

Na

$N_2^+(N_2)_n$
 $n=1-11$

1988

22 Б3145. Определение устойчивости $N_2^+(N_2)_n$ и $O_2^+(N_2)_n$ с $n=1-11$ из измерений ионных равновесий в газовой фазе. A determination of the stabilities of $N_2^+(N_2)_n$ and $O_2^+(N_2)_n$ with $n=1-11$ from measurements of the gas-phase ion equilibria. Hirao K Kenzo, Nakajima Genei. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 12, 7709—7714 (англ.)

С использованием импульсного электроннолучевого масс-спектрометра высокого давл. при T -рах 50—250 К и 680—820 К измерено равновесие р-ции сольватации ионов N_2^+ и O_2^+ с N_2 . На основе полученных значений констант равновесия определены энтальпии и энтропии р-ции образования и термодим. устойчивости кластеров $N_2^+(N_2)_n$ и $O_2^+(N_2)_n$ с $n=1-11$. В то время как в кластере $N_2^+ \dots N_2$ образуется ковалентная связь, взаимодействия лигандов в кластерах $N_2^+(N_2)_n$ с $n=2-11$ являются гл. обр. электростатич. Из плавного уменьше-

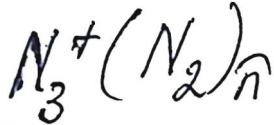
Sp:

(71) ~~12~~

X. 1988, N 22

ния значений ΔH для кластеров $N_2^+(N_2)_n$ с $n=2-11$ с ростом n сделан вывод, что кластеры не имеют особенно устойчивой оболочечной структуры за исключением случая $n=1$. Для кластеров $O_2^+(N_2)_2$ найдено, что кластеры с $n=1-4$ связаны значительно сильнее, чем кластеры с $n \geq 5$, и, что 1-ая сольватац. оболочка имеет наиболее устойчивую структуру при $n=4$. В. Ф. Байбуз





1991

($n = 1-11$) Yamabe Shinichi.

Отбор

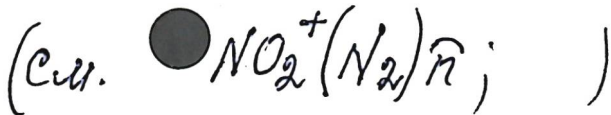
Кукам кавакы сосэцу.

Термо

1991. N 13. C. 72-84.

Ф-III.

рацем



N₂O

Перуог.
сб-ла

1992
Chen, Cheng; Lee, Li Hua,
et al.,

THEOCHEM 1992, 85, 1-8.

● (all N₂O; III)

N₂₀

1993

, 119: 15681x Comparison between ab initio and modified INDO-
O-MO calculations of nitrogen N₂₀. Chen, Cheng; Sun, Kung
Chung; Lu, Li Hwa (Inst. Appl. Chem., Chung-Cheng Inst.
Technol., Taoyuan, Taiwan 33509). *J. Chin. Chem. Soc. (Taipei)*
1993, 40(2), 199-201 (Eng). Both STO-3G ab initio and s-p
sepn.-type-modified INDO semiempirical methods were applied to
mol.-orbital calcn. of the N₂₀ mol. The optimized bond distances
between the nearest N atoms (d_{N-N}) and the most calcd. thermodyn.
data are close to each other. The pos. values of ΔH_f° and ΔG_f° for
the atomization reaction in this work prove that N₂₀ is stable. In
contrast to conventional INDO and MINDO/3, but similar to former
AM1 and MNDO calcns., both ΔH_f° and ΔG_f° are pos. for the
formation reaction, which indicates that N₂₀ belongs to the category
of high-energy mols.

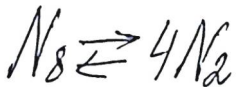
meopem-
narem
Hepneru.
 $\Delta_f H, \Delta_s H$

~~in~~



~~N₂₀~~ (A) +

C. A. 1993, 119, N 2



1996

126: 308998c A complete active-space self-consistent-field study on cubic N_8 . Evangelisti, S.; Gagliardi, L. (Dipartimento di Chimica Fisica e Inorganica, Università di Bologna, 40136 Bologna, Italy). *Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis., D* 1996, 18D(12), 1395-1405 (Eng), Editrice Compositori. Complete Active-Space Self-Consistent-Field (CAS-SCF) calcns. for cubic N_8 are presented. We studied the $N_8=4N_2$ reaction in D_{4h} symmetry and found its energy release and activation barrier with three different at. basis sets. The energy release for this reaction is predicted to be around 526 kcal/mol, while the energy barrier to disocn. is estd. about 159 kcal/mol. These results are in substantial agreement with previous ab initio ests.

(meop. pariet)
DrH

C. A. 1997, 126, N 23

1997

23Б3147. Фазовые переходы в молекулярных кластерах. Phase transitions in molecular clusters / Acevedo Anita J., Caballero Linnette M., López Gustavo E. // J. Chem. Phys.— 1997.— 106, № 17.— С. 7257–7261.— Англ.

С использованием классич. метода Монте-Карло проведено теор. исследование фазовых переходов в молек. кластерах $(N_2)_5$ и $(CO)_5$ и связанных с ними аномалий в т-рной зависимости теплоемкости при постоянном объеме кластеров. Для обеих рассматриваемых систем наблюдались обычные области сосуществования тв. тело — жидкость. Аномалии в теплоемкости при низких т-рах связаны с ориентац. переходом молек. компонент в кластере. В случае $(N_2)_5$ этот низкот-рный переход был едва заметен, однако для $(CO)_5$ наблюдалась сравнительно большая аномалия теплоемкости, связанная с сосуществованием различных твердоподобных частиц с молекулами CO, ориентированными в различных направлениях.

В. Ф. Байбуз

(Na)₅Ср
кластеры

(7) 17

X. 1997, N 23

N₅⁺

(Am. 40 200)

2000

Minh Tho Nguyen, Tae Kyu Ha,

Chem. Phys. Lett., 2000
317, 135-141.

SH₅, 0

$[N_2]_2 - N_2$

[Om. 41784]

2003

Знаменитый. Shen Zuoqun et al.,

Секция

Science in China (series f),
2003, 46, N1, 89-97.

Emission spectra and si-
mulated emission character-

istics of $[Na]_2$ - Na molecular dimer.