

А.В. Глушков

**СПЕКТРОСКОПИЯ АЗОТА: ЭФФЕКТИВНЫЙ УЧЕТ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ В РАСЧЕТАХ ВЕРОЯТНОСТЕЙ И ЭНЕРГИЙ ПЕРЕХОДОВ В СПЕКТРЕ N<sub>2</sub>**

На основе расчета модифицированным методом уравнений движения с эффективным учетом важнейших поляризационных эффектов, включая так называемые двухчастично-дырочные взаимодействия, по ранее разработанной и апробированной методике получены спектроскопические данные по энергиям и силам осцилляторов переходов в спектре молекулы азота, уточняющие ранее представленные экспериментальные и теоретические результаты.

Представлены результаты расчета спектроскопических характеристик: вероятностей, сил осцилляторов и энергий переходов в спектре молекулы азота, уточняющие ранее полученные теоретически и экспериментально соответствующие данные. Расчет выполнен в рамках метода уравнений движения с эффективным учетом важнейших поляризационных эффектов по ранее предложенной и апробированной методике. Представляемые данные, ряд из которых (силы осцилляторов переходов  $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow b^1\Pi_u$ ,  $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow b^1\Sigma_u^+$  и др. получен более менее точно впервые, могут быть использованы в ряде приложений, включая оптику атмосферы.

**Введение.** Азот, как известно, относится к числу основных компонентов, входящих в состав земной атмосферы. Спектр молекулы N<sub>2</sub> представляет, разумеется, большой интерес, в частности, с точки зрения изучения процессов в верхних слоях атмосферы, при которых значительную роль играют возбужденные и ионизованные молекулы N<sub>2</sub> (наряду с молекулами кислорода) [1, 2]. Так, первая положительная и первая отрицательная системы наблюдаются в спектрах собственного свечения верхних слоев атмосферы. Первая и вторая положительные системы полос N<sub>2</sub> и первая отрицательная система полос N<sub>2</sub><sup>+</sup> наблюдаются в спектре полярных сияний. Хотя молекула азота рассматривалась в достаточно большом числе работ (см. [3—16]), тем не менее до сих пор некоторые значения спектроскопических параметров этой молекулы не являются надежно подтвержденными, а иные получены лишь теоретически, и к сожалению, экспериментально не проверены. В частности, это касается рассматриваемых ниже сил осцилляторов переходов, соответствующих полосам Гейдоне—Германа ( $X^1\Sigma_g^+ - b^1\Pi_u$ ), Берджа—Хопфилда ( $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow b^1\Sigma_u^+$ ) и др.

Наиболее полной работой, посвященной изучению спектроскопических характеристик молекулы азота, следует, по-видимому, считать работы Гилмора [5, 6]. Детальный обзор работ по спектроскопии азота приведен в [12]. В серии работ [7—11, 13, 14] проводились расчеты потенциальных кривых, уровней энергии в основном низколежащих конфигураций N<sub>2</sub> на основе метода уравнений движения, метода модельного потенциала и в приближении Хартри—Фока с учетом конфигурационного взаимодействия. С точки зрения учета корреляции, дающей существенный вклад в энергетические характеристики N<sub>2</sub> данная молекула относится к числу достаточно сложных. Как известно, корреляционные эффекты учитываются наиболее точно либо в очень полном приближении конфигурационного взаимодействия, что, как правило, представляет собой чрезвычайно громоздкую и сложную задачу, либо в рамках полумпирических моделей. В последнем случае, однако, требуется известная осторожность при интерпретации получаемых данных. В недавней работе [14] в рамках полумпирического подхода был выполнен расчет второй положительной системы азота. Электронный переход  $a^1\Pi_g - X^1\Sigma_g^+$ , а также время жизни состояния измерялись и рассчитывались, по-видимому, в самых последних работах, посвященных молекуле N<sub>2</sub> [13, 14]. В настоящей статье приведены результаты расчета энергий и сил осцилляторов электронных переходов в спектре молекулы азота, уточняющие ранее полученные теоретически и экспериментально спектроскопические данные. В частности, получены новые значения сил осцилляторов электронных переходов:  $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow b^1\Pi_u$ ,  $X^1\Sigma_g^+ - b^1\Sigma_u^+$ . Расчет выполнен на основе модифицированного метода уравнений движения, отличающегося от стандартного метода уравнений, разработанного МакКоем с сотрудниками [17—19], методикой эффективного учета двухчастично-дырочных поляризационных взаимодействий. Эффекты, связанные с этими взаимодействиями, могут давать вклад, например, в энергии электронных переходов до 3 эВ, а значения сил осцилляторов до ~30%. Как известно, при теоретическом определении потенциальных кривых, энергий и вероятностей электронных переходов в молекулах требуется проведение предварительного рас-

чета волновых функций, полных энергий состояний молекул с максимально достижимой точностью, что, естественно, требует и адекватных порой очень значительных вычислительных усилий. В этом смысле метод уравнений движения представляется разумной альтернативой традиционным квантово-химическим методам [8–10]. Особенностью метода является возможность непосредственного вычисления амплитуд различных процессов, включая поглощение фотонов и т. д., избегая проблем, связанных с вычислением волновых функций и полных энергий молекул. Разумеется, метод не дает абсолютно точных результатов, как, например, это могут в принципе дать известные предельные варианты вариационного решения задачи, тем не менее он достаточно эффективен в расчетах частот и вероятностей переходов в молекулах. Как показано в [17–19], для достижения приемлемой точности расчета можно использовать достаточно ограниченные по объему базисы орбиталей, однако при этом требуется обязательный учет таких важных поляризационных эффектов, как «давление континуума», энергетическая зависимость потенциала самосогласованного поля, эффекты, связанные с так называемыми  $2p-2h$  (две частицы – две дырки) поляризационными взаимодействиями (см. [18–23], а также [24, 25]). Их учет по стандартной методике [18, 24] приводит к резкому усложнению вычислений. В [20, 21] в рамках формализма функционала плотности [22, 23] была разработана эффективная процедура учета упомянутых эффектов путем использования энергетически зависящих обменно-поляризационных функционалов и на примере расчета спектра возбужденных состояний, частот и сил осцилляторов переходов в молекулах бензола и формальдегида продемонстрирована ее эффективность. Остановимся коротко теперь на некоторых основных моментах расчета.

**Метод расчета.** Согласно [17, 18] оператор  $Q_\lambda^+$ , генерирующий возбужденное состояние  $|\lambda\rangle$  молекулы из основного состояния  $|0\rangle$ , т.е.  $|\lambda\rangle = Q_\lambda^+|0\rangle$ , является точным решением уравнения движения:

$$\langle 0 | [\delta Q_\lambda, H, Q_\lambda^+] | 0 \rangle = \omega_\lambda \langle 0 | [\delta Q_\lambda, Q_\lambda^+] | 0 \rangle, \quad (1)$$

где  $\omega_\lambda$  – частота перехода; двойной коммутатор определяется как

$$2[A, H, B] = [A, [H, B]] + [[A, H], B]. \quad (2)$$

С учетом в (1) возбуждений типа одна частица – одна дырка ( $1p-1li$ ) уравнение (1) можно свести к матричному уравнению для амплитуд  $\{Y_{m\gamma}\}$  и  $\{Z_{m\delta}\}$ :

$$\begin{bmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y(\lambda) \\ Z(\lambda) \end{bmatrix} = \omega_\lambda \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y(\lambda) \\ Z(\lambda) \end{bmatrix}, \quad (3)$$

где матричные элементы  $A, B, D$  определяются в виде

$$\begin{aligned} A_{m\gamma n\delta} &= \langle 0 | [C_{m\gamma}, H, C_{n\delta}^+] | 0 \rangle; \\ B_{m\gamma n\delta} &= \langle 0 | [C_{m\gamma}, H, C_{n\delta}] | 0 \rangle; \\ D_{m\gamma n\delta} &= \langle 0 | [C_{m\gamma}, C_{n\delta}^+] | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (4)$$

$C^+$  – частично-дырочный оператор рождения ( $C$  – уничтожения); индексы  $m, n$  здесь обозначают частичные состояния;  $\gamma, \delta$  – дырочные;  $H$  – гамильтониан молекулы в представлении вторичного квантования. Для оценки матричных элементов [4] приближенная волновая функция основного состояния записывалась в виде [17]:

$$|0\rangle \approx N_0 (1 + U) |HF\rangle, \quad (5)$$

где  $U = \frac{1}{2} \sum_{m\gamma n\delta} C_{m\gamma n\delta} C_{m\gamma}^+ C_{n\delta}^+$ ,  $|HF\rangle$  – хартри-фоковская функция.

С учетом этого определения элементы  $A, B, D$  принимают вид

$$\begin{aligned} A_{m\gamma n\delta} &= A_{m\gamma n\delta}^0 + \delta_{\gamma\delta} \left[ T_{mn} - \frac{1}{2} (\epsilon_m + \epsilon_n - 2\epsilon_\gamma) \rho_{mn}^{(2)} \right] - \delta_{mn} \left[ T_{\gamma\delta} - \frac{1}{2} (2\epsilon_m - \epsilon_\gamma - \epsilon_\delta) \rho_{\gamma\delta}^{(2)} \right]; \\ B_{m\gamma n\delta} &= B_{m\gamma n\delta}^{(0)} + (-1)^\lambda S_{m\gamma n\delta}^\lambda, \\ D_{m\gamma n\delta} &= \delta_{mn} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{mn} \rho_{\gamma\gamma}^{(2)} - \delta_{\gamma\delta} \rho_{mn}^{(2)}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь матрицы  $A^0$  и  $B^0$  – это стандартные матрицы приближения случайных фаз (см. [18]), а другие члены в (6):

$$S_{m\gamma n\delta} = - \sum_{\rho\mu} \{ V_{m\mu\delta\rho} c_{\rho\mu n\gamma} + c_{\rho\mu m\delta} V_{n\mu\gamma\rho} \};$$

$$T_{\gamma\delta} = \frac{1}{2} \sum_{pqv} \{ V_{pqv\gamma} c_{p\delta qv}^* + V_{\delta v p q} c_{p\gamma qv} \}; \quad (7)$$

$$T_{mn} = - \frac{1}{2} \sum_{q\mu\nu} \{ V_{mq\mu\nu} c_{n\mu q\nu}^* + V_{\mu\nu n q} c_{m\mu q\nu} \};$$

и далее

$$V_{ijkl} = \langle i(1) j(2) | r_{12}^{-1} | k(1) l(2) \rangle. \quad (8)$$

В (6)–(8) индексы  $p, q$ , как  $m, n$ , относятся к частичным состояниям, а  $\mu, \nu$ , как  $\gamma, \delta$  – к дырочным. Величины  $\varepsilon_m, \varepsilon_\gamma$  и т.д. в (6) определяют хартри-фоковские орбитальные энергии;  $\rho_{mn}^{(2)}, \rho_{\delta\gamma}^{(2)}$  – поправки к матрице плотности второго порядка, зависящие квадратично от корреляционных коэффициентов. Если поправочными коэффициентами пренебречь, то матричные элементы (6) сводятся к соответствующим матричным элементам приближения случайных фаз [18]. С использованием этого приближения уравнения движения для определения  $1 p-1 h$  амплитуд  $\{Y\}$  и  $\{Z\}$  и соответствующих энергий возбуждения  $\omega_\lambda$  решаются стандартными методами матричной алгебры. Рассматриваемое до сих пор  $1 p-1 h$  приближение в уравнениях (1) не может, однако, в большинстве случаев обеспечить достаточную точность расчета спектроскопических характеристик молекул [11]. Хотя наиболее важные низколежащие возбужденные состояния соответствуют  $1 p-1 h$  парам и в полном разложении  $Q_\lambda^+$  имеют наибольшие амплитуды, однако компоненты  $2 p-2 h$ , т. е. дважды возбужденные по отношению к основному состоянию молекулы конфигурации, также очень важны и могут давать вклад в энергию перехода, например до  $\sim 3$  эВ [11]. Их включение соответствует учету самосогласованной перестройки дырочных орбиталей в процессе виртуальных возбуждений в остане основной конфигурации молекулы. Для решения проблемы учета  $2 p-2 h$  эффектов в настоящей статье используется разработанная в [20] и базирующаяся на использовании формализма функционала плотности эффективная процедура. Учет  $2 p-2 h$  компонент в  $Q_\lambda^+$  эквивалентен перенормировке матриц в (3), приводящей к появлению зависимости от  $\omega$  и согласно [22, 23] сводится к появлению в матричных элементах весового множителя  $a(\mathbf{r}) = [1 - \Sigma(\mathbf{r})]^{-1}$ . В приближении функционала плотности величина  $\Sigma(\mathbf{r})$  определяется как функционал электронной плотности [20]:

$$\Sigma(\mathbf{r}) = - 0.0834\rho^{1/3}(\mathbf{r}) - 0.0518\rho^{1/3}(\mathbf{r})/[1 + 18.377\rho^{1/3}(\mathbf{r})]. \quad (9)$$

Расчет матричных элементов с весовым множителем  $a(r)$  представляет собой еще достаточно сложную задачу. Значительное упрощение расчета без существенной потери точности достигается заменой  $a(\mathbf{r})$  на  $a(0)$  в соответствии с хорошо известной и обоснованной в теории атомного фотоэффекта (см. [25]) процедурой, базирующейся на приближении случайных фаз с обменом. Отметим теперь, что вышеуказанные амплитуды  $\{Y_{m\gamma}\}$  и  $\{Z_{m\gamma}\}$  определяют момент перехода  $M_{0\lambda}$ :

$$M_{0\lambda} = \sqrt{2} \sum_{m\gamma} \{ Y_{m\gamma}^*(\lambda) M_{m\lambda} + Z_{m\gamma}^*(\lambda) M_{m\lambda} \}. \quad (10)$$

Сила осциллятора перехода  $|0\rangle - |\lambda\rangle$  определяется через  $M_{0\lambda}$  следующим образом:

$$f_{0\lambda} = \frac{2}{3} G\omega_\lambda M_{0\lambda}^2, \quad (11)$$

где  $G$  – фактор вырождения. За исключением процедуры учета  $2 p-2 h$  эффектов, в остальном используемая в данной статье вычислительная схема полностью аналогична вычислительной схеме обычного варианта метода уравнений движения. Приведем теперь результаты расчета энергий и сил осцилляторов электронных переходов в молекуле азота.

**Результаты расчета.** Электронная конфигурация молекулы азота в основном состоянии:  $(1\sigma_g)^2 (1\sigma_u)^2 (2\sigma_g)^2 (2\sigma_u)^2 (\pi_{ux})^2 (\pi_{uy})^2 (3\sigma_g)^2$ .

Выбранная для расчета геометрия взята согласно общепринятой экспериментальной геометрии в основном состоянии [12]. Первый шаг – проведение хартри–фоковского расчета для генерации частичнодырочного базиса. Самосогласованный расчет выполнен в базисе гауссовских орбиталей. Использовался  $[4s+3p]$  базис контрактированных гауссовских орбиталей, дополненный диффузными

функциями (детальное описание базиса (см. например, в [11]). Табл. 1 дает частичные и дырочные энергии уровней. Молекулярные орбитали 8–13 в табл. 1 – диффузные.

В табл. 2 приведены рассчитанные в настоящей статье значения энергий возбужденных состояний молекулы азота, а также результаты расчета методом уравнения движения в  $1p-1h$  приближении,  $2p-2h$  приближении согласно методике [11] и экспериментальные данные [6, 12].

Из таблицы видно, что учет  $2p-2h$  взаимодействий оказывается принципиально необходим. Ошибка в расчетах в рамках  $1p-1h$  приближения составляет, как показывает сравнение экспериментальных значений переходов и расчетных, до  $\sim 20\%$ . Полученные в настоящей статье энергии переходов в целом вполне приемлемо согласуются с экспериментом, причем за исключением перехода в  $A^3\Sigma_u^+$ , ошибка вычисления искомым энергий в сравнении с экспериментальными данными составляет не более нескольких процентов.

Таблица 1

Самосогласованные молекулярные орбитальные энергии в  $N_2$  (в эВ)

№ п/п	МО	$\epsilon_v$	№.	МО	$\epsilon_m$
1	$1\sigma_g$	-15,7079	17	$5\sigma_u$	0,5869
2	$1\sigma_u$	-15,7043	18	$3\pi_{gx}$	0,6114
3	$2\sigma_g$	-1,5255	19	$3\pi_{gy}$	0,6514
4	$2\sigma_u$	-0,7727	20	$5\sigma_g$	0,8602
5	$\pi_{ux}$	-0,6240	21	$6\sigma_u$	1,0232
6	$\pi_{uy}$	-0,6240	22	$7\sigma_u$	1,5413
7	$3\sigma_g$	-0,6271	23	$4\pi_{gx}$	1,6651
8	$3\sigma_u$	0,0257	24	$4\pi_{gy}$	3,6651
9	$1\pi_{gx}$	0,0910	25	$3\sigma_{ux}$	3,0148
10	$1\pi_{gy}$	0,0910	26	$3\pi_{uy}$	3,0148
11	$4\sigma_u$	0,1632	27	$8\sigma_u$	3,0819
12	$2\pi_{gx}$	0,1654	28	$6\sigma_g$	3,3528
13	$2\pi_{gy}$	0,1654	29	$5\pi_{gx}$	3,9962
14	$2\pi_{ux}$	0,5320	30	$5\pi_{gy}$	3,9962
15	$2\pi_{uy}$	0,5320	31	$9\sigma_u$	33,2482
16	$4\sigma_g$	0,5460	32	$7\sigma_g$	33,5275

Таблица 2

Энергии возбужденных состояний в молекуле  $N_2$  (в эВ)

Состояние	$\Delta E(1p-1h)$ [11]	$\Delta E(1p-1h+2p-2h)$ [11]	$\Delta E(2p-2h)$ настройка раствора	$\Delta E$ эксперимент [12]
$B^3\Pi_g$	9,6	7,5	8,06	8,1
$a^1\Pi_g$	11,5	8,8	9,66	9,3
$A^3\Sigma_u^+$	8,4	7,8	7,14	7,8
$B^3\Sigma_u^-$	11,3	10,2	9,50	9,7
$W^3\Delta_u$	10,1	9,4	8,59	8,9
$a^1\Sigma_u^-$	11,3	10,6	9,61	9,9
$\omega^1\Delta_u$	12,0	11,0	10,20	10,3
$b^1\Sigma_u^+$	16,8	15,0	14,28	14,4
$c^1\Sigma_u^+$	15,5	12,1	13,17	12,9
$C^3\Pi_u$	13,3	10,8	11,30	11,1
$b^1\Pi_u$	17,4	14,0	13,92	12,8

Как показывает анализ, для перехода в  $A^3\Sigma_u^+$  поправка к энергии перехода за счет  $2p-2h$  поляризационных эффектов оказывается в сравнении с остальными переходами наименьшая. В этой связи имеет место переоценка для данного перехода вклада  $2p-2h$  эффекта. Наибольшая поправка энергии перехода за счет этих эффектов наблюдается для переходов в состояния  $b^1\Pi_u$  и  $c^1\Sigma_u^+$ ,  $a^1\Pi_g$ ;

для этих переходов, в свою очередь, использованная в расчете методика учета  $2p-2h$  эффектов, очевидно, несколько недооценивает искомые эффекты.

Наиболее эффективно  $2p2h$  поляризационные взаимодействия учтены для переходов в состояния  $V^3\Pi_g$ ,  $V^3\Sigma_u^-$ ,  $\omega^1\Delta_u$ ,  $b^1\Sigma_u$ ,  $C^3\Pi_u$  и полученные здесь значения энергий переходов в эти состояния очень хорошо согласуются с рекомендованными экспериментальными значениями.

Таблица 3

Силы осцилляторов переходов в молекуле  $N_2$  (см. текст)

Переход	[11]	Настоящая работа	Эксперимент
$X^1\Sigma_g^+ - c^1\Sigma_u^+$	0,11	0,10	$0,14 \pm 0,04$
$X^1\Sigma_g^+ - b^1\Pi_u$	0,32	0,26	$< 0,3$
$X^1\Sigma_g^+ - b^1\Sigma_u^+$	0,49	0,39	0,83
			0,40

В табл. 3 приведены результаты расчета сил осцилляторов для ряда переходов в спектре молекулы  $N_2$ , а также имеющиеся теоретические оценки и экспериментальные рекомендации. Наиболее полные данные имеются для перехода  $X^1\Sigma_g^+ - c^1\Sigma_u^+$ . Рекомендованное в [11] значение силы осциллятора для этого перехода несколько меньше, чем рекомендованные экспериментальные значения. Полученное в данной статье значение  $f$  составляет 0,10 и также оказывается несколько меньше, чем экспериментальные значения. Отметим, что разброс экспериментальной величины составляет приблизительно  $\sim 30\%$  для перехода  $X^1\Sigma_g^+ - c^1\Sigma_u^+$ . Другие рассмотренные переходы, в частности,  $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow b^1\Pi_u$  и  $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow b^1\Sigma_u^+$ , относятся к достаточно сложным. Дело в том, что например, для перехода в  $\sigma^1\Pi_u$  оказывается очень трудной оценка фактора Франка—Кардона. Здесь имеет место сильное возмущение уровней состояния  $\sigma^1\Pi_u$  состоянием с  $^1\Pi_u$ . Экспериментальное значение силы осциллятора для этого перехода отсутствует, имеется лишь оценка  $f < 0,3$ . Полученное в настоящей работе значение  $f$  равно 0,26. Для перехода  $X^1\Sigma_g^+ - b^1\Sigma_u^+$  имеются значения сил осцилляторов, которые, однако, не согласуются друг с другом. В [11] было получено для силы осциллятора этого перехода без учета фактора Франка—Кардона значение 0,49. Рекомендованное в настоящей статье значение  $f$  составляет 0,39.

1. Бейтс Д. Р. // Атомы в астрофизике. М.: Мир, 1986. С. 322—341.
2. Омхольт А. Оптические полярные сияния. М.: Мир, 1975. 340 с.
3. Gerard J.-C., Harang J.E. // J. Geophys. Res. 1980. V. 35. № 9. P. 1757—1768.
4. Piper A.E. // J. Chem. Phys. 1982. V. 77. № 8. P. 2373—2381.
5. Gilmore F.R. // Potential energy curves for  $N_2$ , NO and  $O_2$  and corresponding ions. Rand Corp. Santa Monica, CA, 1964. Mem. RM-4034-PR.
6. Gilmore R.F. // JOSRT. 1965. V. 5. P. 369.
7. Miller K.J., Green A.E.S. // J. Chem. Phys. 1974. V. 60. № 7. P. 2617—2624.
8. Whalen J.E., Green A.E.S. // Amer. J. Phys. 1972. V. 40. № 8. P. 1484—1492.
9. Lofthus A., Krupenic T. // J. Phys. Chem. Rev. Dat. 1977. V. 6. № 1. P. 113—128.
10. Cederbaum J.L.C., Domske A. // J. Chem. Phys. 1974. V. 60. № 7. P. 2686—2698.
11. Rose J.B., Shibuya T., McKeoy V. // J. Chem. Phys. 1973. V. 58. № 1. P. 74—83.
12. Хьюбер К.-П., Герцберг Г. Константы двухатомных молекул. М.: Мир, 1984. Т. 1, 2. 380 с.
13. Dahl F., Oddershede J. // Phys. Scr. 1986. V. 33. № 2. P. 135—140.
14. Языкова С.М., Бутырская Е.В., Лисицин В.И. // Оптика и спектроскопия. 1985. Т. 59. № 5. С. 1017—1020.
15. Кузнецова Л.А., Кузьменко Н.Б., Кузяков Ю.Я., Пластинин Ю.Я. Вероятности оптических переходов двухатомных молекул. М.: Наука, 1980. 320 с.
16. Кузнецова Л.А., Кузьменко Н.Б., Кузяков Ю.Я. Факторы Франка-Кондона двухатомных молекул. М.: Наука, 1984. 290 с.
17. Shibuya T., McKeoy V. // Phys. Rev. A. 1970. V. 2. № 10. P. 2208—2216.
18. Shibuya T., McKeoy V., Rose J.B. // J. Chem. Phys. 1973. V. 58. № 3. P. 500—508.
19. Yeager D.L., McKeoy V. // Ibid. 1974. V. 60. № 7. P. 2714—2716.
20. Глушков А.В. // Журн. физич. химии. 1990. Т. 64. № 11. С. 3100—3103.
21. Глушков А.В. // Оптика атмосферы. 1991. Т. 4. № 6. С. 543—548.
22. Глушков А.В. // Оптика и спектроскопия. 1989. Т. 66. № 5. С. 1298—1301.
23. Глушков А.В. // Журн. структ. химии. 1988. Т. 29. № 4. С. 3—10; 1990. Т. 31. № 1. С. 11—15.
24. Уилсон С. Электронные корреляции в молекулах. М.: Мир, 1987. 290 с.
25. Амусья М.Я. Атомный фотоэффект. М.: Наука, 1987. 320 с.

Одесский гидрометеорологический институт

Поступила в редакцию  
15 октября 1991 г.

**A. V. Glushkov. Spectroscopy of Nitrogen: an Effective account for the Polarization Effects in Calculations of the Probabilities and Energies of the Transitions in Spectra of N<sub>2</sub>.**

Some calculational results on the spectroscopic characteristics such as the oscillator strengths, energies of transitions in the spectra of nitrogen molecules are presented. The calculations have been made using the equation of the motion method with an effective account for the important polarization effects according to the procedure proposed and tested earlier. The spectroscopic data (some of them are obtained for the first time) obtained for N<sub>2</sub> can be useful for a number of applications, e. g. in the atmospheric optics.