Nn

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

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. Hiraoka Kenzo, Nakajima Genei. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 12, 7709—7714 (англ.)

С использованием импульсного электроннолучевого масс-спектрометра высокого давл. при т-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 термохим. устойчивости кластеров $N_2^+(N_2)_n$ и $O_2^+(N_2)_n$ с $n=1-11$. В то время как в кластере $N_2^+...N_2$ образуется ковалентная связь, взаимодействия лигандов в кластерах $N_2^+(N_2)_n$ с $n=2-11$ являются гл. обр. электростатич. Из плавного уменьше-

Кр

(+)

Х. 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 $n\geqslant 5$, и, что 1-ая сольватац. оболочка имеет наиболее устойчивую структуру при $n=4$. В. Ф. Байбуз

$N_3^+(N_2)_n$ 1991

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

Обор. Kikan kagaku sosetsu.

Термо. 1991. N 13. С. 72-84.

Ф-ий. расчет

(см. $NO_2^+(N_2)_n$;)

№20

1992

Chen, Cheng; Liu, Li Hua, et al.,

Термод. св-ва

THEOCHEM 1992, 85, 1-8.

(см. №20; III)

N_2O

1993

119: 15681x **Comparison between ab initio and modified INDO-MO calculations of nitrogen N_2O.** 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 N_2O mol. The optimized bond distances between the nearest N atoms (d_{n-n}) and the most calcd. thermodn. data are close to each other. The pos. values of $\Delta H_a°$ and $\Delta G_a°$ for the atomization reaction in this work prove that N_2O is stable. In contrast to conventional INDO and MINDO/3, but similar to former AM1 and MNDO calcns., both $\Delta H_f°$ and $\Delta G_f°$ are pos. for the formation reaction, which indicates that N_2O belongs to the category of high-energy mols.

теорем-расчет энергии. $\Delta_f H$, $\Delta_a H$

~~N_2O (Δ_f)~~

C. A. 1993, 119, N 2

$N_8 \rightleftarrows 4N_2$

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, Universita 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 $N_8 \rightleftarrows 4N_2$ 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 dissocn. is estd. about 159 kcal/mol. These results are in substantial agreement with previous ab initio ests.

(мор. расчет)
ΔrH

C.A. 1997, 126, N 23

(N2)5

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 анамалия теплоемкости, связанная с сосуществованием различных твердоподобных частиц с молекулами CO, ориентированными в различных направлениях.

В. Ф. Байбуз

Ср кластеров

(+) ⊠

Х. 1997, N 23

N_5^+ (Am. 40 200) 2000

Minh Tho Nguyen, Taekyu Ha,

Chem. Phys. Lett., 2000

$3H_{f,0}$ 317, 135-141.

$[N_2]_2 - N_2$ Ом. 41784 2003

эмиссион. спектр

Shen Zuochun et al.,

Science in China (Series B), 2003, 46, N1, 89-97.

Emission spectra and stimulated emission characte-

ristics of $[Na]_2$ – Na molecular dimer.