_2 $c_4^1 \ ^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ bands. Yoshino K., Freeman D. E., Tanaka Y. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 76, № 1-3, 153—163 (англ.)

В области 885—995 Å на дифракционном спектрографе с линейной дисперсией 0,63 Å/мм при давлениях $(0,03—0,4) \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст. измерен электронный спектр молекулы N_2 . Идентифицирована вращательная структура полос $c_4^1(v) \leftarrow X(0)$ и $c_4^1(v) \leftarrow X(1)$ с $v=1—4$ системы электронного перехода $c_4^1 \ ^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$. Обнаружены аномалии в частотах и интенсивностях линий во всех исследованных полосах, обусловленные однородными и неоднородными возмущениями состояния $^1\Sigma_u^+$ другими возбужденными электронными состояниями N_2 . Определены значения вращательных постоянных.

М. Р. Алиев

6655
XIII - 5599

9.1980. N 1

N₂

Linnell 8425

1979

91: 46782p High-resolution VUV absorption spectrum of diatomic nitrogen $c'4^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ bands. Yoshino, K.; Freeman, D. E.; Tanaka, Y. (Harvard-Smithsonian Cent. Astrophys., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 76, 153-63 (Eng). Absorption spectra of the $c'4^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ Rydberg bands of N₂ in the 885 to 995 Å region are photographed at high resolu. by a 6.65-m vacuum spectrograph. Rotational analyses of the $c'4(v) \leftarrow X(0)$ and $c'4(v) \leftarrow X(1)$ bands with $v = 1-4$ are given, together with a preliminary discussion of the homogeneous perturbations $c'4^1\Sigma_u^+ \times b'^1\Sigma_u^+$. Some abnormal frequency shifts and distributions of rotational line intensities previously obsd. in emission bands having $c'4$ upper levels are attributed to the effects of perturbations rather than predissocns.

M.N.

5599

XIII-

© A. 1979, QLN6

1979
8425
Омичи

1 Б114. Спектры поглощения высокого разрешения в вакуумной ультрафиолетовой области N_2 , полосы $c_4^1\Sigma_u^+ = X^1\Sigma_g^+$. Yoshino K., Freeman D. E., Tanaka Y. High-Resolution VUV Absorption Spectrum of N_2 . $c_4^1\Sigma_u^+ = X^1\Sigma_g^+$ Bands. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 76, № 1—3, 153—163 (англ.)

Измерены спектры поглощения N_2 , связанные с ридберговскими переходами $c_4^1\Sigma_u^+ = X^1\Sigma_g^+$ в вакуумной УФ-области (885—995 Å) с высоким разрешением ($R_{эфф} = 180000$, $\bar{D} = 0,63$ Å/мм). Проведен анализ вращательной структуры полос $c_4'(v) - X(0)$ и $c_4'(v) - X(1)$, где $v = 1-4$. Даны предв. оценки вращательных постоянных для состояний $c_4'(v)$: $B_1 = 1,809$, $B_2 = 1,618$, $B_3 = 1,715$, $B_4 = 1,721$, см⁻¹, к-рые учитывают однородные возмущения состояний $c_4'(v)$ состояниями $b'^1\Sigma_u^+ (v)$. Обсуждена также возможность искажения спектра вследствие неоднородных возмущений. Показано, что аномальное положение вращательных линий и распределение вращательной интенсивности в полосах, имеющих верхний уровень c_4' , не может быть связано с переходом от случая связи b' к d' . Отмечено, что преддиссоциац. эффекты могут объяснить нек-рые искажения, однако, в основном, наблюдаемые аномалии следует отнести к возмущениям. С. Б. Осин

N_2
5599

спектры
поглощения

—
XIII

а. 1980. N1