



محاسبه‌ی پارامترهای انتقالات تابشی برای نوارهای سیستم  $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$  مولکول  $N_2$  و سیستم‌های

$N_2^+$   $B^2\Sigma_u^+ - A^2\Pi_u$ ،  $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$ ،  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$  یون مولکولی

با استفاده از توابع انرژی پتانسیل تجربی

فرزانه‌سادات قالیشورانی، مه‌سادات میرعلینقی\*، محسن شعبانی

گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد ورامین-پیشوا، ورامین، ایران

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۹۷/۰۱/۲۵، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۳۹۷/۰۲/۱۲، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۳۹۷/۰۳/۱۸

## چکیده

شکل دقیق منحنی انرژی پتانسیل برای هر مولکول دواتمی، اختصاصی و منحصر به آن مولکول است. تاکنون، یک تابع پتانسیل عمومی که در تمام حالت‌های الکترونی مقید تمام مولکول‌های دواتمی نمایش خوبی داشته باشد، ارائه نشده است. در این پژوهش، برخی توابع پتانسیل تجربی نظیر موریس، فراست - موسولین، وی - هوا، و هولبرت - هرشفلر تشکیل و برای حل معادلات شرودینگر هسته‌ای حالت‌های الکترونی مختلف مولکول‌های  $N_2$  و  $N_2^+$  به کار برده می‌شود. برنامه‌ی رایانه‌ی Level که بر اساس الگوریتم کولی-نیومروف و با زبان برنامه‌نویسی فرترن نوشته شده است، برای انجام محاسبات مورد استفاده قرار می‌گیرد. با مقایسه‌ی انرژی‌های ارتعاشی به دست آمده برای حالت‌های الکترونی  $B^3\Pi_g$ ،  $A^3\Sigma_u^+$ ،  $X^1\Sigma_g^+$ ،  $B^3\Pi_g$  مولکول  $N_2$  و  $B^2\Sigma_u^+$ ،  $A^2\Pi_u$ ،  $X^2\Sigma_g^+$  و  $B^2\Sigma_u^+$  یون مولکول  $N_2^+$  با مقادیر تجربی متناظرشان میزان دقت توابع پتانسیل و نیز درصد انحراف آنها از مقادیر پتانسیل واقعی RKR تعیین می‌شود. همچنین، پارامترهای تابشی مانند اعداد موجی جهش و ضرایب فرانک - کوندون برای نوار سیستم‌های  $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$  مولکول  $N_2$  و نوارهای سیستم‌های  $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$ ،  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$ ،  $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$ ،  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$  یون مولکولی  $N_2^+$  محاسبه و با داده‌های پتانسیل RKR مقایسه می‌شود.

واژه‌های کلیدی: منحنی انرژی پتانسیل، دواتمی، پتانسیل تجربی، ضرایب فرانک - کوندون.

## ۱. مقدمه

ستارگان دنباله‌دار، اجرام آسمانی هستند که از یخ، سنگ و غبارات گازی تشکیل یافته‌اند. مطالعات تجربی طیف‌سنجی حاکی از وجود مولکول‌هایی مانند هیدروژن، کربن، اکسیژن، نیتروژن و گوگرد و ترکیباتی مانند آب، کربن مونواکسید و کربن دی-

\*عهده دار مکاتبات: مه‌سادات میرعلینقی

نشانی: گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ورامین-پیشوا، ورامین، ایران

پست الکترونیک: msmiralinaghi@gmail.com

تلفن: ۰۲۳۳۲۳۹۴۵۳۰

اکسید، و رادیکال‌هایی مانند سیانوژن و هیدروکسیل در ستاره‌های دنباله‌دار است [۱-۲]. تصور بر این است که دنباله دارها، پیش-سیاره‌های یخی باقیمانده از زمان شکل‌گیری منظومه‌ی شمسی در ۴/۶ میلیارد سال پیش باشند. برخی دانشمندان بر این باورند که این ستاره‌های دنباله‌دار بودند که در ابتدا مقداری آب و مولکول‌های با پایه‌ی کربن را به کره‌ی زمین آوردند و منشا پیدایش حیات در آن شدند. از این رو، بررسی‌های طیف‌سنجی، فوتوفیزیکی و فوتوشیمی این گروه از مولکول‌ها همواره مورد توجه محققین بوده است [۳-۴].

ثابت‌های چرخشی و ارتعاشی بهبود یافته برای بسیاری از حالت‌های یونی و برانگیخته‌ی نیتروژن و اکسیژن بر اساس اندازه‌گیری‌های طیف‌سنجی توسط گلیمر و همکارانش استخراج شدند. این حالت‌ها در مدل‌سازی فلورسانس هوا که با بمباران الکترون‌های پرسرعت ایجاد می‌شود حائز اهمیت هستند. این ثابت‌ها برای محاسبه‌ی مبداهای نوار، پارامتر  $R$ -مرکزی، و ضرایب فرانک-کوندون در بسیاری از نوارهای نیتروژن و اکسیژن مورد استفاده قرار گرفتند. این نتایج همراه با ممان‌های جهش‌های الکترونی برای محاسبه ضرایب انیشتاین به روش  $R$ -مرکزی به کار برده شدند [۵].

منحنی‌های انرژی پتانسیل برای برخی حالت‌های الکترونی مختلف کاتیون  $N_2^+$  و مولکول  $N_2$  با اصلاح روش RKR<sup>۱</sup> توسط وندرسلیک<sup>۲</sup> و همکاران وی بدست آمد. روش RKR، یک روش نیمه‌کلاسیکی مرتبه‌ی اولی است که منحنی پتانسیل را براساس تقریب بورن-اپنهایمر، از طریق محاسبات عددی بنا می‌کند [۶]. این محاسبات برای هر تراز انرژی ارتعاشی که به‌طور تجربی با روش‌های طیف‌سنجی تعیین شده است، نقاط بازگشت کلاسیکی را تعیین می‌کند. نقاط بازگشت، نقاطی هستند که در آنها، سرعت‌های هسته‌ای برابر صفر و لذا انرژی پتانسیل برابر انرژی کل مولکول می‌شود. انرژی‌های تفکیک  $D_e$  برای حالت پایه با تکنیک برازش منحنی<sup>۳</sup> با بکار بردن تابع پتانسیل پنج پارامتری هولبرت-هرشفلر تعیین شده‌اند. مقادیر حاصل برای  $D_e$  با نتایج مندرج در مقالات پیشین مطابقت قابل قبولی داشتند. همچنین ضرایب فرانک-کوندون و پارامتر  $R$ -مرکزی برای تعداد محدودی نوارهای سیستم  $A^3\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  یون مولکولی  $N_2^+$  و سیستم‌های  $A^3\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  و  $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$  مولکول  $N_2$  و با استفاده از یک روش تحلیلی تقریبی که توسط نیکولز<sup>۴</sup> و جارمین<sup>۵</sup> [۷] ارائه شده است، بر مبنای پتانسیل RKR محاسبه شده اند [۸].

در این پژوهش، ابتدا منحنی‌های انرژی پتانسیل RKR برای حالت الکترونی پایه  $X^1\Sigma_g^+$  و حالت‌های برانگیخته‌ی  $A^3\Sigma_u^+$  و  $B^3\Pi_g$  مولکول  $N_2$  و حالت الکترونی پایه‌ی  $X^2\Sigma_g^+$  و حالت‌های الکترونی برانگیخته‌ی  $A^2\Pi_u$  و  $B^2\Sigma_u^+$  در یون مولکول  $N_2^+$  یا برنامه‌ی RKR (به زبان برنامه نویسی متمتیکا) محاسبه می‌شود. سپس با انتخاب چهار پتانسیل تجربی فراست-موسولین، مورش، وی-هوا، هولبرت-هرشفلر معادله‌ی شرودینگر هسته‌ای برای حالت‌های الکترونی فوق به روش عددی کولی-نیومروف و با استفاده از کد

<sup>1</sup> Rydberg-Klein-Rees

<sup>2</sup> Vanderslice

<sup>3</sup> Curve fitting

<sup>4</sup> Nicholls

<sup>5</sup> Jarmin

Level [۹] (به زبان برنامه نویسی فترن) حل می شود و انرژی های ارتعاشی متعلق به هر یک از حالت های الکترونی به دست می آید. نتایج با داده های حاصل از روش RKR مقایسه و در مورد دقت پتانسیل های تجربی داوری می شود. همچنین، پارامترهای انتقالات های تابشی شامل اعداد موجی جهش و ضرایب فرانک-کوندون برای نوار سیستم های  $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$  مولکول  $N_2$  و نوارهای سیستم های  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$ ،  $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$ ،  $B^2\Sigma_u^+ - A^2\Pi_u$ ،  $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$  یون مولکولی  $N_2^+$ ، محاسبه می شوند. این محاسبات با به کار بردن توابع موج ارتعاشی حاصل از پتانسیل های مورد نظر که به صورت عددی در کد Level به ازای فواصل مختلف بین هسته ای تولید می شوند، انجام می گیرد. نتایج حاصل، برای پیش بینی مکان و شدت های نسبی خطوط طیفی در انتقالات الکترونی، تعیین قدرت نوار<sup>۱</sup>، تعیین طول عمر تابش حالت های الکترونی برانگیخته و دمای موثر ارتعاشی یون مولکولی  $N_2^+$  و مولکول  $N_2$  از اهمیت به سزایی برخوردار است. این پارامترها در اختر فیزیک برای مطالعه چگونگی تشکیل منظومه شمسی، تکامل سیارات و شرایط جوی فضا های بین ستاره ای نقش مهمی ایفا می کنند.

## ۲. روش محاسباتی (تئوری)

بطور کلی، یک جهش ارتعاشی- الکترونی در مولکول های دو اتمی بصورت  $2S''+1\Lambda''(v'') \rightarrow 2S'+1\Lambda'(v')$  نمایش داده می شود که در آن  $S$  عدد کوانتومی اسپینی الکترونی کل و  $\Lambda$  عدد کوانتومی اندازه حرکت زاویه ای الکترونی کل در راستای محور بین هسته ای است.  $\Lambda$  مقادیر صفر، یک، دو، ... را به ترتیب، برای نمادهای متناظر با حالت های الکترونی  $\Sigma$ ،  $\Pi$ ،  $\Delta$ ، ... می گیرد. اگر نشر خودبخودی تنها فرایندی باشد که موجب کاهش جمعیت مولکول ها در حالت برانگیخته شود، آنگاه شدت نوار ارتعاشی  $I_{v'v''}$  (photon  $cm^{-3} s^{-1}$ ) در طیف نشری با استفاده از معادله ی زیر تعیین می شود [۱۰]:

$$I_{v'v''} = N_{v'} A_{v'v''} \quad (1)$$

که در آن  $N_{v'}$  (molecule  $cm^{-3}$ ) جمعیت مولکول ها در تراز ارتعاشی  $v'$  حالت الکترونی برانگیخته و  $A_{v'v''}$  ( $s^{-1}$ ) ضریب نشر (خودبه خودی) اینشتین است که بصورت زیر با عدد موجی  $\nu_{v'v''}$  ( $cm^{-1}$ ) و احتمال جهش  $p_{v'v''}$  متناظر با هر نوار ارتعاشی ارتباط دارد [۱۱]:

$$A_{v'v''} = \frac{64\pi^4 \nu_{v'v''}^3}{3hc^3} \frac{2-\delta_{0\Lambda'+\Lambda''}}{2+\delta_{0\Lambda'}} p_{v'v''} \quad (2)$$

در اینجا،  $c$  ( $cm s^{-1}$ ) سرعت نور و  $\delta$  تابع دلتای کرونیگر است که چنانچه هردو اندیس آن یکسان باشند، برابر یک و در غیر این صورت، صفر است. احتمال جهش  $p_{v'v''}$  در رابطه (۲) برابر مجذور ممان جهش ارتعاشی- الکترونی است:  $p_{v'v''} = |\mu_{v'v''}|^2$  که مطابق زیر تعریف می شود [۱۲]:

$$\mu_{v'v''} = \int dR \Psi_{v'}^* \mu_e \Psi_{v''} \quad (3)$$

که در آن  $\Psi_{v'}$  و  $\Psi_{v''}$  به ترتیب، توابع موج ارتعاشی حالت های الکترونی برانگیخته و پایه و  $\mu_e$  ممان جهش الکترونی است که با

<sup>1</sup> Band strength

انتگرال گیری از عملگر ممان دوقطبی میان توابع موج حالت های الکترونی مذکور تعیین می شود. توابع موج الکترونی مطابق تقریب بورن-اوپنهاইمر<sup>۲</sup> بصورت پارامتری به فاصله ی بین هسته های  $R$  وابسته اند. دقت توابع موج ارتعاشی در معادله ی (۳) از حل معادله ی شرودینگر شعاعی به دست می آیند:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} + V(R)\right] \psi_v = E_v \psi_v \quad (4)$$

که در آن  $V(R)$  انرژی پتانسیل،  $\mu$  جرم کاهش یافته، و  $E_v$  انرژی ارتعاشی است. دقت توابع موج ارتعاشی عمیقاً به نوع توابع انرژی پتانسیل بکاربرده شده برای حل معادله ی شرودینگر شعاعی (۴) بستگی دارند [۱۳].

تا به امروز روش های متنوعی برای تخمین ممان جهش الکترونی  $\mu_e$  و چگونگی تغییرات آن به فاصله ی بین هسته ای پیشنهاد شده است که از جمله ی آنها می توان به روش های آغازین<sup>۱</sup> برای محاسبه ی  $\mu_e$  بصورت مستقیم [۱۵-۱۴] و یا اندازه گیری شدت های نسبی خطوط طیفی و طول عمرهای تابشی برای تخمین غیرمستقیم  $\mu_e$  [۱۷-۱۶] اشاره کرد. در هر صورت طول عمرهای تابشی اندازه گیری شده معیار مناسبی برای ارزیابی میزان اعتبار  $\mu_e$  و دقت احتمال های جهشی است که بوسیله ی آن محاسبه می شوند. طول عمر تابشی  $\tau_{v'}$  یک تراز ارتعاشی از جمع احتمال های جهش به تمام ترازهای ارتعاشی پایین تر متعلق به تمام حالت های الکترونی پایین تر بدست می آید. چنانچه از اثرات چرخش چشم پوشی شود، طول عمر را می توان بصورت زیر نوشت:

$$\tau_{v'} = (\sum_{v''} A_{v'v''})^{-1} \quad (5)$$

این طول عمر تابشی را زمان آسایش نیز می نامند که همان عمر مؤثر مربوط به انتقال مولکول ها از حالت برانگیخته ی بالاتر به حالت پایین تر است.

یک روش متداول برای تعیین ممان جهش بصورت تجربی تقریب  $R$ -مرکزی<sup>۲</sup> است [۱۸-۱۷]. در این مورد،  $\mu_e$  بصورت یک چندجمله ای مرتبه ی  $i$  بر حسب فاصله ی بین هسته های  $R$  بیان می شود:

$$\mu_e(R) = \sum_{i=0} a_i R^i \quad (6)$$

بطوری که انتگرال ظاهر شده در معادله ی (۳) بصورت زیر در می آید:

$$\int dR \psi_{v'}^* \mu_e \psi_{v''} = \sum_{i=0} a_i \int dR \psi_{v'}^* R^i \psi_{v''} \quad (7)$$

این انتگرال می تواند بر حسب پارامتر  $R$ -مرکزی،  $\bar{R}_{v'v''}$  برای هر نوار  $(v', v'')$  نوشته شود:

$$\int dR \psi_{v'}^* R^i \psi_{v''} \approx (\bar{R}_{v'v''})^i \int dR \psi_{v'}^* \psi_{v''} \quad (8)$$

که در آن  $\bar{R}_{v'v''}$  میانگین فاصله ی بین هسته ای برای نوار  $(v', v'')$  است:

$$\bar{R}_{v'v''} = \frac{\int dR \psi_{v'}^* R \psi_{v''}}{\int dR \psi_{v'}^* \psi_{v''}} \quad (9)$$

با به کار بردن این تقریب می توان معادله ی (۲) را بصورت زیر بازنویسی کرد:

$$A_{v'v''} = \frac{64\pi^4 \nu_{v'v''}^3}{3\hbar c^3} \frac{2-\delta_{0,\Lambda'+\Lambda''}}{2+\delta_{0,\Lambda'}} [\mu_e(\bar{R}_{v'v''})]^2 q_{v'v''} \quad (10)$$

<sup>1</sup> ab initio

<sup>2</sup> R-centroid approximation

مجذور انتگرال‌های همپوشانی در معادله‌ی (۷) بصورت نمادین با ضرایب فرانک-کوندون  $q_{v',v''}$  برای هر نوار  $(v', v'')$  جایگزین می‌شوند.  $\mu_g(\bar{R}_{v',v''})$  در رابطه‌ی فوق، مقدار ممان جهش الکترونی در  $R$  مرکزی  $\bar{R}_{v',v''}$  است.

دقیق‌ترین مقادیر ضرایب فرانک-کوندون با استفاده از منحنی‌های پتانسیل RKR به دست می‌آیند. برای بنا نهادن این منحنی‌ها به مجموعه‌ای از داده‌های دقیق طیف‌سنجی نیاز داریم. با این وجود، تمام داده‌های طیف‌سنجی برای تمام مولکول‌ها در تمام حالت‌های الکترونی موجود نیستند. در غیاب عبارت‌های دقیق برای توابع موج ارتعاشی می‌توان از ویژه توابع حاصل از برخی توابع پتانسیل تجربی استفاده کرد. ثابت‌های طیف‌سنجی که به منظور تعیین منحنی پتانسیل در دسترس می‌باشند، عبارتند از:  $R_e$ ، فاصله بین هسته‌ای در حالت تعادلی،  $D_e$ : انرژی تفکیک تعادلی،  $k_e$ ، ثابت نیروی تعادلی،  $a_e$ ، ثابت جفت شدن ارتعاش و چرخش،  $\omega_e x_e$  و  $\omega_e y_e$ ، ثابت‌های ناهماهنگی ارتعاشی.

پتانسیل مورس، مشهورترین تابع انرژی پتانسیل تجربی است این تابع سه پارامتری، در سال ۱۹۲۹ توسط معرفی شد [۱۹].

$$V(R) = D_e [1 - e^{-a(R-R_e)}]^2 \quad (11)$$

که در آن  $a = (k_e/2D_e)^{1/2}$  مقداری ثابت برای هر حالت الکترونی است.

پتانسیل فراست-موسولین، یک تابع پتانسیل چهار پارامتری در سال ۱۹۵۴ توسط فراست و موسولین پیشنهاد شد [۲۰].

$$V(R) = D_e + e^{-bR} \left[ \frac{c}{R} - d \right] \quad (12)$$

کمیت  $b$  مطابق زیر تعریف می‌شود:

$$b = \frac{[(1 + 2\Delta)^{1/2} - 1]}{R_e} \quad (13)$$

که در آن  $\Delta = k_e R_e^2 / 2D_e$  پارامتر بدون بعد سوترلند<sup>۱</sup> می‌باشد. پارامترهای  $c$  و  $d$  با معادلات زیر داده می‌شوند [۲۰].

$$c = e^{aR_e} D_e (1 + aR_e) \quad (14)$$

$$d = aD_e e^{aR_e} R_e^2 \quad (15)$$

پتانسیل وی-هوا، نه تنها دقیقترین تابع پتانسیل چهار پارامتری است، بلکه این مزیت را دارد که معادله شرویدینگر مربوط به آن بطور دقیق قابل حل است. این تابع به شکل زیر است [۲۱]:

$$V(R) = D_e \left[ \frac{1 - e^{-b(R-R_e)}}{1 - c e^{-b(R-R_e)}} \right]^2 \quad (16)$$

که در آن:

$$b = a(1 - c) \quad (17)$$

$$c = 1 - \left( \frac{1}{aR_e} (1 + f) \right) \quad (18)$$

$$a = \left( \frac{k_e}{2D_e} \right)^{1/2} \quad (19)$$

<sup>1</sup> Sutherland

$$f = \frac{\alpha_{\epsilon} \omega_{\epsilon}}{6B_{\epsilon}^2} \quad (20)$$

پتانسیل هولبرت - هرشفلر، شکل اصلاح شده‌ی پتانسیل مورس با معادله‌ی زیر است [۲۲].

$$V(q) = D_{\epsilon} [(1 - e^{-aq})^2 + ca^3 q^3 e^{-2aq} (1 + abq)] \quad , \quad q = R - R_{\epsilon} \quad (21)$$

که در آن  $a = (k_{\epsilon}/2D_{\epsilon})^{1/2}$  همان ثابت مورس است، و  $b$  و  $c$  مطابق زیر هستند:

$$b = 2 - \frac{1}{c} \left\{ \frac{7}{12} - \frac{1}{a^2 R_{\epsilon}^2} \left[ \frac{5}{4} + \frac{5F}{2} + \frac{5F^2}{4} + \frac{G}{12} \right] \right\} \quad (22)$$

$$c = 1 - \left( \frac{1}{aR_{\epsilon}} \right) (1 + F) \quad (23)$$

در معادلات بالا  $F$  و  $G$  مطابق زیر تعریف می‌شوند:

$$F = \frac{\alpha_{\epsilon} \omega_{\epsilon}}{6B_{\epsilon}^2} \quad (24)$$

$$B_{\epsilon} = \frac{h}{8\pi^2 I_{\epsilon}} \quad , \quad G = \frac{8\omega_{\epsilon} x_{\epsilon}}{B_{\epsilon}} \quad (25)$$

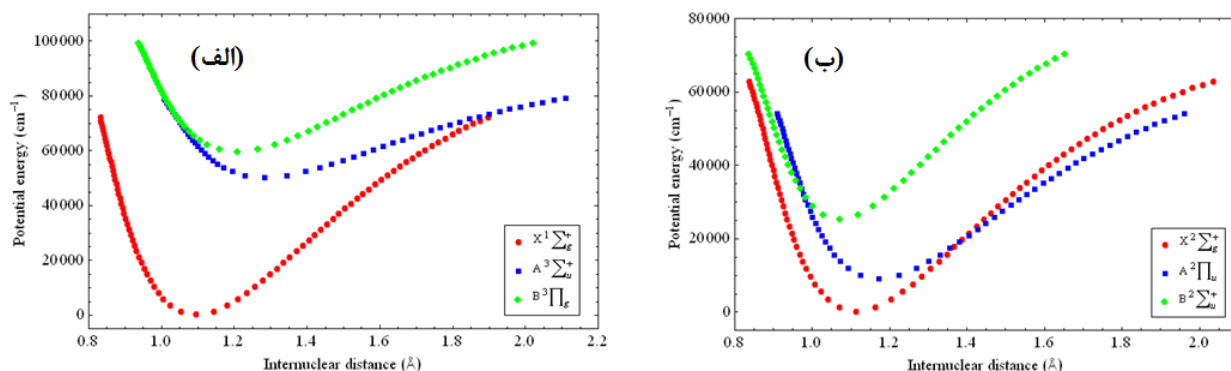
این تابع در نواحی  $R > R_{\epsilon}$  نتایج بهتری را حاصل می‌نماید.

### ۳. نتایج و بحث

در این پژوهش، از چهار پتانسیل تجربی شناخته شده برای حل معادله‌ی شرودینگر شعاعی و یافتن ویژه مقادیر و ویژه توابع ارتعاشی حالت‌های الکترونی  $X^1\Sigma_g^+$ ،  $A^3\Sigma_u^+$  و  $B^3\Pi_g^-$  مولکول  $N_2$  و حالت‌های الکترونی  $X^2\Sigma_g^+$ ،  $A^2\Pi_u$ ،  $B^2\Sigma_u^+$  یون مولکول  $N_2^+$  استفاده می‌شود. نتایج با داده‌های حاصل از روش RKR مقایسه و در مورد دقت پتانسیل‌های تجربی داوری می‌شود. سپس، اعداد موجی جهش و ضرایب فرانک-کوندون برای نوارهای سیستم‌های  $B^3\Pi_g^- - A^3\Sigma_u^+$  مولکول  $N_2$  و نوارهای سیستم‌های  $B^2\Sigma_u^+ - A^2\Pi_u$ ،  $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$ ،  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$  یون مولکولی  $N_2^+$  محاسبه و توزیع شدت در ساختار ارتعاشی نوارهای الکترونی پیش‌بینی می‌شود.

#### ۳-۱. منحنی‌های انرژی پتانسیل

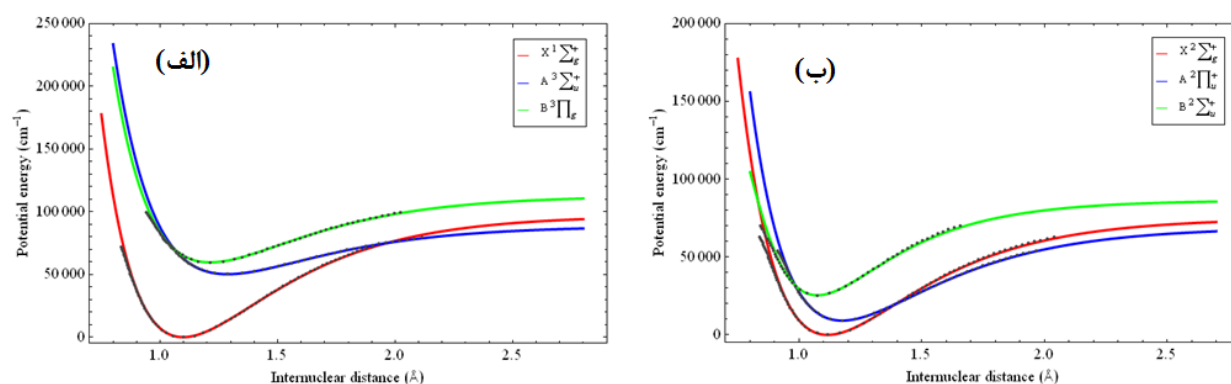
منحنی‌های انرژی پتانسیل RKR برای حالت‌های الکترونی مورد بررسی در مولکول‌های  $N_2$  و  $N_2^+$  با استفاده از یک برنامه‌ی رایانه‌ای که با نرم افزار متمتیکا نوشته شده [۲۳] محاسبه و در شکل ۱ نشان داده شده‌اند. این برنامه علاوه بر نقاط بازگشت کلاسیکی (برحسب  $\text{\AA}$ )، انرژی ترازهای ارتعاشی (برحسب  $\text{cm}^{-1}$ ) را تا حد تفکیک نشان می‌دهند. ثابت‌های طیف‌سنجی ورودی برنامه شامل از مراجع ۸ و ۱۱ گرفته شده‌اند.



شکل ۱. منحنی‌های انرژی پتانسیل RKR برای حالت‌های الکترونی مختلف (الف) مولکول  $N_2$ ، (ب) یون مولکولی  $N_2^+$

در شکل ۲، منحنی انرژی پتانسیل هولبرت-هرشفلر (به عنوان نمونه‌ای از یکی از توابع پتانسیل تجربی) حالت‌های الکترونی مختلف مولکول‌های  $N_2$  و  $N_2^+$  برحسب فاصله‌ی بین هسته‌ای رسم شده است. منحنی انرژی پتانسیل واقعی RKR نیز برای مقایسه به صورت نقطه‌چین نشان داده شده‌اند.

در ترازهای پایین‌تر ارتعاشی منحنی‌ها کاملاً بر یکدیگر منطبق می‌شوند، در صورتی که با دور شدن از فاصله‌ی بین هسته‌ای  $R_e$ ، میزان این انطباق به تدریج کاهش می‌یابد. نکته‌ی قابل توجه آن است که بیشترین میزان انحراف منحنی‌های پتانسیل تجربی از پتانسیل واقعی RKR مربوط به ناحیه‌ی مجانبی و نزدیک به حد تفکیک می‌باشد. این اختلاف در ناحیه‌ی مجانبی در داده‌های به دست آمده برای ترازهای ارتعاشی (جداول ۱-۶) نیز محسوس است.



شکل ۲. مقایسه‌ی منحنی‌های انرژی پتانسیل هولبرت-هرشفلر (خط تیره) و RKR (نقطه‌چین) برای حالت‌های الکترونی مختلف (الف) مولکول  $N_2$ ، (ب) یون مولکولی  $N_2^+$

### ۲-۳. انرژی‌های ارتعاشی محض

انرژی‌های ارتعاشی حالت‌های الکترونی مختلف مولکول‌های  $N_2$  و  $N_2^+$  که از حل عددی معادله‌ی شرودینگر شعاعی با روش کولی-نیومروف و با استفاده از کد Level برای پتانسیل‌های تجربی مورس، فراست-موسولین، وی-هوا، و هولبرت-هرشفلر به دست آمده‌اند. نتایج در جداول ۱-۶ ارائه و با انرژی‌های واقعی RKR مقایسه شده‌اند.

جدول ۱. انرژی‌های ارتعاشی ( $\text{cm}^{-1}$ ) برای حالت الکترونی  $X^1\Sigma_g^+$  مولکول  $N_2$ 

تراز	RKR	مورس	فراست- موسولین	وی-هوا	هولبرت-هرشفلر
۰	۱۱۷۵/۷۱	۱۱۷۵/۷۰	۱۱۷۵/۷۸	۱۱۷۵/۷۰	۱۱۷۵/۷۷
۱	۳۵۰۵/۶۴	۳۵۰۵/۶۲	۳۵۰۵/۳۳	۳۵۰۵/۸۹	۳۵۰۵/۶۹
۲	۵۸۰۶/۹۳	۵۸۰۶/۹۰	۵۸۰۵/۸۸	۵۸۰۷/۷۱	۵۸۰۶/۹۹
۳	۸۰۷۹/۵۸	۸۰۷۹/۵۴	۸۰۷۷/۴۸	۸۰۸۱/۱۳	۸۰۷۹/۶۶
۴	۱۰۳۲۳/۶	۱۰۳۲۳/۵۴	۱۰۳۲۰/۱۴	۱۰۳۲۶/۱۷	۱۰۳۲۳/۷۲
۵	۱۲۵۳۹/۰	۱۲۵۳۸/۹۱	۱۲۵۳۳/۹۰	۱۲۵۴۲/۷۹	۱۲۵۳۹/۱۷
۶	۱۴۷۲۵/۷	۱۴۷۲۵/۶۳	۱۴۷۱۸/۷۹	۱۴۷۳۱/۰	۱۴۷۲۶/۰۲
۷	۱۶۸۸۳/۸	۱۶۸۸۳/۷۱	۱۶۸۷۴/۸۲	۱۶۸۹۰/۷۷	۱۶۸۸۴/۲۷
۸	۱۹۰۱۳/۲	۱۹۰۱۳/۱۵	۱۹۰۰۲/۰۴	۱۹۰۲۲/۱۲	۱۹۰۱۳/۹۳
۹	۲۱۱۱۴/۰	۲۱۱۱۳/۹۶	۲۱۱۰۰/۴۶	۲۱۱۲۵/۰۱	۲۱۱۱۵/۰۰
۱۰	۲۳۱۸۶/۲	۲۳۱۸۶/۱۲	۲۳۱۷۰/۱۰	۲۳۱۹۹/۴۴	۲۳۱۸۷/۴۹
۱۱	۲۵۲۲۹/۷	۲۵۲۲۹/۶۴	۲۵۲۱۱/۰	۲۵۲۴۵/۴۱	۲۵۲۳۱/۴۰
۱۲	۲۷۲۲۴/۶	۲۷۲۲۴/۵۳	۲۷۲۲۳/۱۹	۲۷۲۶۲/۹۰	۲۷۲۴۶/۷۳
۱۳	۲۹۲۳۰/۹	۲۹۲۳۰/۷۷	۲۹۲۰۶/۶۷	۲۹۲۵۱/۹۰	۲۹۲۳۳/۴۸
۱۴	۳۱۱۸۸/۵	۳۱۱۸۸/۳۸	۳۱۱۶۱/۴۸	۳۱۲۱۲/۴۱	۳۱۱۹۱/۶۶
۱۵	۳۳۱۱۷/۷	۳۳۱۱۷/۳۴	۳۳۰۸۷/۶۳	۳۳۱۴۴/۴۰	۳۳۱۲۱/۲۸
۱۶	۳۵۰۱۷/۸	۳۵۰۱۷/۶۷	۳۴۹۸۵/۱۶	۳۵۰۴۷/۸۸	۳۵۰۲۲/۳۲
۱۷	۳۶۸۸۹/۵	۳۶۸۸۹/۳۵	۳۶۸۵۴/۰۸	۳۶۹۲۲/۸۳	۳۶۸۹۴/۷۹
۱۸	۳۸۷۳۲/۵	۳۸۷۳۲/۴۰	۳۸۶۹۴/۴۲	۳۸۷۶۹/۲۴	۳۸۷۳۸/۷۰
۱۹	۴۰۵۴۶/۹	۴۰۵۴۶/۸۰	۴۰۵۰۶/۱۸	۴۰۵۸۷/۱۰	۴۰۵۵۴/۰۴
۲۰	۴۲۳۳۲/۷	۴۲۳۳۲/۵۷	۴۲۲۸۹/۴۰	۴۲۳۷۶/۴۱	۴۲۳۴۰/۸۲
۲۱	۴۴۰۸۹/۸	۴۴۰۸۹/۶۹	۴۴۰۴۴/۱۰۱	۴۴۱۳۷/۱۴	۴۴۰۹۹/۰۲

جدول ۲. انرژی‌های ارتعاشی ( $\text{cm}^{-1}$ ) برای حالت الکترونی  $A^3\Sigma_g^+$  مولکول  $N_2$ 

تراز	RKR	مورس	فراست- موسولین	وی-هوا	هولبرت-هرشفلر
۰	۷۲۶/۸۵	۷۲۶/۸۲	۷۲۶/۹۲	۷۲۶/۸۲	۷۲۶/۷۹
۱	۲۱۵۹/۷۵	۲۱۵۹/۶۸	۲۱۵۹/۹۹	۲۱۵۹/۵۳	۲۱۵۹/۶۴
۲	۳۵۶۴/۹۱	۳۵۶۴/۸۰	۳۵۶۵/۵۴	۳۵۶۴/۳۶	۳۵۶۴/۷۵
۳	۴۹۴۲/۳۳	۴۹۴۲/۱۸	۴۹۴۳/۶۳	۴۹۴۱/۳۲	۴۹۴۲/۱۰
۴	۶۲۹۲/۰۱	۶۲۹۱/۸۲	۶۲۹۴/۱۶	۶۲۹۰/۴۲	۶۲۹۱/۷۰
۵	۷۶۱۳/۹۵	۷۶۱۳/۷۲	۷۶۱۷/۲۵	۷۶۱۱/۶۷	۷۶۱۳/۵۴
۶	۸۹۰۸/۱۵	۸۹۰۷/۸۸	۸۹۱۲/۸۶	۸۹۰۵/۰۷	۸۹۰۷/۶۱
۷	۱۰۱۷۴/۶	۱۰۱۷۴/۳۱	۱۰۱۸۱/۰۱	۱۰۱۷۰/۶۴	۱۰۱۷۳/۹۱
۸	۱۱۴۱۳/۳	۱۱۴۱۳/۰	۱۱۴۲۱/۷۰	۱۱۴۰۸/۳۸	۱۱۴۱۲/۴۵
۹	۱۲۶۲۴/۳	۱۲۶۲۳/۹۵	۱۲۶۳۴/۹۴	۱۲۶۱۸/۳۱	۱۲۶۲۳/۲۱
۱۰	۱۳۸۰۷/۶	۱۳۸۰۷/۱۶	۱۳۸۲۰/۷۲	۱۳۸۰۰/۴۳	۱۳۸۰۶/۲۰



۱۴۹۶۱/۴۱	۱۴۹۵۴/۷۵	۱۴۹۷۹/۰۶	۱۴۹۶۲/۶۳	۱۴۹۶۳/۱	۱۱
۱۶۰۸۸/۸۵	۱۶۰۸۱/۲۸	۱۶۱۰۹/۹۴	۱۶۰۹۰/۳۷	۱۶۰۹۰/۸	۱۲
۱۷۱۸۸/۵۱	۱۷۱۸۰/۰۲	۱۷۲۱۳/۳۷	۱۷۱۹۰/۳۶	۱۷۱۹۰/۸	۱۳
۱۸۲۶۰/۴۰	۱۸۲۵۱/۰۰	۱۸۲۸۹/۳۵	۱۸۲۶۲/۶۲	۱۸۲۶۳/۱	۱۴
۱۹۳۰۴/۵۲	۱۹۲۹۴/۲۱	۱۹۳۳۷/۸۶	۱۹۳۰۷/۱۴	۱۹۳۰۷/۷	۱۵
۲۰۳۲۰/۸۶	۲۰۳۰۹/۶۶	۲۰۳۵۸/۹۰	۲۰۳۲۳/۹۲	۲۰۳۲۴/۵	۱۶
۲۱۳۰۹/۴۳	۲۱۲۹۷/۳۶	۲۱۳۵۲/۴۷	۲۱۳۱۲/۹۷	۲۱۳۱۳/۵	۱۷
۲۲۲۷۰/۲۳	۲۲۲۵۷/۳۳	۲۲۳۱۸/۵۴	۲۲۲۷۴/۲۷	۲۲۲۷۴/۸	۱۸
۲۳۲۰۳/۲۸	۲۳۱۸۹/۵۷	۲۳۲۵۷/۱۰	۲۳۲۰۷/۸۴	۲۳۲۰۸/۴	۱۹
۲۴۱۰۸/۵۶	۲۴۰۹۴/۰۸	۲۴۱۶۸/۱۵	۲۴۱۱۳/۶۷	۲۴۱۱۴/۳	۲۰
۲۴۹۸۶/۰۸	۲۴۹۷۰/۸۹	۲۵۰۵۱/۶۵	۲۴۹۹۱/۷۶	۲۴۹۹۲/۴	۲۱

جدول ۳. انرژی‌های ارتعاشی ( $\text{cm}^{-1}$ ) برای حالت الکترونی  $B^3\Pi_g$  مولکول  $N_2$

تراز	RKR	مورس	فراست - موسولین	وی - هوا	هولبرت - هرشفلر
۰	۸۶۳/۱۶	۸۶۳/۱۷	۸۶۳/۲۷	۸۶۳/۱۷	۸۶۳/۱۵
۱	۲۵۶۸/۳۲	۲۵۶۸/۳۵	۲۵۶۸/۴۷	۲۵۶۸/۲۸	۲۵۶۸/۳۳
۲	۴۲۴۵/۲۳	۴۲۴۵/۲۸	۴۲۴۵/۴۷	۴۲۴۵/۰۷	۴۲۴۵/۲۶
۳	۵۸۹۳/۹۰	۵۸۹۳/۹۸	۵۸۹۳/۳۰	۵۸۹۳/۵۵	۵۸۹۳/۹۴
۴	۷۵۱۴/۳۳	۷۵۱۴/۴۳	۷۵۱۴/۹۸	۷۵۱۳/۷۴	۷۵۱۴/۳۸
۵	۹۱۰۶/۵۲	۹۱۰۶/۶۴	۹۱۰۷/۵۱	۹۱۰۵/۶۲	۹۱۰۶/۵۶
۶	۱۰۶۷۰/۵۰	۱۰۶۷۰/۶۱	۱۰۶۷۱/۹۲	۱۰۶۶۹/۲۱	۱۰۶۷۰/۴۹
۷	۱۲۲۰۶/۲۰	۱۲۲۰۶/۳۴	۱۲۲۰۸/۲۲	۱۲۲۰۴/۵۰	۱۲۲۰۶/۱۷
۸	۱۳۷۱۳/۶۰	۱۳۷۱۳/۸۳	۱۳۷۱۶/۴۴	۱۳۷۱۱/۵۱	۱۳۷۱۳/۵۹
۹	۱۵۱۹۲/۹۰	۱۵۱۹۳/۰۸	۱۵۱۹۶/۵۷	۱۵۱۹۰/۲۴	۱۵۱۹۲/۷۵
۱۰	۱۶۶۴۳/۹۰	۱۶۶۴۴/۰۹	۱۶۶۴۸/۶۴	۱۶۶۴۰/۶۸	۱۶۶۴۳/۶۶
۱۱	۱۸۰۶۶/۶۰	۱۸۰۶۶/۸۶	۱۸۰۷۲/۶۶	۱۸۰۶۲/۸۴	۱۸۰۶۶/۳۱
۱۲	۱۹۴۶۱/۱۰	۱۹۴۶۱/۳۸	۱۹۴۶۸/۶۳	۱۹۴۵۶/۷۴	۱۹۴۶۰/۷۰
۱۳	۲۰۸۲۷/۴۰	۲۰۸۲۷/۶۷	۲۰۸۳۶/۵۷	۲۰۸۲۲/۳۶	۲۰۸۲۶/۸۳
۱۴	۲۲۱۶۵/۴۰	۲۲۱۶۵/۷۱	۲۲۱۷۶/۴۹	۲۲۱۵۹/۷۱	۲۲۱۶۴/۷۰
۱۵	۲۳۴۷۵/۲۰	۲۳۴۷۵/۵۲	۲۳۴۸۸/۳۹	۲۳۴۶۸/۸۱	۲۳۴۷۴/۳۲
۱۶	۲۴۷۵۶/۸۰	۲۴۷۵۷/۰۸	۲۴۷۷۲/۲۹	۲۴۷۴۹/۶۴	۲۴۷۵۵/۶۷
۱۷	۲۶۰۱۰/۱۰	۲۶۰۱۰/۴۰	۲۶۰۲۸/۱۷	۲۶۰۰۲/۲۲	۲۶۰۰۸/۷۷
۱۸	۲۷۲۳۵/۱۰	۲۷۲۳۵/۴۸	۲۷۲۵۶/۰۶	۲۷۲۲۶/۵۵	۲۷۲۳۳/۶۰
۱۹	۲۸۴۳۲/۰۰	۲۸۴۳۲/۳۲	۲۸۴۵۵/۹۴	۲۸۴۲۲/۶۳	۲۸۴۳۰/۱۸
۲۰	۲۹۶۰۰/۶۰	۲۹۶۰۰/۹۲	۲۹۶۲۷/۸۲	۲۹۵۹۰/۴۶	۲۹۵۹۸/۵۱
۲۱	۳۰۷۴۰/۹۰	۳۰۷۴۱/۲۸	۳۰۷۷۱/۷۰	۳۰۷۳۰/۰۵	۳۰۷۳۸/۵۸

جدول ۴. انرژی‌های ارتعاشی ( $\text{cm}^{-1}$ ) برای حالت الکترونی  $X^2\Sigma^+$  مولکول  $\text{N}_2^+$ 

تراز	RKR	مورس	فراست- موسولین	وی-هوا	هولبرت-هرشفلر
۰	۱۰۹۹/۵۶	۱۰۹۹/۵۸	۱۰۹۹/۶۸	۱۰۹۹/۵۸	۱۰۹۹/۴۲
۱	۳۲۷۴/۳۱	۳۲۷۴/۳۶	۳۲۷۴/۴۴	۳۲۷۳/۷۳	۳۲۷۴/۲۰
۲	۵۴۱۶/۵۶	۵۴۱۶/۶۵	۵۴۱۶/۶۹	۵۴۱۴/۷۸	۵۴۱۶/۴۶
۳	۷۵۲۶/۳۱	۷۵۲۶/۴۴	۷۵۲۶/۴۶	۷۵۲۲/۷۴	۷۵۲۶/۱۷
۴	۹۶۰۳/۵۶	۹۶۰۳/۷۲	۹۶۰۳/۷۷	۹۵۹۷/۶۷	۹۶۰۳/۳۲
۵	۱۱۶۴۸/۳۰	۱۱۶۴۸/۵۰	۱۱۶۴۸/۶۴	۱۱۶۳۹/۵۷	۱۱۶۴۷/۹۰
۶	۱۳۶۶۰/۶۰	۱۳۶۶۰/۷۹	۱۳۶۶۱/۰۸	۱۳۶۴۸/۴۸	۱۳۶۵۹/۹۰
۷	۱۵۶۴۰/۳۰	۱۵۶۴۰/۵۷	۱۵۶۴۱/۱۳	۱۵۶۲۴/۴۳	۱۵۶۳۹/۳۰
۸	۱۷۵۸۷/۶۰	۱۷۵۸۷/۸۵	۱۷۵۸۸/۷۹	۱۷۵۶۷/۴۵	۱۷۵۸۶/۰۹
۹	۱۹۵۰۲/۳۰	۱۹۵۰۲/۶۲	۱۹۵۰۴/۰۹	۱۹۴۷۷/۵۷	۱۹۵۰۰/۲۷
۱۰	۲۱۳۸۴/۶۰	۲۱۳۸۴/۹۰	۲۱۳۸۷/۰۴	۲۱۳۵۴/۸۱	۲۱۳۸۱/۸۲
۱۱	۲۳۲۲۳/۳۰	۲۳۲۲۳/۶۸	۲۳۲۲۷/۶۶	۲۳۱۹۹/۲۰	۲۳۲۳۰/۷۴
۱۲	۲۵۰۵۱/۶۰	۲۵۰۵۱/۹۵	۲۵۰۵۵/۹۷	۲۵۰۱۰/۷۸	۲۵۰۴۷/۰۲
۱۳	۲۶۸۳۶/۳۰	۲۶۸۳۶/۷۳	۲۶۸۴۱/۹۷	۲۶۷۸۹/۵۷	۲۶۸۳۰/۶۶
۱۴	۲۸۵۸۸/۶۰	۲۸۵۸۹/۰۰	۲۸۵۹۵/۶۸	۲۸۵۳۵/۶۰	۲۸۵۸۱/۶۵
۱۵	۳۰۳۰۸/۳۰	۳۰۳۰۸/۷۷	۳۰۳۱۷/۱۱	۳۰۲۴۸/۹۱	۳۰۲۹۹/۹۹
۱۶	۳۱۹۹۵/۶۰	۳۱۹۹۶/۰۴	۳۲۰۰۶/۲۷	۳۱۹۲۹/۵۰	۳۱۹۸۵/۶۸
۱۷	۳۳۶۵۰/۳۰	۳۳۶۵۰/۸۱	۳۳۶۶۳/۱۸	۳۳۵۷۷/۴۳	۳۳۶۳۸/۷۳
۱۸	۳۵۲۷۲/۶۰	۳۵۲۷۳/۰۸	۳۵۲۸۷/۸۳	۳۵۱۹۲/۷۱	۳۵۲۵۹/۱۲
۱۹	۳۶۸۶۲/۳۰	۳۶۸۶۲/۸۵	۳۶۸۸۰/۲۴	۳۶۷۷۵/۳۷	۳۶۸۴۶/۸۷
۲۰	۳۸۴۱۹/۶۰	۳۸۴۲۰/۱۱	۳۸۴۴۰/۴۲	۳۸۳۲۵/۴۵	۳۸۴۰۱/۹۸
۲۱	۳۹۹۴۴/۳۰	۳۹۹۴۴/۸۸	۳۹۹۶۸/۳۶	۳۹۸۴۲/۹۶	۳۹۹۲۴/۴۶

جدول ۵. انرژی‌های ارتعاشی ( $\text{cm}^{-1}$ ) برای حالت الکترونی  $A^2\Pi_u$  مولکول  $\text{N}_2^+$ 

تراز	RKR	مورس	فراست- موسولین	وی-هوا	هولبرت-هرشفلر
۰	۹۴۸/۰۷	۹۴۷/۹۸	۹۴۸/۰۸	۹۴۷/۹۸	۹۴۸/۰۰
۱	۲۸۲۱/۵۵	۲۸۲۱/۳۰	۲۸۲۱/۴۳	۲۸۲۱/۳۶	۲۸۲۱/۳۱
۲	۴۶۶۴/۸۱	۴۶۶۴/۴۰	۴۶۶۴/۶۳	۴۶۶۴/۵۹	۴۶۶۴/۴۲
۳	۶۴۷۷/۸۵	۶۴۷۷/۲۸	۶۴۷۷/۶۸	۶۴۷۷/۶۶	۶۴۷۷/۳۱
۴	۸۲۶۰/۶۷	۸۲۵۹/۹۵	۸۲۶۰/۶۲	۸۲۶۰/۵۸	۸۲۶۰/۰۰
۵	۱۰۰۱۳/۳۰	۱۰۰۱۲/۴۱	۱۰۰۱۳/۴۵	۱۰۰۱۳/۳۳	۱۰۰۱۲/۴۸
۶	۱۱۷۳۵/۷۰	۱۱۷۳۴/۶۵	۱۱۷۳۶/۲۰	۱۱۷۳۵/۹۲	۱۱۷۳۴/۷۶
۷	۱۳۴۲۷/۸۰	۱۳۴۲۶/۶۸	۱۳۴۲۸/۸۹	۱۳۴۲۸/۳۳	۱۳۴۲۶/۸۳
۸	۱۵۰۸۹/۸۰	۱۵۰۸۸/۴۹	۱۵۰۹۱/۵۲	۱۵۰۹۰/۵۸	۱۵۰۸۸/۷۱
۹	۱۶۷۲۱/۵۰	۱۶۷۲۰/۰۹	۱۶۷۲۴/۱۲	۱۶۷۲۲/۶۵	۱۶۷۲۰/۳۸
۱۰	۱۸۳۲۳/۰۰	۱۸۳۲۱/۴۷	۱۸۳۲۶/۶۹	۱۸۳۲۴/۵۵	۱۸۳۲۱/۸۶
۱۱	۱۹۸۹۴/۳۰	۱۹۸۹۲/۶۴	۱۹۸۹۹/۲۵	۱۹۸۹۶/۲۶	۱۹۸۹۳/۱۳

۲۱۴۳۴/۲۱	۲۱۴۳۷/۸۰	۲۱۴۴۱/۸۱	۲۱۴۳۳/۵۹	۲۱۴۳۵/۳۰	۱۲
۲۲۹۴۵/۰۹	۲۲۹۴۹/۱۴	۲۲۹۵۴/۳۸	۲۲۹۴۴/۳۳	۲۲۹۴۶/۲۰	۱۳
۲۴۴۲۵/۷۷	۲۴۴۳۰/۲۹	۲۴۴۳۶/۹۷	۲۴۴۲۴/۸۵	۲۴۴۲۶/۸۰	۱۴
۲۵۸۷۶/۲۶	۲۵۸۸۱/۲۵	۲۵۸۸۹/۵۸	۲۵۸۷۵/۱۷	۲۵۸۷۷/۲۰	۱۵
۲۷۲۹۶/۵۴	۲۷۳۰۲/۰۱	۲۷۳۱۲/۲۳	۲۷۲۹۵/۲۶	۲۷۲۹۷/۴۰	۱۶
۲۸۶۸۶/۶۳	۲۸۶۹۲/۵۷	۲۸۷۰۴/۹۲	۲۸۶۸۵/۱۴	۲۸۶۸۷/۳۰	۱۷
۳۰۰۴۶/۵۲	۳۰۰۵۲/۹۳	۳۰۰۶۷/۶۴	۳۰۰۴۴/۸۱	۳۰۰۴۷/۱۰	۱۸
۳۱۳۷۶/۲۱	۳۱۳۸۳/۰۸	۳۱۴۰۰/۴۱	۳۱۳۷۴/۲۶	۳۱۳۷۶/۶۰	۱۹
۳۲۶۷۵/۷۰	۳۲۶۸۳/۰۳	۳۲۷۰۳/۲۲	۳۲۶۷۳/۵۰	۳۲۶۷۵/۹۰	۲۰
۳۳۹۴۴/۹۹	۳۳۹۵۲/۷۶	۳۳۹۷۶/۰۸	۳۳۹۴۲/۵۲	۳۳۹۴۵/۰۰	۲۱

جدول ۶. انرژی‌های ارتعاشی ( $\text{cm}^{-1}$ ) برای حالت الکترونی  $B^2\Sigma^+$  مولکول  $N_2^+$

تراز	RKR	مورس	فراست-موسولین	وی-هوا	هولبرت-هرشفلر
۰	۱۲۰۴/۵۵	۱۲۰۴/۹۰	۱۲۰۵/۰۸	۱۲۰۴/۸۰	۱۲۰۳/۴۷
۱	۳۵۷۷/۵۵	۳۵۷۸/۵۹	۳۵۷۹/۶۸	۳۵۷۱/۸۵	۳۵۷۷/۱۱
۲	۵۹۰۲/۴۱	۵۹۰۴/۱۰	۵۹۰۷/۰۲	۵۸۸۴/۵۴	۵۹۰۲/۴۱
۳	۸۱۷۹/۱۳	۸۱۸۱/۴۵	۸۱۸۷/۰۹	۸۱۴۳/۳۳	۸۱۷۹/۲۷
۴	۱۰۴۰۷/۷۰	۱۰۴۱۰/۶۳	۱۰۴۱۹/۸۹	۱۰۳۴۸/۶۶	۱۰۴۰۷/۵۸
۵	۱۲۵۸۸/۲۰	۱۲۵۹۱/۶۴	۱۲۶۰۵/۳۹	۱۲۵۰۰/۹۷	۱۲۵۸۷/۲۶
۶	۱۴۷۲۰/۵۰	۱۴۷۲۴/۴۸	۱۴۷۴۳/۵۹	۱۴۶۰۰/۷۰	۱۴۷۱۸/۲۲
۷	۱۶۸۰۴/۶۰	۱۶۸۰۹/۱۶	۱۶۸۳۴/۴۶	۱۶۶۴۸/۲۷	۱۶۸۰۰/۳۶
۸	۱۸۸۴۰/۶۰	۱۸۸۴۵/۶۶	۱۸۸۷۷/۹۹	۱۸۶۴۴/۱۱	۱۸۸۳۳/۶۳
۹	۲۰۸۲۸/۵۰	۲۰۸۳۴/۰۰	۲۰۸۷۴/۱۵	۲۰۵۸۸/۶۳	۲۰۸۱۷/۹۴
۱۰	۲۲۷۶۸/۳۰	۲۲۷۷۴/۱۷	۲۲۸۲۲/۹۱	۲۲۴۸۲/۲۵	۲۲۷۵۳/۲۵
۱۱	۲۴۶۵۹/۹۰	۲۴۶۶۶/۱۷	۲۴۷۲۴/۲۴	۲۴۳۲۵/۳۸	۲۴۶۳۹/۵۲
۱۲	۲۶۵۰۳/۳۰	۲۶۵۱۰/۰۰	۲۶۵۷۸/۱۱	۲۶۱۱۸/۴۱	۲۶۴۷۶/۷۰
۱۳	۲۸۲۹۸/۶۰	۲۸۳۰۵/۶۷	۲۸۳۸۴/۴۸	۲۷۸۶۱/۷۵	۲۸۲۶۴/۷۷
۱۴	۳۰۰۴۵/۸۰	۳۰۰۵۳/۱۷	۳۰۱۴۳/۳۱	۲۹۵۵۵/۸۰	۳۰۰۰۳/۷۳
۱۵	۳۱۷۴۴/۹۰	۳۱۷۵۲/۴۹	۳۱۸۵۴/۵۶	۳۱۲۰۰/۹۲	۳۱۶۹۳/۵۷
۱۶	۳۳۳۹۵/۸۰	۳۳۴۰۳/۶۵	۳۳۵۱۸/۱۷	۳۲۷۹۷/۵۳	۳۳۳۳۴/۳۳
۱۷	۳۴۹۹۸/۵۰	۳۵۰۰۶/۶۴	۳۵۱۳۴/۱۰	۳۴۳۴۵/۹۸	۳۴۹۲۶/۰۲
۱۸	۳۶۵۵۳/۱۰	۳۶۵۶۱/۴	۳۶۷۰۲/۲۷	۳۵۸۴۶/۶۶	۳۶۴۶۸/۷۱
۱۹	۳۸۰۵۹/۶۰	۳۸۰۶۸/۱۲	۳۸۲۲۲/۶۳	۳۷۲۹۹/۹۳	۳۷۹۶۲/۴۶
۲۰	۳۹۵۱۸/۰۰	۳۹۵۲۶/۶	۳۹۶۹۵/۱۲	۳۸۷۰۶/۱۶	۳۹۴۰۷/۳۵
۲۱	۴۰۹۲۸/۲۰	۴۰۹۳۶/۹۲	۴۱۱۱۹/۶۴	۴۰۰۶۵/۷۲	۴۰۸۰۳/۴۹

بررسی نتایج عددی انرژی‌های ارتعاشی در جداول فوق نشان می‌دهند که فاصله‌ی میان دو تراز متوالی ارتعاشی با افزایش عدد کوانتومی ارتعاشی، کاهش می‌یابد. این کاهش که ناشی از اثرات ناهماهنگی در ارتعاشات مولکول‌های واقعی است، با افزایش

دامنه‌ی ارتعاش همراه است و تا رسیدن به حد تفکیک مولکول ادامه دارد. از سوی دیگر، مقایسه انرژی‌های ارتعاشی در جدول ۱-۶ نشان می‌دهد که در ترازهای پایین‌تر، میزان انطباق داده‌های حاصل از پتانسیل‌های مختلف به یکدیگر بسیار زیاد است، اما در نزدیکی حد تفکیک، اختلاف بیشتر می‌شود. برای محاسبه‌ی میزان انحراف نتایج پتانسیل‌های تجربی مورد بررسی نسبت به داده‌های RKR از رابطه‌ی زیر استفاده می‌شود [۲۴]:

$$\Delta Y_j \% = \frac{\sqrt{(U_j - U_{RKR})^2}}{D_e} \times 100$$

که در آن  $U_j$  داده‌های مربوط به پتانسیل مورد بررسی و  $D_e$ ، انرژی تفکیک بر حسب  $\text{cm}^{-1}$  می‌باشد. مقادیر  $\Delta Y_j \%$  برای هر یک از پتانسیل‌های تجربی در جدول ۷ آمده است.

جدول ۷. میزان انحراف پتانسیل‌های مورس، فراست-موسولین، وی-هوا، و هولبرت-هرشفلر از نتایج RKR

$\Delta Y_{HH} \%$	$\Delta Y_{WH} \%$	$\Delta Y_{FM} \%$	$\Delta Y_{Morse} \%$	حالت الکترونی-مولکول
۰/۰۱۱	۰/۰۶۷	۰/۰۱۳	۰/۰۰۳	$N_2^+ - X^2\Sigma_g^+$
۰/۰۰۱	۰/۰۰۶	۰/۰۲۱	۰/۰۰۳	$N_2^+ - A^2\Pi_u$
۰/۰۸۶	۰/۷۴۱	۰/۱۵۶	۰/۰۱۰	$N_2^+ - B^2\Sigma_u^+$
۰/۰۰۶	۰/۰۲۵	۰/۰۲۵	۰/۰۰۰	$N_2 - X^1\Sigma_g^+$
۰/۰۰۸	۰/۰۲۹	۰/۰۷۱	۰/۰۰۱	$N_2 - A^3\Sigma_u^+$
۰/۰۰۲	۰/۰۱۰	۰/۰۲۵	۰/۰۰۰	$N_2 - B^3\Pi_g$

نتایج جدول ۷ نشان می‌دهد که پتانسیل‌های تجربی مختلف را می‌توان به صورت زیر بر اساس میزان انطباق با داده‌های حاصل از پتانسیل واقعی RKR مرتب کرد:

در حالت‌های الکترونی  $X^1\Sigma_g^+$  مولکول  $N_2$ : مورس < هولبرت-هرشفلر < وی-هوا ~ فراست - موسولین

در حالت‌های الکترونی  $A^3\Sigma_u^+$  و  $B^3\Pi_g$  مولکول  $N_2$ : مورس < هولبرت-هرشفلر < وی-هوا < فراست-موسولین

در حالت‌های الکترونی  $X^2\Sigma_g^+$  و  $B^2\Sigma_u^+$  مولکول  $N_2^+$ : مورس < هولبرت-هرشفلر < فراست-موسولین < وی-هوا

در حالت الکترونی  $A^2\Pi_u$  مولکول  $N_2^+$ : هولبرت-هرشفلر < مورس < وی-هوا < فراست-موسولین

ترتیب‌های فوق بیانگر عدم وجود یک تابع پتانسیل عمومی و مشترک برای توصیف ارتعاشات تمام حالت‌های الکترونی تمام مولکول‌های دواتمی است. تنها از طریق محاسبه‌ی انرژی‌های ارتعاشی و مقایسه آن با نتایج تجربی می‌توان بهترین تابع پتانسیل تجربی را تعیین کرد.

### ۳-۳. اعداد موجی جهش‌های الکترونی-ارتعاشی

مکان یک خط طیفی در طیف مرئی و فرابنفش یک مولکول، برابر عدد موجی تابش الکترومغناطیسی است که موجب جهش بین

ترازهای الکترونی- ارتعاشی آن می‌شود. مقادیر این پارامترها که با کد Level [۹] تعیین شده است، برای نوارهای سیستم- های  $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$  مولکول  $N_2$  و  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$ ،  $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$ ،  $B^2\Sigma_u^+ - A^2\Pi_u$ ،  $B^2\Sigma_u^+ - A^2\Pi_u$  یون مولکول  $N_2^+$  محاسبه و نتایج در جداول ۸-۱۱ با نتایج حاصل از پتانسیل واقعی RKR مقایسه شده‌اند. در این جداول، اعداد اول، دوم، سوم، چهارم، و پنجم در هر ستون از خانه‌های جدول به ترتیب نتایج حاصل از پتانسیل RKR [۵]، موریس، فراست- موسولین، وی هوا، و هولبرت- هرشفلر هستند. شایان ذکر است که در مرجع ۵ اعداد موجی برای انتقالات الکترونی  $B^2\Sigma_u^+ - A^2\Pi_u$  یون مولکول  $N_2^+$  با استفاده از پتانسیل RKR گزارش نشده است.

جدول ۸. اعداد موجی ( $cm^{-1}$ ) جهش الکترونی  $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$  مولکول  $N_2$

$u'' \backslash u'$	۰	۱	۲	۳	۴	۵	۶	۷
۰	۹۵۵۲/۰ <sup>a</sup>	۸۱۱۹/۱	۶۷۱۳/۸	۵۳۳۶/۳	۳۹۵۶/۷	۲۶۶۵/۰	۱۳۷۱/۴	۱۰۶/۲
	۹۵۵۲/۰ <sup>b</sup>	۸۱۱۹/۱	۶۷۱۴/۰	۵۳۳۶/۶	۳۹۸۷/۰	۲۶۶۵/۱	۱۳۷۰/۹	۱۰۴/۵
	۹۵۵۲/۰ <sup>c</sup>	۸۱۱۸/۹	۶۷۱۳/۴	۵۳۳۵/۳	۳۹۸۴/۸	۲۶۶۱/۷	۱۳۶۶/۱	۹۷/۹
	۹۵۵۲/۰ <sup>d</sup>	۸۱۱۹/۳	۶۷۱۴/۵	۵۳۳۷/۵	۳۹۸۸/۴	۲۶۶۷/۲	۱۳۷۳/۸	۱۰۸/۲
	۹۵۵۲/۰ <sup>e</sup>	۸۱۱۹/۲	۶۷۱۴/۱	۵۳۳۶/۷	۳۹۸۷/۱	۲۶۶۵/۳	۱۳۷۱/۲	۱۰۴/۹
۱	۱۱۲۵۷/۳	۹۸۲۴/۴	۸۴۱۹/۱	۷۰۴۱/۶	۵۶۹۲/۰	۴۳۷۰/۳	۳۰۷۶/۸	۱۸۱۱/۵
	۱۱۲۵۷/۲	۹۸۲۴/۳	۸۴۱۹/۲	۷۰۴۱/۸	۵۶۹۲/۲	۴۳۷۰/۳	۳۰۷۶/۱	۱۹۰۹/۷
	۱۱۲۵۷/۲	۹۸۲۴/۱	۸۴۱۸/۶	۷۰۴۰/۵	۵۶۹۰/۰	۴۳۶۶/۹	۳۰۷۱/۳	۱۸۰۳/۱
	۱۱۲۵۷/۱	۹۸۲۴/۴	۸۴۱۹/۶	۷۰۴۲/۶	۵۶۹۳/۵	۴۳۷۲/۳	۳۰۷۸/۹	۱۸۱۳/۳
	۱۱۲۵۷/۲	۹۸۲۴/۳	۸۴۱۹/۲	۷۰۴۱/۹	۵۶۹۲/۳	۴۳۷۰/۴	۳۰۷۶/۴	۱۸۱۰/۱
۲	۱۲۹۳۳/۵	۱۱۵۰۰/۷	۱۰۰۹۵/۴	۸۷۱۷/۹	۷۳۶۸/۳	۶۰۴۶/۶	۴۷۵۳/۰	۳۴۸۷/۸
	۱۲۹۳۴/۱	۱۱۵۰۱/۳	۱۰۰۹۶/۱	۸۷۱۸/۸	۷۳۶۹/۱	۶۰۴۷/۲	۴۷۵۳/۰	۳۴۸۶/۶
	۱۲۹۳۴/۲	۱۱۵۰۱/۱	۱۰۰۹۵/۶	۸۷۱۷/۵	۷۳۶۷/۰	۶۰۴۳/۹	۴۷۴۸/۳	۳۴۸۰/۱
	۱۲۹۳۳/۹	۱۱۵۰۱/۲	۱۰۰۹۶/۴	۸۷۱۹/۴	۷۳۷۰/۳	۶۰۴۹/۱	۴۷۵۵/۶	۳۴۹۰/۱
	۱۲۹۳۴/۱	۱۱۵۰۱/۳	۱۰۰۹۶/۲	۸۷۱۸/۸	۷۳۶۹/۲	۶۰۴۷/۴	۴۷۵۳/۲	۳۴۸۷/۰
۳	۱۴۵۸۰/۸	۱۳۱۴۷/۹	۱۱۷۴۲/۷	۱۰۳۶۵/۲	۹۰۱۵/۶	۷۶۹۳/۹	۶۴۰۰/۳	۵۱۳۵/۱
	۱۴۵۸۲/۸	۱۳۱۴۹/۹	۱۱۷۴۴/۸	۱۰۳۶۷/۵	۹۰۱۷/۸	۷۶۹۵/۹	۶۴۰۱/۷	۵۱۳۵/۳
	۱۴۵۸۳/۰	۱۳۱۵۰/۰	۱۱۷۴۴/۴	۱۰۳۶۶/۴	۹۰۱۵/۸	۷۶۹۲/۷	۶۳۹۷/۱	۵۱۲۸/۹
	۱۴۵۸۲/۴	۱۳۱۴۹/۷	۱۱۷۴۴/۸	۱۰۳۶۷/۹	۹۰۱۸/۸	۷۶۹۷/۵	۶۴۰۴/۱	۵۱۳۸/۶
	۱۴۵۸۰/۸	۱۳۱۵۰/۰	۱۱۷۴۴/۸	۱۰۳۶۷/۵	۹۰۱۷/۹	۷۶۹۶/۱	۶۴۰۲/۰	۵۱۳۵/۷
۴	۱۶۱۹۹/۱	۱۴۷۶۶/۲	۱۳۳۶۱/۰	۱۱۹۸۳/۵	۱۰۶۳۳/۹	۹۳۱۲/۲	۸۰۱۸/۶	۶۷۵۳/۴
	۱۶۲۰۳/۳	۱۴۷۷۰/۴	۱۳۳۶۵/۳	۱۱۹۸۷/۹	۱۰۶۳۸/۳	۹۳۱۶/۴	۸۰۲۲/۲	۶۷۵۵/۸
	۱۶۲۰۳/۷	۱۴۷۷۰/۶	۱۳۳۶۵/۱	۱۱۹۸۷/۰	۱۰۶۳۶/۵	۹۳۱۳/۴	۸۰۱۷/۸	۶۷۴۹/۶
	۱۶۲۰۲/۶	۱۴۷۶۹/۹	۱۳۳۶۵/۰	۱۱۹۸۸/۱	۱۰۶۳۹/۰	۹۳۱۷/۷	۸۰۲۴/۳	۶۷۵۸/۷
	۱۶۲۰۳/۲	۱۴۷۷۰/۴	۱۳۳۶۵/۳	۱۱۹۸۷/۹	۱۰۶۳۸/۳	۹۳۱۶/۵	۸۰۲۲/۴	۶۷۵۶/۱

	۱۷۷۸۸/۴	۱۶۳۵۵/۵	۱۴۹۵۰/۳	۱۳۵۷۲/۸	۱۲۲۲۳/۱	۱۰۹۰۱/۵	۹۶۰۷/۹	۸۳۴۲/۷
	۱۷۷۹۵/۵	۱۶۳۶۲/۶	۱۴۹۵۷/۵	۱۳۵۸۰/۱	۱۲۲۳۰/۵	۱۰۹۰۸/۶	۹۶۱۴/۴	۸۳۴۸/۰
۵	۱۷۷۹۶/۲	۱۶۳۶۳/۲	۱۴۹۵۷/۶	۱۳۵۷۹/۶	۱۲۲۲۹/۰	۱۰۹۰۵/۹	۹۶۱۰/۳	۸۳۴۲/۱
	۱۷۷۹۴/۴	۱۶۳۶۱/۷	۱۴۹۵۶/۹	۱۳۵۸۰/۰	۱۲۲۳۰/۹	۱۰۹۰۹/۶	۹۶۱۶/۲	۸۳۵۰/۶
	۱۷۷۹۵/۴	۱۶۳۶۲/۶	۱۴۹۵۷/۵	۱۳۵۸۰/۱	۱۲۲۳۰/۵	۱۰۹۰۸/۷	۹۶۱۴/۶	۸۳۴۸/۳
	۱۹۳۴۸/۶	۱۷۹۱۵/۷	۱۶۵۱۰/۵	۱۵۱۳۳/۰	۱۳۷۸۳/۳	۱۲۴۶۱/۷	۱۱۱۶۸/۱	۹۹۰۲/۹
	۱۹۳۵۹/۴	۱۷۹۲۶/۶	۱۶۵۲۱/۵	۱۵۱۴۴/۱	۱۳۷۹۴/۴	۱۲۴۷۲/۵	۱۱۱۷۸/۴	۹۹۱۲/۰
۶	۱۹۳۶۰/۶	۱۷۹۲۷/۶	۱۵۶۲۲/۰	۱۵۱۴۴/۰	۱۳۷۹۳/۴	۱۲۴۷۰/۳	۱۱۱۷۴/۷	۹۹۰۶/۶
	۱۹۳۵۸/۰	۱۷۹۲۵/۳	۱۶۵۲۰/۵	۱۵۱۴۳/۵	۱۳۷۹۴/۴	۱۲۴۷۳/۲	۱۱۱۷۹/۸	۹۹۱۴/۲
	۱۹۳۵۹/۴	۱۷۹۲۶/۵	۱۶۵۲۱/۴	۱۵۱۴۴/۰	۱۳۷۹۴/۴	۱۲۴۷۲/۶	۱۱۱۷۸/۵	۹۹۱۲/۲
	۲۰۸۷۹/۷	۱۹۴۴۶/۸	۱۸۰۴۱/۶	۱۶۶۶۴/۱	۱۵۳۱۴/۴	۱۳۹۹۲/۷	۱۲۶۹۹/۲	۱۱۴۳۴/۰
	۲۰۸۹۵/۲	۱۹۴۶۲/۸	۱۸۰۵۷/۲	۱۶۶۷۹/۸	۱۵۳۳۰/۲	۱۴۰۰۸/۳	۱۲۷۱۴/۱	۱۱۴۴۷/۷
۷	۲۰۸۹۷/۰	۱۹۴۶۳/۹	۱۸۰۵۷/۳	۱۶۶۸۰/۳	۱۵۳۲۹/۷	۱۴۰۰۶/۶	۱۲۷۱۱/۰	۱۱۴۴۲/۹
	۲۰۸۹۳/۳	۱۹۴۶۰/۶	۱۸۰۵۵/۸	۱۶۶۷۸/۸	۱۵۳۲۹/۷	۱۴۰۰۸/۵	۱۲۷۱۵/۱	۱۱۴۴۹/۵
	۲۰۸۹۵/۰	۱۹۴۶۲/۲	۱۸۰۵/۱	۱۶۶۷۹/۷	۱۵۳۳۰/۱	۱۴۰۰۸/۳	۱۲۷۱۴/۲	۱۱۴۴۷/۹
	۲۲۳۸۱/۵	۲۰۹۴۸/۶	۱۹۵۴۳/۴	۱۸۱۶۵/۹	۱۶۸۱۶/۲	۱۵۴۹۴/۶	۱۴۲۰۱/۰	۱۲۹۳۵/۸
	۲۲۴۰۲/۷	۲۰۹۶۹/۸	۱۹۵۶۴/۷	۱۸۱۸۷/۳	۱۶۸۳۷/۷	۱۵۵۱۵/۸	۱۴۲۲۱/۶	۱۲۹۵۵/۲
۸	۲۲۴۰۵/۲	۲۰۹۷۲/۱	۱۹۵۶۶/۵	۱۸۱۸۸/۵	۱۶۸۳۷/۹	۱۵۵۱۴/۸	۱۴۲۱۹/۲	۱۲۹۵۱/۱
	۲۲۴۰۰/۳	۲۰۹۶۷/۶	۱۹۵۶۲/۸	۱۸۱۸۵/۸	۱۶۸۳۶/۷	۱۵۵۱۵/۵	۱۴۲۲۲/۱	۱۲۹۵۶/۵
	۲۲۴۰۲/۵	۲۰۹۶۹/۶	۱۹۵۶۴/۵	۱۸۱۸۷/۱	۱۶۸۳۷/۵	۱۵۵۱۵/۷	۱۴۲۲۱/۶	۱۲۹۵۵/۳

تایید حاصل از پتانسیل [RKR] ۵<sup>b</sup> نتایج حاصل از پتانسیل مورس<sup>c</sup> نتایج حاصل از پتانسیل فراست-موسولین<sup>d</sup> نتایج حاصل از پتانسیل وی-هوا<sup>e</sup> نتایج حاصل از پتانسیل هولبرت-هرشفلر

جدول ۹. اعداد موجی (cm<sup>-1</sup>) جهش الکترونی X<sup>2</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> - A<sup>2</sup>Π<sub>u</sub> یون مولکول N<sub>2</sub><sup>+</sup>

v'' v'	v''						
	۰	۱	۲	۳	۴	۵	۶
۰	۹۰۱۵/۶ <sup>a</sup>	۶۸۴۰/۷	۴۶۹۸/۴	۲۵۸۹/۰	۵۱۲/۵	-۱۵۳۰/۷	-۳۵۴۰/۵
	۹۰۱۵/۸ <sup>b</sup>	-۲۳۲۶/۳	-۴۴۶۸/۶	-۶۵۷۸/۴	-۸۶۵۵/۷	-۱۰۷/۵	-۱۲۷۱۲/۸
	۹۰۱۵/۷ <sup>c</sup>	۶۸۴۱/۰	۴۶۹۸/۷	۲۵۸۹/۰	۵۱۱/۷	-۱۵۳۳/۱	-۳۵۴۵/۶
	۹۰۱۵/۸ <sup>d</sup>	۶۸۴۱/۶	۴۷۰۰/۶	۲۵۹۲/۶	۵۱۷/۷	-۱۵۲۴/۱	-۳۵۳۳/۰
	۹۰۱۵/۹ <sup>e</sup>	۶۸۴۱/۱	۴۶۹۸/۹	۲۵۸۹/۲	۵۱۲/۰	-۱۵۳۲/۵	-۳۵۴۴/۵
۱	۱۰۸۸۹/۲	۸۷۱۴/۳	۶۵۷۲/۰	۴۴۶۲/۶	۲۳۸۶/۰	۳۴۲/۹	-۱۶۶/۹
	۱۷۲۱/۷	-۴۵۳/۰	-۲۵۹۵/۳	-۴۷۵/۱	-۶۷۸۲/۴	-۸۸۲۷/۲	-۱۰۸۳۹/۴
	۱۰۸۸۹/۱	۸۷۱۴/۳	۶۵۷۲/۱	۴۴۶۲/۳	۲۳۵۸/۰	۳۴۰/۱۹	-۱۶۷۲/۲
	۱۰۸۸۹/۱	۸۷۱۵/۰	۶۵۷۳/۹	۴۴۶۶/۰	۲۳۹۱/۰	۳۴۹/۱	-۱۶۵۹/۷
	۱۰۸۸۹/۲	۸۷۱۴/۵	۶۵۷۲/۲	۴۴۶۲/۵	۲۳۸۵/۳	۳۴۰/۸	-۱۶۷۱/۱

	۱۴۵۴۶/۳	۱۲۳۷۱/۳	۱۰۲۲۹/۱	۸۱۱۹/۶	۶۰۴۳/۲	۳۹۹۹/۹	۱۹۹۰/۱
	۵۳۷۷/۷	۳۲۰۲/۹	۱۰۶۰/۶	-۱۰۴۹/۱	-۳۱۲۶/۴	-۵۱۷۱/۲	-۷۱۸۳/۵
۲	۱۴۵۴۵/۳	۱۲۳۷/۰	۱۰۲۲۸/۳	۸۱۱۸/۶	۶۰۴۱/۳	۳۹۹۶/۴	۱۹۸۳/۹
	۱۴۵۴۵/۴	۱۲۳۷۱/۳	۱۰۲۳۰/۲	۸۱۲۲/۳	۶۰۴۷/۳	۴۰۰۵/۴	۱۹۹۶/۵
	۱۴۵۴۵/۲	۱۲۳۷۰/۵	۱۰۲۲۸/۲	۸۱۱۸/۵	۶۰۴۱/۳	۳۹۹۶/۸	۱۹۸۴/۸
	۱۶۳۲۹/۷	۱۴۱۵۴/۸	۱۲۰۱۲/۵	۹۹۰۳/۱	۷۸۲۶/۶	۵۷۸۳/۴	۳۷۷۳/۶
	۷۱۶۰/۳	۴۹۸۵/۵	۲۸۴۳/۳	۷۳۳/۵	-۱۳۴۳/۷	-۳۳۸۸/۵	-۵۴۰۰/۸
۳	۱۶۳۲۸/۳	۱۴۱۵۳/۵	۱۲۰۱۱/۳	۹۹۰۱/۵	۷۸۲۴/۲	۵۷۷۹/۳	۳۷۶۶/۹
	۱۶۳۲۸/۴	۱۴۱۵۴/۲	۱۲۰۱۳/۲	۹۹۰۵/۲	۷۸۳۰/۳	۵۷۸۸/۴	۳۷۷۹/۴
	۱۶۳۲۸/۹	۱۴۱۵۳/۱	۱۲۰۱۰/۹	۹۹۰۱/۲	۷۸۲۴/۵	۵۷۷۹/۴	۳۷۶۷/۴
	۱۸۰۸۳/۲	۱۵۹۰۸/۲	۱۳۷۶۶/۰	۱۱۶۵۶/۵	۹۵۸۰/۱	۷۵۳۶/۸	۵۵۲۷/۰
	۸۹۱۹/۸	۶۷۳۸/۰	۴۵۹۵/۷	۲۴۸۵/۹	۴۰۸/۶	-۱۶۳۶/۰	-۳۶۴۸/۳
۴	۱۸۰۸۱/۱	۱۵۹۰۶/۴	۱۳۷۶۴/۱	۱۱۶۵۴/۳	۹۵۷۷/۰	۷۵۳۲/۳	۵۵۱۹/۷
	۱۸۰۸۱/۱	۱۵۹۰۶/۹	۱۳۷۶۵/۹	۱۱۶۵۷/۹	۹۵۸۳/۰	۷۵۴۱/۱	۵۵۳۲/۲
	۱۸۰۸۰/۴	۱۵۹۰۵/۶	۱۳۷۶۳/۴	۱۱۶۵۳/۷	۹۵۷۶/۵	۷۵۳۱/۹	۵۵۱۹/۹
	۱۹۸۰۶/۶	۱۷۶۳۱/۷	۱۵۴۸۹/۴	۱۳۳۸۰/۵	۱۱۳۰۳/۵	۹۲۶۰/۲	۷۲۵۰/۴
	۱۰۶۳۵/۰	۸۴۶۰/۲	۶۳۱۷/۹	۴۲۰۸/۲	۲۱۳/۹	۸۶/۱	-۱۹۲۶/۱
۵	۱۹۸۰۳/۹	۱۷۶۲۹/۱	۱۵۴۸۶/۹	۱۳۳۷۷/۱۴	۱۱۲۹۹۹/۸	۹۲۵۴/۹	۷۲۴۶/۵
	۱۹۸۰۳/۷	۱۷۶۲۹/۵	۱۵۴۸۸/۵	۱۳۳۸۰/۵	۱۱۳۰۵/۶	۹۲۶۳/۷	۷۲۵۴/۸
	۱۹۸۰۲/۷	۱۷۶۲۷/۹	۱۵۴۸۵/۷	۱۳۳۷۵/۹	۱۱۲۹۸/۸	۹۲۵۴/۲	۷۲۴۲/۲
	۲۱۵۰۰/۰	۱۹۳۲۲۵/۱	۱۷۱۸۲/۸	۱۵۰۷۳/۴	۱۲۹۹۶/۹	۱۰۹۵۴/۷	۸۹۴۳/۹
	۱۲۳۲۷/۰	۱۰۱۵۲/۳	۸۰۱۰/۰۲	۵۹۰۰/۲	۳۸۲۲/۹	۱۷۷۸/۱	-۲۳۴/۱
۶	۲۱۴۹۶/۶	۱۹۳۲۱/۸	۱۷۱۷۹/۵	۱۵۰۶۹/۸	۱۲۹۹۹/۵	۱۰۹۴۷/۶	۸۹۳۵/۲
	۲۱۴۹۶/۱	۱۹۳۲۲/۰	۱۷۱۸۰/۹	۱۵۰۷۲/۹	۱۲۹۹۸/۳	۱۰۹۵۶/۱	۸۹۴۷/۹
	۲۱۴۶۴/۸	۱۹۳۲۰/۰	۱۷۱۷۷/۷	۱۲۰۶۸/۰	۱۲۹۹۰/۹	۱۰۹۴۶/۳	۸۹۳۴/۳
	۲۳۱۶۳/۴	۲۰۹۸۸/۵	۱۸۸۴۶/۲	۱۶۷۳۶/۸	۱۴۶۶۰/۳	۱۲۶۱۷/۱	۱۰۶۰۷/۳
	۱۳۹۸۸/۹	۱۱۸۱۴/۱	۹۶۷۱/۸	۷۵۶۲/۰	۵۴۸۴/۷	۳۴۳۹/۹	-۱۴۲۷/۷
۷	۲۳۱۵۹/۲	۲۰۹۸۴/۴	۱۸۸۴۲/۲	۱۶۷۳۲/۴	۱۴۶۵۵/۱	۱۲۶۱۰/۲	۱۰۵۹۷/۸
	۲۳۱۵۸/۴	۲۰۹۸۴/۲	۱۸۸۴۳/۲	۱۶۷۳۵/۲	۱۴۶۶۰/۳	۱۲۶۱۸/۴	۱۰۶۰۹/۵
	۲۳۱۵۶/۶	۲۰۹۸۱/۹	۱۸۸۳۹/۶	۱۶۷۲۹/۹	۱۴۶۵۲/۷	۱۲۶۰۸/۲	۱۰۵۹۶/۲

نتایج حاصل از پتانسیل [RKR] ۱۵<sup>b</sup> نتایج حاصل از پتانسیل مورس.<sup>c</sup> نتایج حاصل از پتانسیل فراست-موسولین<sup>d</sup> نتایج حاصل از پتانسیل وی-هوا.<sup>e</sup> نتایج حاصل از پتانسیل هولبرت-هرشفلر

جدول ۱۰. اعداد موجی ( $\text{cm}^{-1}$ ) جهش الکترونی  $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$  یون مولکول  $N_2^+$

$v'' \backslash v'$	۰	۱	۲	۳	۴	۵	۶	۷
۰	۲۵۵۶۴/۷ <sup>a</sup>	۲۳۳۸۹/۸	۲۱۲۴۷/۶	۱۹۱۳۸/۱	۱۷۰۶۱/۷	۱۵۰۱۸/۴	۱۳۰۰۸/۶	۱۱۰۳۲/۵
	۲۵۵۶۶/۴ <sup>b</sup>	۲۳۳۹۱/۶	۲۱۲۴۹/۳	۱۹۱۳۹/۵	۱۷۰۶۲/۲	۱۵۰۱۷/۴	۱۳۰۰۵/۲	۱۱۰۲۵/۴
•	۲۵۵۶۶/۴ <sup>c</sup>	۲۳۳۹۱/۷	۲۱۲۴۹/۴	۱۹۱۳۹/۷	۱۷۰۶۲/۴	۱۵۰۱۷/۵	۱۳۰۰۵/۰	۱۱۰۲۵/۰
	۲۵۵۶۶/۳ <sup>d</sup>	۲۳۳۹۲/۱	۲۱۲۵۱/۱	۱۹۱۴۳/۷	۱۷۰۶۸/۲	۱۵۰۲۶/۳	۱۳۰۱۷/۴	۱۱۰۴۱/۴
	۲۵۵۶۵/۱ <sup>e</sup>	۲۳۳۹۰/۳	۲۱۲۴۸/۱	۱۹۱۳۸/۴	۱۷۰۶۱/۲	۱۵۰۱۶/۶	۱۳۰۰۴/۶	۱۱۰۲۵/۲
۱	۲۷۹۳۶/۳	۲۵۷۶۱/۳	۲۳۶۱۹/۱	۲۱۵۰۹/۶	۱۹۴۳۳/۲	۱۷۳۸۹/۹	۱۵۳۸۰/۱	۱۳۴۰۴/۰
	۲۷۹۴۰/۱	۲۵۷۶۵/۳	۲۳۶۲۳/۰	۲۱۵۱۳/۲	۱۹۴۳۵/۹	۱۷۳۹۱/۱	۱۵۳۷۸/۸	۱۳۳۹۹/۱
	۲۷۹۴۱/۰	۲۵۷۵۹/۳	۲۳۶۲۴/۰	۲۱۵۱۴/۳	۱۹۴۳۷/۰	۱۷۳۹۲/۱	۱۵۳۷۹/۶	۱۳۳۹۹/۶
	۲۷۹۳۳/۳	۲۵۷۵۹/۲	۲۳۶۱۸/۱	۲۱۵۱۰/۲	۱۹۴۳۵/۲	۱۷۳۹۳/۳	۱۵۳۸۴/۴	۱۳۴۰۸/۵
	۲۷۹۳۸/۷	۲۵۷۶۴/۰	۲۳۶۲۱/۷	۲۱۵۱۲/۰	۱۹۴۳۴/۸	۱۷۳۹۰/۳	۱۵۳۷۸/۳	۱۳۳۹۸/۹
۲	۳۰۲۵۴/۵	۲۸۰۷۹/۵	۲۵۹۳۷/۳	۲۳۸۲۷/۹	۲۱۷۵۱/۴	۱۹۷۰۸/۱	۱۷۶۹۸/۳	۱۵۷۲۲/۳
	۳۰۲۶۵/۶	۲۸۰۹۰/۸	۲۵۹۴۸/۵	۲۳۸۳۸/۷	۲۱۷۶۱/۴	۱۹۷۱۶/۶	۱۷۷۰۴/۴	۱۵۷۲۴/۶
	۳۰۵۶۸/۴	۲۸۰۹۳/۶	۲۵۹۵۱/۴	۲۳۸۴۱/۶	۲۱۷۶۴/۳	۱۹۷۱۹/۴	۱۷۷۰۷/۰	۱۵۷۲۶/۹
	۳۰۲۴۶/۰	۲۸۰۷۱/۹	۲۵۹۳۰/۸	۲۳۸۲۲/۸	۲۱۷۴۷/۹	۱۹۷۰۶/۰	۱۷۶۹۷/۱	۱۵۷۲۱/۲
	۳۰۲۶۴/۰	۲۸۰۸۹/۳	۲۵۹۴۷/۰	۲۳۸۳۷/۳	۲۱۷۶۰/۱	۱۹۷۱۵/۶	۱۷۷۰۳/۶	۱۵۷۲۴/۲
۳	۳۲۵۱۴/۱	۳۰۳۳۹/۲	۲۸۱۹۷/۰	۲۶۰۸۷/۵	۲۴۰۱۱/۰	۲۱۹۶۷/۸	۱۹۹۵۸/۰	۱۷۹۸۱/۹
	۳۲۵۴۲/۹	۳۰۳۶۸/۱	۲۸۲۲۵/۸	۲۶۱۱۶/۱	۲۴۰۳۸/۸	۲۱۹۹۴/۰	۱۹۹۸۱/۷	۱۸۰۰۱/۹
	۳۲۵۴۸/۵	۳۰۳۳۷/۷	۲۸۲۳۱/۴	۲۶۱۲۱/۷	۲۴۰۴۴/۴	۲۱۹۹۹/۵	۱۹۹۸۷/۱	۱۸۰۰۷/۰
	۳۲۵۰۴/۸	۳۰۳۳۰/۷	۲۸۱۸۹/۶	۲۶۰۸۱/۶	۲۴۰۰۶/۷	۲۱۹۶۴/۸	۱۹۹۵۵/۹	۱۷۹۷۹/۹
	۳۲۵۴۰/۹	۳۰۳۶۶/۱	۲۸۲۲۳/۹	۲۶۱۱۴/۱	۲۴۰۳۷/۰	۲۱۹۹۲/۴	۱۹۹۸۰/۴	۱۸۰۰۱/۰
۴	۳۴۷۰۸/۵	۳۲۵۳۳/۶	۳۰۳۹۱/۳	۲۸۲۸۱/۹	۲۶۲۰۵/۴	۲۴۱۶۲/۲	۲۲۱۵۲/۴	۲۰۱۷۶/۳
	۳۴۷۷۴/۱	۳۲۵۹۷/۳	۳۰۴۵۵/۰	۲۸۳۴۵/۲	۲۶۲۶۸/۰	۲۴۲۲۳/۲	۲۲۲۱۰/۹	۲۰۲۳۱/۱
	۳۴۷۸۱/۳	۳۲۶۰۶/۵	۳۰۳۶۴/۲	۲۸۳۵۴/۵	۲۶۲۷۷/۲	۲۴۲۳۲/۳	۲۲۲۱۹/۹	۲۰۲۳۹/۸
	۳۴۷۱۰/۱	۳۲۵۳۶/۰	۳۰۳۹۴/۹	۲۸۲۸۷/۰	۲۶۲۱۲/۰	۲۴۱۷۰/۱	۲۲۱۶۱/۲	۲۰۱۸۵/۳
	۳۴۷۶۹/۲	۳۲۵۹۴/۴	۳۰۴۵۲/۲	۲۸۳۴۲/۵	۲۶۲۶۵/۳	۲۴۲۲۰/۷	۲۲۲۰۸/۷	۲۰۲۲۹/۳
۵	۳۶۸۲۹/۵	۳۴۶۵۴/۶	۳۲۵۱۲/۴	۳۰۴۰۲/۹	۲۸۳۲۶/۴	۲۶۲۸۳/۲	۲۴۲۷۳/۴	۲۲۲۹۷/۳
	۳۶۹۵۳/۱	۳۴۷۷۸/۳	۳۲۶۳۶/۰	۳۰۵۲۶/۳	۲۸۴۴۹/۰	۲۶۴۰۴/۲	۲۴۳۹۱/۹	۲۲۴۱۲/۱
	۳۶۹۶۶/۸	۳۴۷۸۸/۳	۳۲۶۴۹/۷	۳۰۵۴۰/۰	۲۸۴۶۲/۷	۲۶۴۱۷/۸	۲۴۴۰۵/۴	۲۲۴۲۵/۳
	۳۶۸۶۲/۴	۳۴۶۸۸/۳	۳۲۵۴۷/۲	۳۰۴۳۹/۳	۲۸۳۶۴/۴	۲۶۳۲۲/۵	۲۴۳۱۳/۵	۲۲۳۳۷/۶
	۳۶۹۴۸/۹	۳۴۷۷۴/۱	۳۲۶۳۱/۹	۳۰۵۲۲/۱	۲۸۴۴۵/۰	۲۶۴۰۰/۴	۲۴۳۸۸/۴	۲۲۴۰۹/۰
۶	۳۸۸۶۷/۸	۳۶۶۹۲/۹	۳۴۵۵۰/۶	۳۲۴۴۱/۲	۳۰۳۶۴/۷	۲۸۳۲۱/۵	۲۶۳۱۱/۷	۲۴۳۳۵/۶



	۳۹۰۸۶/۰	۳۶۹۱۱/۲	۳۴۷۶۸/۹	۳۲۶۵۹/۱	۳۰۵۸۱/۸	۲۸۵۳۷/۰	۲۶۵۲۴/۷	۲۴۵۴۵/۰
	۳۹۱۰۵/۰	۳۶۹۳۰/۲	۳۴۷۸۷/۹	۳۲۶۷۸/۲	۳۰۶۰۰/۹	۲۸۵۵۶/۰	۲۶۳۴۳/۶	۲۴۵۶۳/۵
	۳۸۹۶۲/۲	۳۶۷۸۸/۰	۳۴۶۶۷/۰	۳۲۵۳۹/۰	۳۰۶۶۴/۱	۲۸۴۲۲/۲	۲۶۴۱۳/۳	۲۴۴۳۷/۳
	۳۹۳۷۹/۸	۳۶۹۰۵/۱	۳۴۷۶۲/۸	۳۲۶۵۳/۱	۳۰۵۷۵/۹	۲۸۵۳۱/۴	۲۶۵۱۹/۴	۲۴۵۴۰/۰
	۴۰۸۱۲/۹	۳۸۶۳۷/۹	۳۶۴۹۵/۷	۳۴۳۸۶/۳	۳۲۳۰۹/۸	۳۰۲۶۶/۵	۲۸۲۵۶/۷	۲۶۲۸۰/۷
	۴۱۱۷۰/۶	۳۸۹۹۵/۸	۳۶۸۵۳/۶	۳۴۷۴۳/۸	۳۲۶۶۶/۵	۳۰۶۲۱/۷	۲۸۶۰۹/۴	۲۶۶۲۹/۶
Y	۴۱۱۹۵/۸	۳۹۰۲۱/۱	۳۶۸۷۸/۸	۳۴۷۶۹/۰	۳۲۶۹۱/۷	۳۰۶۶۹/۹	۲۸۶۳۴/۴	۲۶۶۵۴/۴
	۴۱۰۰۹/۷	۳۸۸۳۵/۶	۳۶۶۹۴/۵	۳۴۵۸۶/۶	۳۲۵۱۱/۷	۳۰۴۶۹/۸	۲۸۴۶۰/۸	۲۶۶۸۴/۹
	۴۱۱۶۲/۰	۳۸۹۸۷/۲	۳۶۸۴۵/۰	۳۴۷۳۵/۲	۳۲۶۵۸/۱	۳۰۶۱۳/۵	۲۸۶۰۱/۵	۲۶۶۲۲/۱
	۴۲۶۵۳/۳	۴۰۴۷۸/۳	۳۸۳۳۶/۱	۳۶۲۲۶/۷	۳۴۱۵۰/۲	۳۲۱۰۶/۹	۳۰۰۹۷/۱	۲۸۱۲۱/۱
	۴۲۲۰۷/۱	۴۱۰۳۲/۳	۳۸۸۹۰/۱	۳۶۷۸۰/۳	۳۴۷۰۳/۰	۳۲۶۵۸/۲	۳۰۶۴۵/۹	۲۸۶۶۶/۱
A	۴۳۲۳۹/۴	۴۱۰۶۴/۶	۳۸۹۲۲/۳	۳۶۸۱۲/۶	۳۴۷۳۵/۳	۳۲۶۹۰/۴	۳۰۶۷۸/۰	۲۸۶۹۷/۹
	۴۳۰۰۵/۶	۴۰۸۳۱/۴	۳۸۶۹۰/۴	۳۶۵۸۲/۴	۳۴۵۰۷/۵	۳۲۴۶۵/۶	۳۰۴۵۶/۷	۲۸۴۸۰/۷
	۴۳۱۹۵/۳	۴۱۰۲۰/۵	۳۸۸۷۸/۲	۳۶۷۶۸/۵	۳۴۶۹۱/۴	۳۲۶۴۶/۸	۳۰۶۳۴/۸	۲۸۶۵۵/۴

نتایج حاصل از پتانسیل RKR [۱۵] <sup>b</sup> نتایج حاصل از پتانسیل مورس. <sup>c</sup> نتایج حاصل از پتانسیل فراست-موسولین <sup>d</sup> نتایج حاصل از پتانسیل وی-هوا. <sup>e</sup> نتایج حاصل از پتانسیل هولبرت-هرشفلر

جدول ۱۱. اعداد موجی ( $\text{cm}^{-1}$ ) جهش الکترونی  $A^2\Pi_u B^2\Sigma_u^+$  - یون مولکول  $N_2^+$

$\frac{v''}{v'}$	۰	۱	۲	۳	۴	۵	۶	۷
a	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
b	۱۶۵۵۰/۶	۱۴۶۷۷/۳	۱۲۸۳۴/۲	۱۱۰۲۱/۳	۹۲۳۸/۶	۷۴۸۶/۱	۵۷۶۳/۹	۴۰۷۱/۹
c	۱۶۵۵۰/۶	۱۴۶۷۷/۳	۱۲۸۳۴/۱	۱۱۰۲۱/۱	۹۲۳۸/۱	۷۴۸۵/۳	۵۷۶۲/۵	۴۰۶۹/۸
d	۱۶۵۵۰/۵	۱۴۶۷۷/۱	۱۲۸۳۳/۹	۱۱۰۲۰/۸	۹۲۳۷/۹	۷۴۸۵/۱	۵۷۶۲/۵	۴۰۷۰/۱
e	۱۶۵۴۹/۱	۱۴۶۷۵/۸	۱۲۸۳۳/۷	۱۱۰۱۹/۸	۹۲۳۷/۱	۷۴۸۴/۶	۵۷۶۲/۴	۴۰۷۰/۳
	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
۱	۱۸۹۲۴/۳	۱۷۰۵۰/۹	۱۵۲۰۷/۸	۱۳۳۹۵/۰	۱۱۶۱۲/۳	۹۸۵۹/۸	۸۱۳۷/۶	۶۴۴۵/۶
	۱۸۹۲۵/۲	۱۷۰۵۱/۹	۱۵۲۰۸/۷	۱۳۳۹۵/۷	۱۱۶۱۲/۷	۹۸۵۹/۹	۸۱۳۷/۱	۶۴۴۴/۴
	۱۸۹۱۷/۵	۱۷۰۴۴/۱	۱۵۲۰۰/۹	۱۳۳۸۷/۸	۱۱۶۰۴/۹	۹۸۵۲/۲	۸۱۲۹/۶	۶۴۳۷/۲
	۱۸۹۲۲/۸	۱۷۰۴۹/۴	۱۵۲۰۶/۳	۱۳۳۹۳/۴	۱۱۶۱۰/۸	۹۸۵۸/۳	۸۱۳۶/۰	۶۴۴۳/۹
	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
۲	۲۱۲۴۹/۸	۱۹۳۷۶/۵	۱۷۵۳۳/۴	۱۵۷۲۰/۵	۱۳۹۳۷/۸	۱۲۱۸۵/۳	۱۰۴۶۳/۱	۸۷۷۱/۱
	۲۱۲۵۲/۶	۱۹۳۷۹/۲	۱۷۵۳۶/۰	۱۵۷۲۳/۰	۱۳۹۴۰/۱	۱۲۱۸۷/۲	۱۰۴۶۴/۵	۸۷۷۱/۸
	۲۱۲۳۰/۲	۱۹۳۵۶/۸	۱۷۵۱۳/۶	۱۵۷۰۰/۵	۱۳۹۷۱/۶	۱۲۱۶۴/۹	۱۰۴۴۲/۳	۸۷۴۹/۹
	۲۱۲۴۸/۱	۱۹۳۷۴/۷	۱۷۵۳۱/۶	۱۵۷۱۸/۷	۱۳۹۳۶/۱	۱۲۱۸۳/۶	۱۰۴۶۱/۳	۸۷۶۹/۲

۳	۲۳۵۲۷/۱	۲۱۶۵۳/۸	۱۹۸۱۰/۷	۱۷۹۹۷/۸	۱۶۲۱۵/۱	۱۴۴۶۲/۷	۱۲۷۴۰/۵	۱۱۰۴۸/۴
	۲۳۵۳۲/۷	۲۱۶۵۹/۳	۱۹۸۱۶/۱	۱۸۰۰۳/۱	۱۶۲۲۰/۱	۱۴۴۶۷/۳	۱۲۷۴۴/۵	۱۱۰۵۱/۹
	۲۳۴۸۹/۰	۲۱۶۱۵/۶	۱۹۷۷۲/۴	۱۷۹۵۹/۳	۱۶۱۷۶/۴	۱۴۴۲۳/۷	۱۲۷۰۱/۱	۱۱۰۰۸/۶
	۲۳۵۲۴/۹	۲۱۶۵۱/۶	۱۹۸۰۸/۵	۱۷۹۹۵/۶	۱۶۲۱۲/۹	۱۴۴۶۰/۴	۱۲۷۳۸/۲	۱۱۰۴۶/۱
۴	۲۵۷۵۶/۳	۲۳۸۸۳/۰	۲۲۰۳۹/۹	۲۰۲۲۷/۰	۱۸۴۴۴/۳	۱۶۶۹۱/۹	۱۴۹۶۹/۶	۱۳۲۷۷/۶
	۲۵۷۶۵/۵	۲۳۸۹۲/۱	۲۲۰۴۸/۹	۲۰۲۳۵/۹	۱۸۴۵۲/۹	۱۶۷۰۰/۱	۱۴۹۷۷/۳	۱۳۲۸۴/۶
	۲۵۶۹۴/۳	۲۳۸۲۱/۰	۲۱۹۷۷/۷	۲۰۱۶۴/۷	۱۸۳۸۱/۷	۱۶۲۲۹/۰	۱۴۹۰۶/۴	۱۳۲۱۴/۰
	۲۵۷۵۳/۲	۲۳۸۷۹/۹	۲۲۰۳۶/۸	۲۰۲۲۳/۹	۱۸۴۴۱/۲	۱۶۶۸۸/۸	۱۴۹۶۶/۵	۱۳۲۷۴/۴
۵	۲۷۷۳۶/۰	۲۶۰۶۴/۰	۲۴۲۲۰/۹	۲۲۴۰۸/۰	۲۰۶۲۵/۳	۱۸۸۷۲/۹	۱۷۱۵۰/۶	۱۵۴۵۸/۶
	۲۷۹۳۷/۳	۲۶۰۷۷/۶	۲۴۲۳۴/۴	۲۲۴۲۱/۴	۲۰۶۳۸/۴	۱۸۸۸۵/۶	۱۷۱۶۲/۸	۱۵۴۷۰/۲
	۲۷۹۵۱/۰	۲۵۹۷۳/۳	۲۴۱۳۰/۰	۲۲۳۱۷/۰	۲۰۵۳۴/۰	۱۸۷۸۱/۳	۱۷۰۵۸/۷	۱۵۳۶۶/۳
	۲۷۹۳۲/۹	۲۶۰۵۹/۶	۲۴۲۱۶/۵	۲۲۴۰۳/۶	۲۰۶۲۰/۹	۱۸۸۶۸/۴	۱۷۱۴۶/۲	۱۵۴۵۴/۱
۶	۳۰۰۷۰/۲	۲۸۱۹۶/۸	۲۶۳۵۳/۷	۲۴۵۴۰/۹	۲۲۷۵۸/۲	۲۱۰۰۵/۷	۱۹۲۸۳/۵	۱۷۵۹۱/۵
	۳۰۰۸۹/۲	۲۸۲۱۵/۸	۲۶۳۷۲/۶	۲۴۵۵۹/۶	۲۲۷۷۶/۶	۲۱۰۲۳/۸	۱۹۳۰۱/۰	۱۷۶۰۸/۳
	۲۹۹۴۶/۴	۲۸۰۷۳/۰	۲۶۲۲۹/۸	۲۴۴۱۶/۷	۲۲۶۳۳/۸	۲۰۸۸۱/۰	۱۹۱۵۸/۴	۱۷۴۶۶/۰
	۳۰۰۶۳/۹	۲۸۱۹۰/۶	۲۶۳۴۷/۴	۲۴۵۳۴/۶	۲۲۷۵۱/۹	۲۰۹۹۹/۴	۱۹۲۷۷/۱	۱۷۵۸۵/۰
۷	۳۲۱۵۴/۸	۳۰۲۸۱/۵	۲۸۴۳۸/۴	۲۶۶۲۵/۵	۲۴۸۴۲/۹	۲۳۰۹۰/۴	۲۱۳۶۸/۲	۱۹۶۷۶/۱
	۳۲۱۸۰/۰	۳۰۳۰۶/۷	۲۸۴۶۳/۵	۲۶۶۵۰/۴	۲۴۸۶۷/۵	۲۳۱۱۴/۷	۲۱۳۹۱/۹	۱۹۶۹۹/۲
	۳۱۹۹۳/۹	۳۰۱۲۰/۶	۲۸۲۷۷/۳	۲۶۴۶۴/۳	۲۴۶۸۱/۳	۲۲۹۲۸/۶	۲۱۲۰۶/۰	۱۹۵۱۳/۶
	۳۲۱۴۶/۰	۳۰۲۷۲/۷	۲۸۴۲۹/۶	۲۶۶۱۶/۷	۲۴۸۳۴/۰	۲۳۰۸۱/۵	۲۱۳۵۹/۳	۱۹۶۶۷/۲
۸	۳۴۱۹۱/۳	۳۲۳۱۸/۰	۳۰۴۷۷/۹	۲۸۶۶۲/۰	۲۶۸۷۹/۴	۲۵۱۲۶/۹	۲۳۶۰۴/۷	۲۱۷۱۲/۶
	۳۴۲۲۳/۶	۳۲۳۵۰/۲	۳۰۵۰۷/۰	۲۸۶۹۴/۰	۲۶۹۱۱/۰	۲۵۱۵۸/۲	۲۳۴۳۵/۴	۲۱۷۴۲/۷
	۳۳۹۸۹/۸	۳۲۱۱۶/۴	۳۰۲۷۳/۲	۲۸۴۶۰/۱	۲۶۶۷۷/۲	۲۴۹۲۴/۴	۲۳۲۰۱/۸	۲۱۵۰۹/۴
	۳۴۱۷۹/۳	۳۲۳۰۶/۰	۳۰۴۶۲/۹	۲۸۶۵۰/۰	۲۶۸۶۷/۳	۲۵۱۱۴/۸	۲۳۳۹۲/۵	۲۱۷۰۰/۴

<sup>a</sup> نتایج حاصل از پتانسیل RKR [۱۵] <sup>b</sup> نتایج حاصل از پتانسیل مورس. <sup>c</sup> نتایج حاصل از پتانسیل فراست-موسولین <sup>d</sup> نتایج حاصل از پتانسیل وی-هوا. <sup>e</sup> نتایج حاصل از پتانسیل هولبرت-هرشفلر

مقادیر اعداد موجی محاسبه شده برای جهش‌های مورد بررسی در هر دو مولکول  $N_2$  و  $N_2^+$  در جداول ۸-۱۱ نشان می‌دهند که در اعداد کوانتومی پایین اختلاف محسوسی میان نتایج حاصل از پتانسیل‌های تجربی موریس، فراست-موسولین، وی-هوا، و هولبرت-هرشفلر با نتایج روش RKR وجود ندارد، اما با افزایش اعداد کوانتومی به تدریج بر میزان انحراف نتایج افزوده می‌شود. با تعیین درصد انحراف اعداد موجی محاسبه شده با استفاده از چهار پتانسیل فوق با داده‌های RKR می‌توان دریافت که برای انتقال الکترونی  $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$  در مولکول  $N_2$  نتایج پتانسیل وی-هوا با دقت بیشتری ارتعاشات را توصیف می‌کند و پتانسیل‌های هولبرت-هرشفلر، موریس، و فراست-موسولین در رده‌های بعدی جای می‌گیرند. برای انتقال الکترونی  $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$  و  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$  در یون مولکولی  $N_2^+$  ترتیب توافق پتانسیل‌های تجربی با پتانسیل واقعی RKR به صورت زیر تغییر می‌کند:

موریس > هولبرت-هرشفلر > فراست-موسولین > وی-هوا

اگر چه در برخی مقادیر  $v'$  و  $v''$ ، جابه‌جایی‌هایی از ترتیب فوق صورت می‌گیرد. نتایج حاصل از پتانسیل فراست-موسولین در جهش  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$  به ویژه در اعداد کوانتومی ارتعاشی بالا، اعداد موجی قابل قبولی نمی‌دهد. همچنین، مقادیر اعداد موجی ارتعاشی با پتانسیل واقعی RKR در انتقال  $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$  یون مولکولی  $N_2^+$  در مرجع ۵ گزارش نشده است، لذا در این جهش با قاطعیت نمی‌توان در مورد دقت پتانسیل‌های تجربی داوری کرد. اعداد موجی برخی نوارها در انتقال الکترونی  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$  یون مولکولی  $N_2^+$  (جدول ۹) دارای علامت منفی هستند. دلیل این امر معکوس شدن انتقال است. نوار (۶، ۰) در انتقال  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$  در (جدول ۹) مثالی از این مورد است. در واقع به دلیل آنکه انرژی تراز شش ارتعاشی در حالت الکترونی  $X^2\Sigma_g^+$  بیش از انرژی تراز صفر ارتعاشی در حالت الکترونی  $A^2\Pi_u$  است، انتقال از حالت  $X^2\Sigma_g^+$  به حالت  $A^2\Pi_u$  صورت می‌گیرد. چنین مواردی، نوارهای معکوس نامیده می‌شوند.

### ۳-۴. ضرایب فرانک-کوندون

شدت خطوط طیفی در یک انتقال ارتعاشی-الکترونی به وسیله ضرایب فرانک-کوندون کنترل می‌شود که به صورت مربع انتگرال‌های همپوشانی ارتعاشی بین توابع موج ارتعاشی حالت‌های الکترونی بالاتر و پایین‌تر تعریف می‌شوند [۱۰ و ۱۳ و ۲۵]. دقیق‌ترین مقادیر ضرایب فرانک-کوندون با استفاده از منحنی‌های پتانسیل RKR به دست می‌آیند. در این بخش ضرایب فرانک-کوندون با استفاده از توابع موج غیر کاهیده در کد Level با پتانسیل‌های تجربی مورد نظر محاسبه و نتایج در جداول ۱۲-۱۵ ذکر شده است. این نتایج با داده‌های حاصل از پتانسیل واقعی RKR (مرجع ۵) مقایسه شده‌اند. اعداد اول، دوم، سوم، چهارم، و پنجم در هر ستون از خانه‌های این جداول، به ترتیب نتایج حاصل از پتانسیل‌های RKR، موریس، فراست-موسولین، وی-هوا، و هولبرت-هرشفلر هستند. شایان ذکر است که در مرجع ۵ ضرایب فرانک-کوندون برای انتقال الکترونی  $B^2\Sigma_u^+ - A^2\Pi_u$  مولکول  $N_2^+$  با استفاده از پتانسیل RKR گزارش نشده است، لذا در این مورد از علامت خط چین در جدول استفاده شده است.

جدول ۱۲. ضرایب فرانتک- کوندون برای جهش الکترونی  $A^3\Sigma_u^+ - B^3\Pi_g$  مولکول  $N_2$ 

$v''$ $u'$	۰	۱	۲	۳	۴	۵	۶
۰	۰/۴۰۱۰۰ <sup>a</sup>	۰/۳۳۰۰۰	۰/۱۶۶۰۰	۰/۰۶۷۲۰	۰/۰۲۴۱۰	۰/۰۰۸۰۹	۰/۰۰۲۶۲
	۰/۴۰۰۶۸ <sup>b</sup>	۰/۳۳۰۱۵	۰/۱۶۶۲۹	۰/۰۶۷۰۵	۰/۰۲۴۰۰	۰/۰۰۸۰۳	۰/۰۰۲۵۹
	۰/۴۰۰۸۹ <sup>c</sup>	۰/۳۲۹۶۷	۰/۱۶۶۱۱	۰/۰۶۷۱۶	۰/۰۲۴۱۵	۰/۰۰۸۱۳	۰/۰۰۲۶۴
	۰/۴۰۰۴۹ <sup>d</sup>	۰/۳۲۹۸۳	۰/۱۶۶۲۹	۰/۰۶۷۲۲	۰/۰۲۴۱۵	۰/۰۰۸۱۲	۰/۰۰۲۶۳
	۰/۴۰۰۹۱ <sup>e</sup>	۰/۳۳۰۴۹	۰/۱۶۶۲۸	۰/۰۶۶۸۷	۰/۰۲۳۸۳	۰/۰۰۷۹۲	۰/۰۰۲۵۶
۱	۰/۴۰۰۰۰	۰/۰۰۲۸۷	۰/۱۵۹۰۰	۰/۱۹۶۰۰	۰/۱۳۰۰۰	۰/۰۰۶۵۷	۰/۰۰۲۸۶۰
	۰/۳۹۹۲۶	۰/۰۰۲۸۱	۰/۱۵۹۰۰	۰/۱۹۶۴۸	۰/۱۳۰۳۱	۰/۰۰۶۵۶۲	۰/۰۰۲۸۴۶
	۰/۳۹۹۹۳	۰/۰۰۲۸۷	۰/۱۵۸۶۵	۰/۱۹۵۷۸	۰/۱۳۰۰۲	۰/۰۰۶۵۷۰	۰/۰۰۲۸۶۵
	۰/۳۹۹۴۹	۰/۰۰۲۷۶	۰/۱۵۸۳۵	۰/۱۹۶۰۰	۰/۱۳۰۳۴	۰/۰۰۶۵۹۰	۰/۰۰۲۸۷۴
	۰/۳۹۹۰۱	۰/۰۰۲۸۶	۰/۱۵۹۷۱	۰/۱۹۷۰۰	۰/۱۳۰۲۸	۰/۰۰۶۵۳۳	۰/۰۰۲۸۱۷
۲	۰/۱۶۱۰۰	۰/۲۷۶۰۰	۰/۰۶۹۰۰	۰/۰۲۱۹۰	۰/۱۲۴۰۰	۰/۱۴۳۰۰	۰/۱۰۱۱۰
	۰/۱۶۱۳۴	۰/۲۷۴۱۷	۰/۰۶۹۴۳	۰/۰۲۱۸۴	۰/۱۲۴۵۷	۰/۱۴۳۰۳	۰/۱۰۱۱۸
	۰/۱۶۰۹۷	۰/۲۷۵۸۵	۰/۰۶۹۰۸	۰/۰۲۱۸۶	۰/۱۲۳۹۵	۰/۱۴۲۳۰	۰/۱۰۰۸۹
	۰/۱۶۱۳۶	۰/۲۷۴۳۰	۰/۰۶۹۷۵	۰/۰۲۱۴۴	۰/۱۲۳۶۳	۰/۱۴۲۵۳	۰/۱۰۱۲۸
	۰/۱۶۱۳۱	۰/۲۷۴۰۵	۰/۰۶۹۰۶	۰/۰۲۲۲۷	۰/۱۲۵۵۸	۰/۱۴۳۵۷	۰/۱۰۱۰۹
۳	۰/۰۳۳۹۰	۰/۲۷۷۰۰	۰/۰۹۶۱۰	۰/۱۵۲۰۰	۰/۰۰۵۱۹	۰/۰۴۲۲۰	۰/۱۰۷۰۰
	۰/۰۳۴۲۷	۰/۲۷۶۹۳	۰/۰۹۴۴۴	۰/۱۵۲۴۴	۰/۰۰۵۳۵	۰/۰۴۲۱۳	۰/۱۰۷۹۸
	۰/۰۳۳۸۸	۰/۲۷۷۰۹	۰/۰۹۶۱۰	۰/۱۵۲۲۹	۰/۰۰۵۲۵	۰/۰۴۱۹۵	۰/۱۰۷۲۳
	۰/۰۳۴۲۲	۰/۲۷۷۱۹	۰/۰۹۴۲۷	۰/۱۵۲۷۵	۰/۰۰۵۵۸	۰/۰۴۱۲۸	۰/۱۰۶۹۴
	۰/۰۳۴۳۰	۰/۲۷۶۶۸	۰/۰۹۴۶۳	۰/۱۵۲۰۵	۰/۰۰۵۰۹	۰/۰۴۳۰۵	۰/۱۰۹۱۱
۴	۰/۰۰۴۰۴	۰/۰۹۶۷۰	۰/۲۹۸۰۰	۰/۰۰۷۶۰	۰/۱۵۱۰۰	۰/۰۵۱۲۰	۰/۰۰۲۱۹
	۰/۰۰۴۱۴	۰/۰۹۷۶۰	۰/۲۹۶۰۶	۰/۰۰۶۹۲	۰/۱۵۱۰۱	۰/۰۵۱۹۷	۰/۰۰۲۱۱
	۰/۰۰۴۰۴	۰/۰۹۶۶۷	۰/۲۹۷۵۸	۰/۰۰۷۵۱	۰/۱۵۱۶۶	۰/۰۵۱۵۶	۰/۰۰۲۱۳
	۰/۰۰۴۱۳	۰/۰۹۷۶۱	۰/۲۹۶۳۵	۰/۰۰۶۷۹	۰/۱۵۰۸۷	۰/۰۵۲۶۳	۰/۰۰۲۱۸
	۰/۰۰۴۱۵	۰/۰۹۷۵۸	۰/۲۹۵۷۰	۰/۰۰۷۰۶	۰/۱۵۱۰۹	۰/۰۵۱۲۵	۰/۰۰۲۳۷
۵	۰/۰۰۰۲۷	۰/۰۱۶۲۰	۰/۱۶۹۰۰	۰/۲۴۴۰۰	۰/۰۱۰۴۰	۰/۰۰۹۵۵	۰/۰۰۹۴۸۰
	۰/۰۰۰۲۹	۰/۰۱۶۷۲	۰/۱۶۹۸۰	۰/۲۳۹۹۳	۰/۰۱۱۴۵	۰/۰۰۹۴۳۰	۰/۰۰۹۵۶۷
	۰/۰۰۰۲۷	۰/۰۱۶۳۱	۰/۱۶۸۶۳	۰/۲۴۲۹۲	۰/۰۱۰۶۹	۰/۰۰۹۵۶۴	۰/۰۰۹۵۳۲
	۰/۰۰۰۲۸	۰/۰۱۶۷۰	۰/۱۶۹۹۸	۰/۲۳۹۹۶	۰/۰۱۱۷۱	۰/۰۰۹۳۷۰	۰/۰۰۹۶۱۸
	۰/۰۰۰۲۹	۰/۰۱۶۷۳	۰/۱۶۹۶۳	۰/۲۳۹۹۳	۰/۰۱۱۱۹	۰/۰۰۹۴۸۷	۰/۰۰۹۴۸۷

	۰/۰۰۰۰۱	۰/۰۰۱۴۳	۰/۰۳۸۹۰	۰/۲۳۰۰۰	۰/۱۵۷۰۰	۰/۰۵۸۱۰	۰/۰۳۵۵۰
	۰/۰۰۰۰۱	۰/۰۰۱۵۲	۰/۰۴۰۰۴	۰/۲۳۰۱۰	۰/۱۵۱۵۸	۰/۰۶۰۵۰	۰/۰۳۴۰۲
۶	۰/۰۰۰۰۱	۰/۰۰۱۴۵	۰/۰۳۹۱۲	۰/۲۲۹۳۰	۰/۱۵۵۳۳	۰/۰۵۹۰۲	۰/۰۳۵۳۲
	۰/۰۰۰۰۱	۰/۰۰۱۵۲	۰/۰۴۰۰۶	۰/۲۳۰۴۳	۰/۱۵۱۲۱	۰/۰۶۱۱۴	۰/۰۳۳۳۶
	۰/۰۰۰۰۱	۰/۰۰۱۵۲	۰/۰۳۹۹۹	۰/۲۲۹۷۸	۰/۱۵۱۹۶	۰/۰۵۹۸۴	۰/۰۳۴۶۷
	$1/7400 \times 10^{-7}$	۰/۰۰۰۰۶	۰/۰۰۴۳۲	۰/۰۷۱۶۰	۰/۲۶۶۰۰	۰/۰۷۴۷۰	۰/۱۰۶۰۰
	$2/3350 \times 10^{-7}$	۰/۰۰۰۰۷	۰/۰۰۴۶۴	۰/۰۷۳۷۳	۰/۲۶۴۲۴	۰/۰۶۹۴۸	۰/۱۰۸۳۶
۷	$2/11640 \times 10^{-7}$	۰/۰۰۰۰۶	۰/۰۰۴۴۴	۰/۰۷۲۱۸	۰/۲۶۴۵۶	۰/۰۷۲۸۱	۰/۱۰۷۲۳
	$2/33280 \times 10^{-7}$	۰/۰۰۰۰۷	۰/۰۰۴۶۴	۰/۰۷۳۸۶	۰/۲۶۴۵۷	۰/۰۶۸۸۲	۰/۱۰۹۰۵
	$2/32720 \times 10^{-7}$	۰/۰۰۰۰۷	۰/۰۰۴۶۳	۰/۰۷۳۵۷	۰/۲۶۳۹۲	۰/۰۶۹۹۱	۰/۱۰۷۶۳
	$1/00000 \times 10^{-9}$	$1/30000 \times 10^{-6}$	۰/۰۰۰۲۳	۰/۰۰۹۹۰	۰/۱۱۲۰۰	۰/۲۷۱۰۰	۰/۰۲۰۱۰
	$2/08360 \times 10^{-9}$	$1/80390 \times 10^{-6}$	۰/۰۰۰۲۷	۰/۰۱۰۷۱	۰/۱۱۴۹۶	۰/۲۶۶۷۷	۰/۰۱۶۶۵
۸	$1/82650 \times 10^{-9}$	$1/63450 \times 10^{-6}$	۰/۰۰۰۲۵	۰/۰۱۰۲۶	۰/۱۱۲۸۱	۰/۲۶۸۷۷	۰/۰۱۸۶۲
	$2/10510 \times 10^{-9}$	$1/81090 \times 10^{-6}$	۰/۰۰۰۲۷	۰/۰۱۰۷۴	۰/۱۱۵۲۸	۰/۲۶۶۸۶	۰/۰۱۶۱۵
	$2/06020 \times 10^{-9}$	$1/79108 \times 10^{-6}$	۰/۰۰۰۲۷	۰/۰۱۰۶۷	۰/۱۱۴۶۳	۰/۲۶۶۶۹	۰/۰۱۷۰۶

<sup>a</sup> نتایج حاصل از پتانسیل RKR | 5 | نتایج حاصل از پتانسیل مورس. <sup>c</sup> نتایج حاصل از پتانسیل فراست- موسولین <sup>d</sup> نتایج حاصل از پتانسیل وی- هوا. <sup>e</sup> نتایج حاصل از پتانسیل هولبرت- هرشفلر

جدول ۱۳. ضرایب فراتک- کوندون برای جهش الکترونی  $X^2\Sigma_g^+ - A^2\Pi_u$  مولکول  $N_2^+$

$v'' \backslash v'$	۰	۱	۲	۳	۴	۵	۶	۷
۰	$0/48100^a$	$0/37800$	$0/12000$	$0/01950$	$0/00173$	$0/00007$	$1/54000 \times 10^{-6}$	$5/96000 \times 10^{-9}$
	$0/48083^b$	$0/37794$	$0/11972$	$0/01964$	$0/00178$	$0/00008$	$2/26800 \times 10^{-6}$	$2/41490 \times 10^{-8}$
	$0/48081^c$	$0/37862$	$0/11937$	$0/01937$	$0/00173$	$0/00008$	$2/11050 \times 10^{-6}$	$2/20420 \times 10^{-8}$
	$0/48206^d$	$0/37829$	$0/11881$	$0/01908$	$0/00166$	$0/00007$	$1/71280 \times 10^{-6}$	$1/40000 \times 10^{-8}$
	$0/47960^e$	$0/37765$	$0/12057$	$0/02013$	$0/00189$	$0/00009$	$2/71600 \times 10^{-6}$	$3/20630 \times 10^{-8}$
	$0/32400$	$0/3450$	$0/34100$	$0/23300$	$0/05940$	$0/00710$	$0/00040$	$8/92000 \times 10^{-6}$
	$0/32418$	$0/3448$	$0/33994$	$0/23342$	$0/06001$	$0/00740$	$0/00047$	$0/00001$
۱	$0/32351$	$0/3449$	$0/34153$	$0/23337$	$0/05930$	$0/00726$	$0/00045$	$0/00001$
	$0/32388$	$0/3566$	$0/34280$	$0/23214$	$0/05819$	$0/00693$	$0/00040$	$0/00001$
	$0/32440$	$0/3339$	$0/33742$	$0/23464$	$0/06165$	$0/00793$	$0/00052$	$0/00001$

	۰/۱۳۳۰۰	۰/۲۲۸۰۰	۰/۰۱۸۷۰	۰/۱۹۵۰۰	۰/۲۹۵۰۰	۰/۱۱۲۰۰	۰/۰۱۷۴۰	۰/۰۰۱۱۸
	۰/۱۳۳۵۸	۰/۲۲۸۲۸	۰/۰۱۸۷۹	۰/۱۹۲۱۶	۰/۲۹۳۵۴	۰/۱۱۳۵۱	۰/۰۱۸۶۳	۰/۰۰۱۴۵
۲	۰/۱۳۳۵۹	۰/۲۲۷۱۴	۰/۰۱۸۷۹	۰/۱۹۳۹۱	۰/۲۹۴۳۰	۰/۱۱۲۵۶	۰/۰۱۸۱۹	۰/۰۰۱۳۹
	۰/۱۳۳۱۵	۰/۲۲۹۲۹	۰/۰۱۷۴۰	۰/۱۹۷۷۳	۰/۲۹۳۹۳	۰/۱۱۰۰۷	۰/۰۱۷۱۵	۰/۰۰۱۲۲
	۰/۱۳۳۹۹	۰/۲۲۷۱۴	۰/۰۲۰۱۱	۰/۱۸۷۳۰	۰/۲۹۳۳۵	۰/۱۱۶۵۱	۰/۰۱۹۸۸	۰/۰۰۱۶۴
	۰/۰۴۳۹۰	۰/۱۹۷۰۰	۰/۰۸۳۴۰	۰/۱۰۱۰۰	۰/۰۷۱۴۰	۰/۳۰۰۰۰	۰/۱۶۸۰۰	۰/۰۳۳۲۰
	۰/۰۴۳۹۵	۰/۱۹۷۹۱	۰/۰۸۴۲۲	۰/۱۰۰۹۳	۰/۰۶۸۳۸	۰/۲۹۵۲۰	۰/۱۶۹۷۸	۰/۰۳۶۰۶
۳	۰/۰۴۴۲۴	۰/۱۹۷۹۱	۰/۰۸۳۳۷	۰/۱۰۱۰۱	۰/۰۶۹۶۱	۰/۲۹۷۰۹	۰/۱۶۸۸۲	۰/۰۳۵۲۹
	۰/۰۴۳۶۹	۰/۱۹۷۳۶	۰/۰۸۶۵۶	۰/۰۹۷۵۹	۰/۰۷۴۱۴	۰/۲۹۹۴۰	۰/۱۶۵۲۰	۰/۰۳۳۰۸
	۰/۰۴۴۲۳	۰/۱۹۸۳۴	۰/۰۸۱۸۵	۰/۱۰۳۹۱	۰/۰۶۳۵۵	۰/۲۹۱۸۱	۰/۱۷۳۷۳	۰/۰۳۸۵۳
	۰/۰۱۲۹۰	۰/۱۰۱۰۰	۰/۱۷۴۰۰	۰/۰۰۸۵۷	۰/۱۵۴۰۰	۰/۰۰۹۵۰	۰/۲۶۳۰۰	۰/۲۱۸۰۰
	۰/۰۱۲۷۸	۰/۱۰۱۱۳	۰/۱۷۶۱۷	۰/۰۰۸۹۱	۰/۱۵۳۸۴	۰/۰۰۷۷۹	۰/۲۵۳۲۹	۰/۲۱۶۴۲
۴	۰/۰۱۳۰۰	۰/۱۰۱۲۸	۰/۱۷۴۶۸	۰/۰۰۸۶۴	۰/۱۵۴۱۲	۰/۰۰۸۲۲	۰/۲۵۶۰۲	۰/۲۱۸۷۰
	۰/۰۱۲۶۵	۰/۱۰۰۳۰	۰/۱۷۶۹۳	۰/۰۱۰۳۴	۰/۱۵۱۴۴	۰/۰۱۰۶۲	۰/۲۶۲۳۵	۰/۲۱۴۹۵
	۰/۰۱۲۹۳	۰/۱۰۱۹۵	۰/۱۷۵۱۷	۰/۰۰۷۶۰	۰/۱۵۵۷۱	۰/۰۰۵۷۲	۰/۲۴۵۹۷	۰/۲۲۳۲۰
	۰/۰۰۳۵۳	۰/۰۴۰۴۰	۰/۱۳۷۰۰	۰/۱۰۹۰۰	۰/۰۰۵۶۹	۰/۱۵۳۰۰	۰/۰۰۲۵۷	۰/۲۰۴۰۰
	۰/۰۰۳۴۶	۰/۰۴۰۱۸	۰/۱۳۸۰۹	۰/۱۱۱۱۹	۰/۰۰۵۴۵	۰/۱۵۲۷۳	۰/۰۰۴۰۱	۰/۱۸۸۶۲
۵	۰/۰۰۳۵۶	۰/۰۴۰۶۱	۰/۱۳۷۵۷	۰/۱۰۹۵۶	۰/۰۰۵۶۳	۰/۱۵۳۲۲	۰/۰۰۳۷۴	۰/۱۹۱۷۲
	۰/۰۰۳۳۹	۰/۰۳۹۵۹	۰/۱۳۷۲۲	۰/۱۱۳۷۸	۰/۰۰۴۱۱	۰/۱۵۳۷۱	۰/۰۰۲۱۲	۰/۲۰۱۹۵
	۰/۰۰۳۵۳	۰/۰۴۰۸۰	۰/۱۳۸۸۲	۰/۱۰۸۳۸	۰/۰۰۶۹۰	۰/۱۵۱۳۴	۰/۰۰۶۰۴	۰/۱۷۸۱۱
	۰/۰۰۰۹۴	۰/۰۱۴۲۰	۰/۰۷۳۵۰	۰/۱۳۹۰۰	۰/۰۴۴۷۰	۰/۰۴۰۳۰	۰/۱۱۷۰۰	۰/۰۲۸۷۰
	۰/۰۰۰۸۹	۰/۰۱۳۸۵	۰/۰۷۳۳۱	۰/۱۴۱۰۰	۰/۰۴۶۹۳	۰/۰۴۰۰۳	۰/۱۱۴۳۸	۰/۰۳۴۲۱
۶	۰/۰۰۰۹۴	۰/۰۱۴۱۷	۰/۰۷۳۶۴	۰/۱۳۹۶۸	۰/۰۴۵۷۴	۰/۰۴۰۴۰	۰/۱۱۵۰۰	۰/۰۳۳۵۹
	۰/۰۰۰۸۷	۰/۰۱۳۵۲	۰/۰۷۲۱۸	۰/۱۴۱۱۹	۰/۰۵۰۲۷	۰/۰۳۶۰۰	۰/۱۱۹۱۷	۰/۰۲۷۹۲
	۰/۰۰۰۹۲	۰/۰۱۰۱۴	۰/۰۷۴۴۴	۰/۱۴۰۵۲	۰/۰۴۳۵۶	۰/۰۴۳۹۰	۰/۱۰۹۶۶	۰/۰۳۹۶۹
	۰/۰۰۰۲۵	۰/۰۰۴۶۲	۰/۰۳۲۲۰	۰/۰۹۹۳۰	۰/۱۱۱۰۰	۰/۰۰۷۴۱	۰/۰۷۸۶۰	۰/۰۶۸۶۰
	۰/۰۰۰۲۲	۰/۰۰۴۳۷	۰/۰۳۱۵۶	۰/۱۰۰۰۱	۰/۱۱۴۸۰	۰/۰۰۸۳۸	۰/۰۷۸۷۶	۰/۰۶۴۷۳
۷	۰/۰۰۰۲۴	۰/۰۰۴۵۵	۰/۰۳۲۰۷	۰/۰۹۹۸۳	۰/۱۱۲۹۶	۰/۰۰۷۸۹	۰/۰۷۹۱۱	۰/۰۶۵۳۲
	۰/۰۰۰۲۱	۰/۰۰۴۲۲	۰/۰۳۰۷۵	۰/۰۹۸۷۵	۰/۱۱۶۸۱	۰/۰۱۰۵۶	۰/۰۷۳۸۹	۰/۰۷۱۶۹
	۰/۰۰۰۲۳	۰/۰۰۴۵۵	۰/۰۳۲۴۲	۰/۱۰۱۱۴	۰/۱۱۲۳۸	۰/۰۰۶۴۴	۰/۰۸۳۰۳	۰/۰۵۸۵۰
	۰/۰۰۰۰۶	۰/۰۰۱۴۵	۰/۰۱۲۶۰	۰/۰۵۳۹۰	۰/۱۰۹۰۰	۰/۰۶۹۹۰	۰/۰۰۰۹۲	۰/۱۰۱۰۰
۸	۰/۰۰۰۰۵	۰/۰۰۱۳۱	۰/۰۱۱۹۷	۰/۰۵۳۳۱	۰/۱۱۱۳۶	۰/۰۷۴۲۹	۰/۰۰۰۶۷	۰/۱۰۱۰۸
	۰/۰۰۰۰۶	۰/۰۰۱۳۹	۰/۰۱۲۳۵	۰/۰۵۳۷۹	۰/۱۱۰۴۴	۰/۰۷۲۴۴	۰/۰۰۰۸۰	۰/۱۰۱۳۴

۰/۰۰۰۰۵	۰/۰۰۱۲۴	۰/۰۱۱۵۱	۰/۰۵۱۹۵	۰/۱۱۰۸۳	۰/۰۷۷۹۶	۰/۰۰۰۱۴	۰/۰۹۷۸۴
۰/۰۰۰۰۶	۰/۰۰۱۳۸	۰/۰۱۲۴۷	۰/۰۵۴۶۸	۰/۱۱۱۵۶	۰/۰۷۰۳۱	۰/۰۰۱۵۵	۰/۱۰۳۳۵

نتایج حاصل از پتانسیل [۱۵] RKR<sup>b</sup> نتایج حاصل از پتانسیل مورس<sup>c</sup> نتایج حاصل از پتانسیل فراست-موسولین<sup>d</sup> نتایج حاصل از پتانسیل وی-هوا<sup>e</sup> نتایج حاصل از پتانسیل هولبرت-هرشفلر

جدول ۱۴. ضرایب فراتک-کوندون برای جهش الکترونی  $B^2\Sigma_g^+ - X^2\Sigma_g^+$  مولکول  $N_2^+$

$\begin{matrix} v'' \\ v' \end{matrix}$	۰	۱	۲	۳	۴	۵	۶
۰	۰/۶۶۳۰۰ <sup>a</sup>	۰/۲۵۳۰۰	۰/۰۶۵۸۰	۰/۰۱۴۵۰	۰/۰۰۲۹۸	۰/۰۰۰۶۰	۰/۰۰۰۱۲
	۰/۶۶۲۳۹ <sup>b</sup>	۰/۲۵۳۱۴	۰/۰۶۶۳۳	۰/۰۱۴۶۰	۰/۰۰۲۸۹	۰/۰۰۰۵۳	۰/۰۰۰۰۹
	۰/۶۶۱۲۴ <sup>c</sup>	۰/۲۵۳۳۹	۰/۰۶۶۷۷	۰/۰۱۴۸۸	۰/۰۰۳۰۱	۰/۰۰۰۵۷	۰/۰۰۰۱۰
	۰/۶۶۹۵۷ <sup>d</sup>	۰/۲۴۸۱۶	۰/۰۶۴۷۱	۰/۰۱۴۱۸	۰/۰۰۲۷۴	۰/۰۰۰۴۷	۰/۰۰۰۰۷
	۰/۶۵۵۵۲ <sup>e</sup>	۰/۲۵۷۵۹	۰/۰۶۷۹۷	۰/۰۱۵۰۹	۰/۰۰۳۰۷	۰/۰۰۰۵۹	۰/۰۰۰۱۱
۱	۰/۲۹۲۰۰	۰/۰۲۳۷۰	۰/۲۸۷۰۰	۰/۱۲۹۰۰	۰/۰۴۰۷۰	۰/۰۱۱۰۰	۰/۰۰۲۷۶
	۰/۲۹۴۰۱	۰/۲۴۱۰۳	۰/۲۸۶۰۲	۰/۱۲۶۷۳	۰/۰۳۹۳۰	۰/۰۱۰۰۶	۰/۰۰۲۲۷
	۰/۲۹۴۷۳	۰/۲۳۸۱۹	۰/۲۸۵۶۹	۰/۱۲۷۶۲	۰/۰۴۰۱۳	۰/۰۱۰۵۱	۰/۰۰۲۴۵
	۰/۲۹۲۱۸	۰/۲۵۹۵۷	۰/۲۷۹۶۰	۰/۱۲۰۶۱	۰/۰۳۶۶۱	۰/۰۰۹۰۵	۰/۰۰۱۹۱
	۰/۲۹۵۶۵	۰/۲۲۴۱۲	۰/۲۹۰۲۷	۰/۱۳۲۸۴	۰/۰۴۲۳۰	۰/۰۱۱۲۷	۰/۰۰۲۷۳
۲	۰/۰۴۳۱۰	۰/۰۴۰۲۰۰	۰/۰۵۷۲۰	۰/۲۳۰۰۰	۰/۱۶۳۰۰	۰/۰۶۹۷۰	۰/۰۲۳۷۰
	۰/۰۱۶۷۴	۰/۰۴۰۲۸۹	۰/۰۶۳۸۲	۰/۲۳۶۳۹	۰/۱۶۰۷۴	۰/۰۶۶۰۴	۰/۰۲۰۹۷
	۰/۰۴۲۱۰	۰/۰۴۰۳۷۴	۰/۰۶۰۷۶	۰/۲۳۴۴۱	۰/۱۶۱۵۱	۰/۰۶۷۴۴	۰/۰۲۱۹۲
	۰/۰۳۷۱۷	۰/۰۴۰۵۳۹	۰/۰۸۵۱۱	۰/۲۳۷۲۸	۰/۱۵۱۵۷	۰/۰۵۹۷۳	۰/۰۱۸۰۶
	۰/۰۴۶۰۹	۰/۰۳۳۹۸۰	۰/۰۴۶۸۴	۰/۲۳۱۲۳	۰/۱۶۸۸۳	۰/۰۷۲۸۸	۰/۰۲۴۴۹
۳	۰/۰۰۲۱۴	۰/۱۰۱۰۰	۰/۴۱۹۰۰	۰/۰۰۳۵۲	۰/۱۵۳۰۰	۰/۱۶۷۰۰	۰/۰۹۳۲۰
	۰/۰۰۱۸۴	۰/۰۹۷۳۴	۰/۴۱۹۸۰	۰/۰۰۶۲۳	۰/۱۶۸۱۵	۰/۱۶۹۲۱	۰/۰۸۸۷۵
	۰/۰۰۱۹۱	۰/۰۹۸۷۵	۰/۴۱۹۰۳	۰/۰۰۴۸۲	۰/۱۶۴۳۳	۰/۱۶۹۰۸	۰/۰۹۰۴۵
	۰/۰۰۱۰۷	۰/۰۸۴۰۴	۰/۴۳۶۸۵	۰/۰۱۹۵۱	۰/۱۷۹۸۴	۰/۱۶۰۹۳	۰/۰۷۸۸۷
	۰/۰۰۲۷۰	۰/۱۰۹۵۸	۰/۴۰۲۱۲	۰/۰۰۰۶۰	۰/۱۵۱۰۱	۰/۱۷۳۹۲	۰/۰۹۸۷۳
۴	$7/48000 \times 10^{-6}$	۰/۰۰۶۲۶	۰/۱۶۰۰۰	۰/۳۹۵۰۰	۰/۰۰۴۲۱	۰/۰۰۸۶۲	۰/۱۵۰۰۰
	$6/81640 \times 10^{-6}$	۰/۰۰۵۵۶	۰/۱۵۳۴۳	۰/۳۹۵۸۶	۰/۰۰۲۰۸	۰/۱۰۷۳۷	۰/۱۵۹۶۶
	$9/31150 \times 10^{-6}$	۰/۰۰۵۹۰	۰/۱۵۶۳۶	۰/۳۹۱۸۱	۰/۰۰۳۳۹	۰/۱۰۲۲۸	۰/۱۵۸۰۷
	$6/98850 \times 10^{-7}$	۰/۰۰۲۸۱	۰/۱۲۹۰۶	۰/۴۳۴۷۶	۰/۰۰۱۲۴	۰/۱۲۸۵۷	۰/۱۵۶۱۵
	۰/۰۰۰۰۳	۰/۰۰۸۷۸	۰/۱۷۴۷۱	۰/۳۵۷۰۷	۰/۰۱۳۱۰	۰/۰۸۱۹۰	۰/۱۵۶۱۴

	$2/3400 \times 10^{-6}$	$3/9400 \times 10^{-6}$	0/01100	0/21300	0/36300	0/02070	0/03990
	$6/0750 \times 10^{-7}$	0/00001	0/01049	0/20441	0/35764	0/01772	0/06191
۵	$4/74260 \times 10^{-7}$	0/00002	0/01134	0/20900	0/34951	0/02197	0/05644
	$9/28550 \times 10^{-7}$	0/00001	0/00448	0/16796	0/42255	0/00117	0/08894
	$2/27720 \times 10^{-7}$	0/00011	0/01782	0/23386	0/29586	0/04472	0/03463
	$8/8400 \times 10^{-8}$	0/00001	0/00001	0/01430	0/25600	0/33900	0/03440
	$4/62800 \times 10^{-9}$	$3/73190 \times 10^{-6}$	0/00001	0/01575	0/24861	0/31859	0/03709
۶	$5/83700 \times 10^{-9}$	$3/05230 \times 10^{-6}$	0/00002	0/01740	0/25483	0/30602	0/04397
	$6/77140 \times 10^{-8}$	$4/10080 \times 10^{-6}$	0/00007	0/00544	0/19946	0/41127	0/00609
	$3/28270 \times 10^{-9}$	$2/06460 \times 10^{-6}$	0/00023	0/02894	0/28429	0/23502	0/00758
	$5/82000 \times 10^{-9}$	$2/53000 \times 10^{-7}$	0/00006	0/00026	0/01440	0/29000	0/33000
	$8/47100 \times 10^{-10}$	$9/35120 \times 10^{-9}$	0/00001	$7/24370 \times 10^{-7}$	0/02049	0/28620	0/25879
۷	$6/08120 \times 10^{-10}$	$1/72910 \times 10^{-8}$	0/00001	0/00001	0/02321	0/29394	0/28484
	$8/84970 \times 10^{-10}$	$9/65630 \times 10^{-8}$	$9/51220 \times 10^{-6}$	0/00023	0/00537	0/22334	0/40589
	$2/43260 \times 10^{-10}$	$1/84370 \times 10^{-7}$	$9/63210 \times 10^{-6}$	0/00032	0/04109	0/32597	0/18214
	$3/03000 \times 10^{-10}$	$9/94000 \times 10^{-8}$	$3/77000 \times 10^{-8}$	0/00017	0/00139	0/01030	0/31100
	$7/06730 \times 10^{-13}$	$6/82680 \times 10^{-9}$	$8/86700 \times 10^{-10}$	0/00003	0/00001	0/02403	0/31796
۸	$7/84940 \times 10^{-15}$	$5/21700 \times 10^{-9}$	$1/45440 \times 10^{-8}$	0/00002	$1/24450 \times 10^{-8}$	0/02804	0/32718
	$8/42130 \times 10^{-11}$	$3/13060 \times 10^{-9}$	$5/76400 \times 10^{-7}$	0/00001	0/00058	0/00425	0/23950
	$3/52310 \times 10^{-11}$	$3/79120 \times 10^{-9}$	$5/45740 \times 10^{-7}$	0/00003	0/00035	0/05324	0/36023

نتایج حاصل از پتانسیل RKR [۵] <sup>b</sup> نتایج حاصل از پتانسیل مورس. <sup>c</sup> نتایج حاصل از پتانسیل فراست-موسولین <sup>d</sup> نتایج حاصل از پتانسیل وی-هوا. <sup>e</sup> نتایج حاصل از پتانسیل هولبرت-هرشفلر

جدول ۱۵. ضرایب فرانک-کوندون برای جهش الکترونی  $B^2\Sigma_u^+ - A^2\Pi_u$  مولکول  $N_2^+$

$v''$	$v'$	۰	۱	۲	۳	۴	۵	۶	۷
	<i>a</i>								
	<i>b</i>	0/10843	0/20581	0/22290	0/18146	0/12373	0/07476	0/04142	0/02151
۰	<i>c</i>	0/10779	0/20466	0/22180	0/18101	0/12395	0/07537	0/04211	0/02210
	<i>d</i>	0/11221	0/20896	0/22353	0/18041	0/12215	0/07328	0/04025	0/02067
	<i>e</i>	0/10505	0/20263	0/22195	0/18224	0/12519	0/07623	0/04264	0/02242
		0/28640	0/15860	0/01290	0/01780	0/07960	0/11476	0/11051	0/08543
۱		0/28550	0/15919	0/01350	0/01683	0/07759	0/11308	0/10988	0/08579
		0/29958	0/15426	0/01003	0/02121	0/08371	0/11608	0/10911	0/08268
		0/27477	0/16185	0/01586	0/01466	0/07509	0/11269	0/11130	0/08791



	۰/۳۲۰۲۳	۰/۰۰۰۰۵	۰/۱۰۷۹۵	۰/۱۱۱۰۵	۰/۰۲۶۰۴	۰/۰۰۱۴۶	۰/۰۳۵۶۴	۰/۰۷۳۲۹
۲	۰/۳۱۹۸۸	۰/۰۰۰۰۹	۰/۱۰۶۶۷	۰/۱۱۱۷۸	۰/۰۲۷۴۴	۰/۰۰۱۰۴	۰/۰۳۳۴۰	۰/۰۷۰۸۰
	۰/۳۲۷۹۳	۰/۰۰۰۰۵۱	۰/۱۱۸۴۷	۰/۱۰۵۶۸	۰/۰۱۹۷۱	۰/۰۰۳۶۲	۰/۰۴۱۹۵	۰/۰۷۷۷۵
	۰/۳۱۳۱۴	۰/۰۰۱۰۶	۰/۰۹۷۴۶	۰/۱۱۴۴۸	۰/۰۳۲۵۹	۰/۰۰۰۲۵	۰/۰۲۹۱۸	۰/۰۶۷۶۲
	۰/۱۹۶۲۳	۰/۱۴۳۴۰	۰/۰۹۳۳۴	۰/۰۰۳۶۲	۰/۰۷۹۷۷	۰/۰۸۱۴۵	۰/۰۲۴۱۰	۰/۰۰۰۰۶
۳	۰/۱۹۶۷۳	۰/۱۴۱۲۵	۰/۰۹۴۹۶	۰/۰۰۳۰۴	۰/۰۷۸۱۹	۰/۰۸۲۴۲	۰/۰۲۵۹۶	۱/۲۸۲۷۰×۱۰ <sup>-۷</sup>
	۰/۱۸۸۴۲	۰/۱۷۳۲۹	۰/۰۷۸۴۹	۰/۰۱۰۰۱	۰/۰۸۸۸۴	۰/۰۷۴۲۹	۰/۰۱۶۰۰	۰/۰۰۱۵۰
	۰/۲۰۲۴۳	۰/۱۱۹۲۰	۰/۱۰۴۴۲	۰/۰۰۰۵۵	۰/۰۶۹۲۳	۰/۰۸۵۸۰	۰/۰۳۲۸۳	۰/۰۰۰۵۷
	۰/۰۷۱۲۴	۰/۲۶۲۹۴	۰/۰۰۹۲۰	۰/۱۲۶۹۹	۰/۰۲۶۸۳	۰/۰۱۳۴۸	۰/۰۶۸۸۰	۰/۰۶۱۵۸
۴	۰/۰۷۱۹۸	۰/۲۶۲۰۲	۰/۰۰۸۰۹	۰/۱۲۶۶۶	۰/۰۲۸۷۹	۰/۰۱۱۹۳	۰/۰۶۷۲۶	۰/۰۶۲۹۶
	۰/۰۶۰۴۰	۰/۲۷۴۸۳	۰/۰۲۶۴۰	۰/۱۲۹۴۵	۰/۰۱۳۵۰	۰/۰۲۵۵۴	۰/۰۷۴۸۹	۰/۰۵۲۰۹
	۰/۰۸۰۸۶	۰/۲۴۹۹۰	۰/۰۰۱۶۷	۰/۱۱۸۳۲	۰/۰۴۰۶۶	۰/۰۰۵۱۳	۰/۰۵۹۰۶	۰/۰۶۷۶۰
	۰/۰۱۵۴۴	۰/۱۶۸۲۸	۰/۱۹۲۹۹	۰/۰۱۸۴۵	۰/۰۶۸۴۷	۰/۰۷۶۱۲	۰/۰۰۳۱۹	۰/۰۲۴۲۷
۵	۰/۰۱۵۸۴	۰/۱۶۹۷۳	۰/۱۸۹۰۴	۰/۰۲۰۵۵	۰/۰۶۵۷۴	۰/۰۷۸۰۸	۰/۰۰۴۲۷	۰/۰۲۱۹۱
	۰/۰۱۰۵۴	۰/۱۴۸۷۳	۰/۲۳۸۳۴	۰/۰۰۳۳۵	۰/۰۹۳۲۹	۰/۰۵۹۱۶	۰/۰۰۰۰۲	۰/۰۳۸۹۷
	۰/۰۲۰۳۴	۰/۱۸۲۶۱	۰/۱۵۴۴۸	۰/۰۳۷۰۴	۰/۰۴۵۱۲	۰/۰۸۴۸۸	۰/۰۱۲۲۸	۰/۰۱۱۵۹
	۰/۰۰۱۹۰	۰/۰۵۲۱۹	۰/۲۳۵۱۲	۰/۰۸۹۱۱	۰/۰۷۶۱۱	۰/۰۱۲۴۹	۰/۰۸۰۹۹	۰/۰۳۲۶۶
۶	۰/۰۰۲۰۰	۰/۰۵۳۶۹	۰/۲۳۵۵۸	۰/۰۸۳۶۷	۰/۰۷۹۶۰	۰/۰۱۰۳۹	۰/۰۸۰۲۶	۰/۰۳۵۵۸
	۰/۰۰۰۸۸	۰/۰۳۵۷۰	۰/۲۲۳۷۴	۰/۱۵۲۶۵	۰/۰۴۳۷۰	۰/۰۳۷۲۱	۰/۰۸۱۲۰	۰/۰۱۴۳۰
	۰/۰۰۳۱۳	۰/۰۶۷۶۳	۰/۲۳۵۹۹	۰/۰۴۷۵۰	۰/۰۹۶۷۸	۰/۰۰۱۲۲	۰/۰۶۸۸۳	۰/۰۴۹۷۸
	۰/۰۰۰۱۱	۰/۰۰۸۱۴	۰/۱۰۳۸۰	۰/۲۵۱۲۳	۰/۰۱۹۹۳	۰/۱۰۸۲۶	۰/۰۰۱۲۵	۰/۰۵۰۰۷
۷	۰/۰۰۰۱۲	۰/۰۰۸۶۹	۰/۱۰۶۷۷	۰/۲۴۸۴۲	۰/۰۱۶۲۴	۰/۱۰۹۷۰	۰/۰۰۲۲۸	۰/۰۴۶۹۴
	۰/۰۰۰۰۲	۰/۰۰۳۶۱	۰/۰۷۲۲۲	۰/۲۶۷۳۱	۰/۰۷۴۴۰	۰/۰۸۵۶۰	۰/۰۰۴۸۸	۰/۰۷۰۵۸
	۰/۰۰۰۲۶	۰/۰۱۳۵۹	۰/۱۳۰۱۳	۰/۲۲۳۲۱	۰/۰۰۱۲۹	۰/۱۰۶۰۹	۰/۰۱۴۵۲	۰/۰۲۶۰۹
	۲/۱۹۰۵×۱۰ <sup>-۶</sup>	۰/۰۰۰۵۶	۰/۰۲۰۱۸	۰/۱۵۸۹۹	۰/۲۲۵۳۵	۸/۷۷۳۵×۱۰ <sup>-۶</sup>	۰/۱۰۰۲۹	۰/۰۲۲۶۳
۸	۲/۹۴۲۲×۱۰ <sup>-۶</sup>	۰/۰۰۰۶۵	۰/۰۲۱۶۹	۰/۱۶۳۰۱	۰/۲۱۷۹۹	۰/۰۰۰۳۹	۰/۰۹۸۱۰	۰/۰۲۶۵۲
	۴/۲۶۱۵×۱۰ <sup>-۹</sup>	۰/۰۰۰۱۰	۰/۰۰۸۵۳	۰/۱۱۴۲۱	۰/۲۸۰۵۰	۰/۰۲۴۸۹	۰/۱۰۴۶۳	۰/۰۰۱۴۹
	۰/۰۰۰۰۱	۰/۰۰۱۳۹	۰/۰۳۳۷۹	۰/۱۸۹۴۸	۰/۱۶۶۴۷	۰/۰۱۳۷۱	۰/۰۷۱۵۳	۰/۰۴۹۳۲

نتایج حاصل از پتانسیل [RKR] ۵<sup>h</sup> نتایج حاصل از پتانسیل مورس<sup>c</sup> نتایج حاصل از پتانسیل فراست-موسولین<sup>d</sup> نتایج حاصل از پتانسیل وی-هوا<sup>e</sup> نتایج حاصل از پتانسیل هولبرت-هرشفلر

بررسی دقیق ضرایب فرانک- کوندون در جدول ۱۲ برای انتقال الکترونی  $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$  در  $N_2$  بیانگر آن است که نوارهای  $(0,0)$ ،  $(0,1)$ ،  $(1,0)$ ،  $(1,1)$ ،  $(2,1)$ ،  $(3,1)$ ،  $(4,2)$  در مقایسه با نوارها پرشدت و قوی هستند، در صورتی که نوارهایی با  $v' \geq 6$  و  $v'' \geq 6$  ممکن است، به صورت ضعیف در طیف ظاهر شوند. توجه داشته باشید که اعداد اول و دوم داخل پرانتز از سمت چپ در هر نوار به ترتیب نشان دهنده‌ی عدد کوانتومی ارتعاشی حالت الکترونی بالاتر ( $v'$ ) و پایین‌تر ( $v''$ ) هستند. برای مثال در نوار ارتعاشی- الکترونی  $(4,0)$ ، انتقال از تراز صفر ارتعاشی حالت الکترونی بالاتر ( $v'$ ) به تراز چهار ارتعاشی حالت الکترونی پایین‌تر ( $v''$ ) انجام شده است.

ضرایب فرانک- کوندون برای انتقال الکترونی  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$  برای یون مولکولی  $N_2^+$  در جدول ۱۳ پیش‌بینی می‌کند که نوارهای  $(0,0)$ ،  $(0,1)$ ،  $(1,0)$ ،  $(1,1)$ ،  $(2,4)$ ،  $(3,5)$ ،  $(4,9)$ ،  $(6,9)$ ،  $(7,10)$ ،  $(8,11)$ ، احتمالاً قوی‌ترین نوارها هستند. ضرایب فرانک- کوندون برای نوارهایی با  $v' \geq 9$  و  $v'' \geq 12$  بسیار کوچک هستند، از این رو ممکن است به صورت تجربی در طیف‌های الکترونی مشاهده نشوند. شدت نوارهای  $(1,3)$ ،  $(1,1)$ ،  $(2,1)$ ،  $(4,5)$ ،  $(4,7)$ ،  $(5,7)$ ،  $(5,8)$ ،  $(6,9)$ ، تقریباً برابر است. جدول ۱۴ شامل ضرایب فرانک- کوندون برای سیستم نوار  $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$  در  $N_2^+$  است. داده‌های جدول بیانگر آن است که نوارهای  $(0,0)$ ،  $(1,2)$ ،  $(1,0)$ ،  $(1,1)$ ،  $(2,1)$ ،  $(3,2)$ ،  $(3,4)$ ،  $(3,5)$ ،  $(3,3)$ ،  $(4,3)$ ،  $(4,6)$ ،  $(4,4)$ ،  $(4,5)$ ،  $(6,5)$ ،  $(6,6)$ ،  $(7,5)$ ،  $(7,6)$ ،  $(7,7)$  مربوط به انتقالات پرشدت و قوی هستند، در صورتی که نوارهایی با  $v' \geq 8$  و  $v'' \geq 7$  به طور ضعیف ظاهر می‌شوند.

مقادیر ضرایب فرانک- کوندون برای سیستم  $B^2\Sigma_u^+ - A^2\Pi_u$  در یون مولکولی  $N_2^+$  که در جدول ۱۵ ارائه شده است، نشان می‌دهند که نوارهای  $(1,0)$ ،  $(1,1)$ ،  $(2,0)$ ،  $(4,1)$ ، قوی، نوارهای  $(0,1)$ ،  $(0,2)$ ،  $(0,3)$ ،  $(3,0)$ ،  $(3,4)$ ،  $(5,4)$ ، دارای شدت متوسط هستند، و نوارهایی با  $v' \geq 6$  و  $v'' \geq 7$  احتمالاً به صورت ضعیف و کم‌شدت در طیف الکترونی حضور دارند.

از مقایسه‌ی میزان انحراف مقادیر عددی ضرایب فرانک- کوندون برای جهش‌های الکترونی مولکول  $N_2$  و یون مولکولی  $N_2^+$  که با استفاده از پتانسیل‌های تجربی موریس، فراست- موسولین، وی- هوا، و هولبرت- هرشفلر محاسبه شده‌اند، نسبت به مقادیر حاصل از پتانسیل واقعی RKR می‌توان نتیجه گرفت که در اعداد کوانتومی پایین، توافق نسبتاً مطلوبی میان ضرایب فرانک- کوندون حاصل از هر چهار پتانسیل فوق و روش RKR وجود دارد، اما با افزایش اعداد کوانتومی به طور محسوسی از میزان این توافق کاسته می‌شود. همچنین، ترتیب انطباق نتایج حاصل از پتانسیل‌های تجربی با داده‌های RKR به صورت زیر است:

برای انتقال  $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$  در مولکول  $N_2$ :

وی- هوا > موریس > هولبرت- هرشفلر > فراست- موسولین

برای انتقال  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$  در مولکول  $N_2^+$ :

هولبرت- هرشفلر > موریس > فراست- موسولین > وی- هوا

با این حال در برخی موارد، انحرافات از ترتیب فوق مشاهده می‌شود.

مقادیر ضرایب فرانک - کوندون با استفاده از پتانسیل واقعی RKR برای انتقال الکترونی  $B^2\Sigma_u^+ - A^2\Pi_u$  در  $N_2^+$  گزارش نشده است، لذا در این مورد، نمی‌توان با صراحت در مورد دقت پتانسیل‌های تجربی اظهار نظر کرد.

#### ۴. نتیجه‌گیری

مقایسه‌ی نتایج مربوط به منحنی‌های انرژی پتانسیل هر حالت الکترونی با منحنی پتانسیل RKR متناظر با نشان می‌دهد که در ترازهای پایین‌تر ارتعاشی، بیشترین توافق برقرار است اما با دور شدن از فاصله بین هسته‌ای تعادلی، میزان این توافق کاهش می‌یابد و انحراف منحنی‌ها از یکدیگر، مربوط به ناحیه مجانبی و نزدیک به حد تفکیک می‌باشد. بررسی انرژی‌های ارتعاشی نشان می‌دهد که در ترازهای پایین‌تر انرژی‌های ارتعاشی محاسبه شده برای پتانسیل‌های موریس و هولبرت-هرشفلر اختلاف اندکی با مقادیر RKR دارند، اما با افزایش عدد کوانتومی ارتعاشی این اختلاف نمایان‌تر شده و در نزدیکی حد تفکیک، بیشترین اختلاف مشاهده می‌شود. ضرایب فرانک-کوندون محاسبه شده برای پتانسیل‌های مذکور، توافق خوبی با داده‌های مرجع ۵ دارند. اختلاف اندکی مشاهده می‌شود که این اختلاف‌ها روند منظمی ندارند.

#### ۵. مراجع

- [1] Z. Qin, J.M. Zhao, L.H. Liu, Radiative transition probabilities for the main diatomic electronic systems of  $N_2$ ,  $N_2^+$ ,  $NO$ ,  $O_2$ ,  $CO$ ,  $CO^+$ ,  $CN$ ,  $C_2$  and  $H_2$  produced in plasma of atmospheric entry, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 202 (2017) 286–301.
- [2] T. Billoux, Y. Cressault, A. Gleizes, Tables of radiative transition probabilities for the main diatomic molecular systems of  $OH$ ,  $CH$ ,  $CH^+$ ,  $CO$  and  $CO^+$  occurring in  $CO-H_2$  syngas-type plasma, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 133 (2014) 434–444.
- [3] C. Ni, J. Cheng, X. Cheng, Ab initio calculations for the first-positive bands of  $N_2$ , *J. Mol. Spectrosc.* 331 (2017) 17–22.
- [4] M.K. Dixit, A. Srivastava, B.L. Tembe, Fourier Grid Hamiltonian Method for calculating the Einstein coefficients, Franck–Condon factors,  $r$ -Centroids, average internuclear separations and radiative lifetimes for  $N_2$  and  $CO$  molecules, *J. Comput. Sci.* 10 (2015) 262–269.
- [5] F.R. Gilmore, R.R. Laher, P.J. Espy, Franck–Condon Factors,  $r$ -Centroids, Electronic Transition Moments, and Einstein Coefficients for Many Nitrogen and Oxygen Band Systems, *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 21 (1992) 1005–1107.
- [6] A.L.G. Rees, The calculation of potential-energy curves from band-spectroscopic data, *Proc. Phys. Soc.* 59 (1947) 998–1008.
- [7] R.W. Nicholls, W.R. Jarman,  $r$ -Centroids: Average Internuclear Separations Associated with Molecular Bands, *Proc. Phys. Soc. Sect. A.* 69 (1956) 253–264.
- [8] Y.N.A. Rajuru Ramakrishna reddy, Kotalo Rama Gopal, Spectroscopic studies of molecules observed in comets, *Indian J. Pure Appl. Phys.* 43 (2005) 237–245.
- [9] R.J. Le Roy, LEVEL: A computer program for solving the radial Schrödinger equation for bound and quasibound levels, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 186 (2017) 167–178.
- [10] S. Briefi, U. Fantz, Simulation of the  $A-X$  and  $B-X$  transition emission spectra of the  $InCl$  molecule in low pressure plasmas, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 133 (2014) 551–558.
- [11] P.F. Bernath, Spectra of atoms and molecules, second, Oxford University Press, New York, 2005.
- [12] G. Herzberg, Molecular spectra and molecular Structure. I. Spectra of Diatomic Molecules, New York, 1950.
- [13] R.R. Laher, M.A. Khakoo, A. Antić-Jovanović, Radiative transition parameters for the  $A1\Sigma_u^+ - X1\Sigma_g^+$  band system of  $107,109Ag_2$ , *J. Mol. Spectrosc.* 248 (2008) 111–121.
- [14] J.A. Sheehy, C.W. Bauschlicher, S.R. Langhoff, H. Partridge, Theoretical study of the nitric oxide  $\epsilon$  and

- 11000 Å bands, Chem. Phys. Lett. 225 (1994) 221–228.
- [15] A.M. Velasco, I. Martín, C. Lavín, E. Bustos, Radiative lifetimes for the  $A^2\Sigma^+$  ( $v' = 0-7$ ) and  $D^2\Sigma^+$  ( $v' = 0-5$ ) Rydberg states of NO, Mol. Phys. 103 (2005) 1375–1385. doi:10.1080/00268970500052296.
- [16] J. Luque, D.R. Crosley, Transition probabilities in the  $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$  electronic system of OH, J. Chem. Phys. 109 (1998) 439.
- [17] L.G. Piper, L.M. Cowles, Einstein coefficients and transition moment variation for the  $NO(A^2\Sigma^+ - X^2\Pi)$  transition, J. Chem. Phys. 85 (1986) 2419–2422.
- [18] R.W. Nicholls, On the electronic transition moment variation and the r-centroid approximation in interpretation of spectral intensities of diatomic molecules, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 14 (1974) 233–237.
- [19] P.M. Morse, Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels, Phys. Rev. 34 (1929) 57–64.
- [20] A.A. Frost, B. Musulin, Semiempirical Potential Energy Functions. I. The  $H_2$  and  $H_2^+$  Diatomic Molecules, J. Chem. Phys. 22 (1954) 1017–1020.
- [21] W. Wei Hua, Four-parameter exactly solvable potential for diatomic molecules, Phys. Rev. A. 42 (1990) 2524–2529.
- [22] H.M. Hulburt, J.O. Hirschfelder, Potential Energy Functions for Diatomic Molecules, J. Chem. Phys. 9 (1941) 61–69.
- [23] P. Senn, The computation of RKR potential energy curves of diatomic molecules using mathematica, Comput. Chem. 19 (1995) 437–439.
- [24] M. Rafi, R. Al-Tuwirqi, H. Farhan, I.A. Khan, A new four-parameter empirical potential energy function for diatomic molecules, Pramana. 68 (2007) 959–965.
- [25] S. Ghosh, M.K. Dixit, S.P. Bhattacharyya, B.L. Tembe, Franck–Condon Factors for Diatomics: Insights and Analysis Using the Fourier Grid Hamiltonian Method, J. Chem. Educ. 90 (2013) 1463–1471.