

М.А. Булдаков*, В.Н. Черепанов

Электронная поляризуемость молекул N₂ и O₂: роль обменных взаимодействий

* *Институт оптического мониторинга СО РАН, г. Томск
Томский государственный университет*

Поступила в редакцию 24.07.2003 г.

Предложен полуэмпирический метод построения функций поляризуемости двухатомной гомоядерной молекулы с учетом обменного взаимодействия атомов. Учет обменного взаимодействия проведен в аналитическом виде в рамках асимптотического метода. Функции поляризуемости представлены в виде кусочно-непрерывных функций, которые обладают физически правильным асимптотическим поведением при малых и больших межъядерных расстояниях и корректно описывают поляризуемость в окрестности равновесного положения ядер молекулы. Проведен расчет функций поляризуемости молекул N₂ и O₂ в диапазоне межъядерных расстояний [0, ∞).

Введение

Понятие электронной поляризуемости молекулы возникает в теории поляризуемости как результат применения адиабатического приближения и пренебрежения колебательно-вращательной структурой электронных уровней энергии. Электронная поляризуемость молекулы представляет собой тензор второго ранга, компоненты которого являются функциями координат ядер молекулы и частоты ω внешнего электрического поля. Для двухатомных молекул тензор электронной поляризуемости имеет только две независимые компоненты (функции поляризуемости)

$$\alpha_{zz}(\omega, R) \text{ и } \alpha_{xx}(\omega, R) = \alpha_{yy}(\omega, R),$$

где R — межъядерное расстояние, а ось z совпадает с осью молекулы. Частотная зависимость функций поляризуемости становится заметной лишь тогда, когда частота внешнего электрического поля приближается к частотам электронных переходов молекул.

В настоящее время для расчета функций поляризуемости двухатомных молекул используются квантово-химические и полуэмпирические методы. Квантово-химические расчеты функций поляризуемости двухатомных молекул проводятся для относительно небольших участков межъядерных расстояний в окрестности их равновесного положения R_e , и только для молекулы N₂ такие расчеты проведены для всего диапазона изменений R [1, 2]. Полуэмпирические методы используются для расчета функций поляризуемости двухатомных молекул во всем диапазоне межъядерных расстояний в тех случаях, когда *ab initio* методы не дают надежных значений функций поляризуемости. Известно всего несколько полуэмпирических функций поляризуемости двухатомных молекул [3–6], однако модели построения этих функций обладают методическими недостатками. Так, найденные в рабо-

тах [4, 5] функции поляризуемости не удовлетворяют их известным асимптотическим зависимостям при больших [4] и малых R [4, 5]. Кроме того, функции поляризуемости в [5] построены на основе найденных в ней эмпирических закономерностей, универсальность которых требует дополнительного обоснования. Функции поляризуемости в [3, 6] свободны от этих недостатков, однако неучет обменных взаимодействий приводит к их занижению в области средних межъядерных расстояний.

В данной статье предлагается дальнейшее развитие предложенного в [3, 6] полуэмпирического метода, состоящее в уточнении поведения функций поляризуемости в области средних значений R путем учета обменных взаимодействий между сближающимися атомами. Метод применен для нахождения функций поляризуемости молекул N₂ и O₂ во всем интервале $R \in [0, \infty)$.

Вклад обменных взаимодействий атомов в функции поляризуемости гомоядерных молекул

Поляризуемость молекулы при больших межъядерных расстояниях может быть описана на основе представления о взаимодействии образующих молекулу атомов. Можно выделить два типа межъядерных взаимодействий: мультипольное (дальнодействующее) и обменное, для которых возможно аналитическое описание функций поляризуемости молекулы. Каждое из этих взаимодействий является определяющим в своей области межъядерных расстояний: мультипольное — при $R \rightarrow \infty$ и обменное — при более малых R .

Для учета обменного взаимодействия электронов двух атомов можно воспользоваться асимптотическими методами [7], которые применимы в области межъядерных расстояний, характеризующихся малым перекрыванием валентных электронов взаи-

действующих атомов. В данной области обменное взаимодействие атомов можно приближенно рассматривать как обменное взаимодействие двух валентных электронов (по одному от каждого атома).

Рассмотрим взаимодействие двух валентных s -электронов. В этом случае асимптотическая радиальная волновая функция валентного электрона нейтрального атома определяется выражением [7]:

$$\varphi(r) = Ar^{1/\beta-1}e^{-r/\beta}, \quad (1)$$

где $\beta^2/2$ – потенциал ионизации атома, а значение асимптотического коэффициента A зависит от распределения электрона во внутренней области атома. Тогда двухэлектронная (по одному электрону от атома « a » и атома « b ») молекулярная волновая функция состояния n может быть записана в виде

$$\Psi_n(r_1, r_2, R) = c_n^{(1)}\psi_n^{(1)}(r_1, r_2, R) + c_n^{(2)}\psi_n^{(2)}(r_1, r_2, R), \quad (2)$$

где

$$\psi_n^{(1)}(r_1, r_2, R) = \left[\varphi^{(a)}(r_1, R)\varphi^{(b)}(r_2, R)\chi_I(r_1, r_2, R) \right]_n,$$

$$\psi_n^{(2)}(r_1, r_2, R) = \left[\varphi^{(a)}(r_2, R)\varphi^{(b)}(r_1, R)\chi_{II}(r_1, r_2, R) \right]_n.$$

Здесь $\varphi^{(a)}(r_1, R)$, $\varphi^{(b)}(r_1, R)$ и $\varphi^{(a)}(r_2, R)$, $\varphi^{(b)}(r_2, R)$ – асимптотические волновые функции первого и второго электронов, находящихся в основном около соответствующих атомных остатков. Выражения (2) и (3) записаны в молекулярной системе координат, в которой взаимодействующие атомы расположены на оси z , а в качестве начала координат выбрана середина межатомного расстояния. В этой системе координат r_1 и r_2 – координаты первого и второго электронов. Явный вид функций $\chi_I(r_1, r_2, R)$ и $\chi_{II}(r_1, r_2, R)$, учитывающих взаимодействие электронов друг с другом и с чужими ядрами, приведен в [7].

Для расчета тензора статической поляризуемости двухатомной молекулы в электронном состоянии n воспользуемся квантово-механическим выражением для компонентов тензора электронной поляризуемости

$$\alpha_{ii}^{(n)}(R) = 2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n(R) | d_i | m(R) \rangle|^2}{E_m(R) - E_n(R)}. \quad (4)$$

При вычислении поляризуемости молекулы обменное взаимодействие проявляется через его вклад в матричный элемент дипольного момента электронного перехода $\langle n(R) | d_i | m(R) \rangle$ и разность электронных энергий молекулы $E_m(R) - E_n(R)$, причем определяющим является вклад в матричный элемент дипольного момента электронного перехода. Вклад обменного взаимодействия в i -ю компоненту дипольного момента, вычисленный с помощью выражений (2) и (3), для гомоядерной молекулы может быть представлен в виде

$$\begin{aligned} \langle n(R) | d_i | m(R) \rangle & \langle \Psi_n^{(1)}(r_1, r_2, R) | d_i | \Psi_m^{(2)}(r_1, r_2, R) \rangle = \\ & = A_{nm}^i(\beta_n, \beta_m, R) R^{\delta_i} \exp[-(3\beta_n + \beta_m)R/2], \end{aligned} \quad (5)$$

где $A_{nm}^i(\beta_n, \beta_m, R)$ – слабозависящая функция от R в области малого перекрытия электронных оболочек атомов; $\beta_n^2/2$ и $\beta_m^2/2$ – потенциалы ионизации атомов в основном и возбужденном состояниях соответственно, а

$$\delta_z = \frac{11}{4\beta_n} + \frac{1}{\beta_m} - \frac{1}{2(\beta_n + \beta_m)} + 1, \quad (6)$$

$$\delta_{x,y} = \frac{11}{4\beta_n} + \frac{1}{\beta_m} - \frac{1}{2(\beta_n + \beta_m)} + \frac{1}{2}.$$

Тогда при подстановке (5) в выражение для компонентов тензора электронной поляризуемости (4) и замене β_m некоторым эффективным значением $\bar{\beta}$ выражение для вклада обменного взаимодействия в поляризуемость молекулы примет вид

$$\alpha_{ii}^{(n)}(R) = B_i(\beta_n, \bar{\beta}, R) R^{2\delta_i} \exp[-(3\beta_n + \bar{\beta})R]. \quad (7)$$

Здесь $B_i(\beta_n, \bar{\beta}, R)$ также является слабозависящей функцией от R и в дальнейшем полагается параметром B_i .

Полученный результат может быть также применен, когда взаимодействующие электроны имеют ненулевые орбитальные моменты l . Это связано с тем, что обменное взаимодействие происходит в области координат электронов вблизи оси z , где волновые угловые функции электронов изменяются слабо, так что их можно заменить значениями на оси z с нулевой проекцией орбитального момента. Вследствие этого задача об обменном взаимодействии валентных l -электронов сводится к рассмотренной выше, с той лишь разницей, что коэффициент A в (1) следует домножить на $\sqrt{2l+1}$ [8].

Метод построения функций поляризуемости

Предложенный в [3, 6] полуэмпирический метод построения функций поляризуемости двухатомных молекул в основном электронном состоянии (далее индекс n у молекулярных параметров опускаем) включает в себя выполнение трех положений.

1. Функции поляризуемости $\alpha_{zz}(R)$ и $\alpha_{xx}(R) = \alpha_{yy}(R)$ молекулы в области малых значений R задаются полиномами [9]:

$$\alpha_{ii}^{(n)}(R) = \alpha_{ii}^{(0)} + a_i^{(2)}R^2 + a_i^{(3)}R^3 + a_i^{(4)}R^4 + \dots, \quad (8)$$

где $\alpha_{ii}^{(0)}$ – компоненты поляризуемости «объединенного» атома, а константы $a_i^{(k)}$ ($k \geq 2$) предлагается находить с помощью известных значений функций поляризуемости и их производных в точке R_e . Полиномы (8) с найденными коэффициентами $a_i^{(k)}$ описывают функции поляризуемости молекулы в области малых R , включая окрестность равновесного межъядерного расстояния.

2. Функции поляризуемости молекулы в области больших значений R представляются в виде суммы вкладов от мультипольного [3] и обменного взаимодействий:

$$\begin{aligned} \alpha_{zz}(R) = & 2\alpha_{zz}^0 + 4(\alpha_{zz}^0)^2 \frac{1}{R^3} + \left[8(\alpha_{zz}^0)^3 + \frac{7\gamma C_6}{9\alpha_0} \right] \frac{1}{R^6} + \\ & + 18\alpha_0^3 \left(1 + \frac{1}{2\varepsilon + 3} \right) \frac{r_0^2}{R^8} + 16(\alpha_{zz}^0)^4 \frac{1}{R^9} + \\ & + 32\alpha_0^3 \left(1 + \frac{2}{3\varepsilon + 4} \right) \frac{r_0^4}{R^{10}} + B_z R^{2\delta_z} \exp[-(3\beta_0 + \bar{\beta})R] \end{aligned} \quad (9)$$

и

$$\begin{aligned} \alpha_{xx}(R) \equiv \alpha_{yy}(R) = & 2\alpha_{xx}^0 - 2(\alpha_{xx}^0)^2 \frac{1}{R^3} + \\ & + \left[2(\alpha_{xx}^0)^3 + \frac{4\gamma C_6}{9\alpha_0} \right] \frac{1}{R^6} + 6\alpha_0^3 \left(1 + \frac{1}{2\varepsilon + 3} \right) \frac{r_0^2}{R^8} - \\ & - 2(\alpha_{xx}^0)^4 \frac{1}{R^9} + 12\alpha_0^3 \left(1 + \frac{2}{3\varepsilon + 4} \right) \frac{r_0^4}{R^{10}} + \\ & + B_x R^{2\delta_x} \exp[-(3\beta_0 + \bar{\beta})R]. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь α_{ii}^0 — компоненты тензора поляризуемости атомов; r_0 — ван-дер-ваальсовский радиус взаимодействующих атомов; α_0 — средняя поляризуемость атома; C_6 — коэффициент ван-дер-ваальсовского взаимодействия атомов; γ — средняя вторая гиперполяризуемость атома, а эффективная диэлектрическая проницаемость атома ε определяется из соотношения

$$\alpha_0 = \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} r_0^3. \quad (11)$$

В данной работе параметры B_i находятся методом подгонки функции $\alpha_{ii}(R)$ к *ab initio* данным молекулы H_2 [2] в области малого перекрытия электронных оболочек атомов Н и с учетом масштабирующего множителя, отражающего размер электронных оболочек атомов, переносятся на другие гомоядерные молекулы.

3. Функции поляризуемости молекулы в промежуточной области межъядерных расстояний находятся методом сшивания функций поляризуемости молекулы на малых и больших R и задаются полиномами пятой степени по R :

$$\alpha_{ii}(R) = \sum_{j=0}^5 b_i^{(j)} R^j, \quad (12)$$

коэффициенты $b_i^{(j)}$ находятся из условий сшивания с точностью до вторых производных включительно. В данной работе точки сшивания R_1 и R_2 выбраны следующим образом: $R_1 \approx R_e$, $R_2 \approx 2r_0$. Выбор точек сшивания допускает некоторый произвол, существенно не изменяющий вид функций поляризуемости молекул.

Функции поляризуемости молекул N_2 и O_2

Нами проведен расчет функций поляризуемости гомоядерных молекул H_2 , N_2 и O_2 , при этом надежные *ab initio* значения функций поляризуемости молекулы H_2 [2] использованы для проверки предложенной модели и нахождения неизвестных параметров B_i в выражениях (9), (10). Значения атомных и молекулярных констант, а также величины параметров ε , B_i , $\bar{\beta}$, R_1 и R_2 , использованные при расчетах функций поляризуемости молекул H_2 , N_2 и O_2 , приведены в таблице. Коэффициенты B_i ($\equiv B_i^{(H)}$) обменного взаимодействия атомов Н находились методом наименьших квадратов по данным *ab initio* расчетов функций поляризуемости $\alpha_{ii}(R)$ [2] в диапазоне межъядерных расстояний $2,4 \leq R < 4,0 \text{ \AA}$. Коэффициенты B_i для атомов N и O вычислялись по формуле $B_i^{(N,O)} = 9B_i^{(H)} A_{(N,O)}^i / A_{(H)}^6$, где $A_{(N,O)}$ — параметр асимптотической радиальной волновой функции валентного p -электрона соответственно атомов N и O, а $A_{(H)}$ — параметр асимптотической радиальной волновой функции валентного s -электрона атома Н. Значения параметра $\bar{\beta}$ оценивали, исходя из вероятностей радиационных переходов в атомах Н, N и O.

На рис. 1 приведены рассчитанные функции поляризуемости молекулы H_2 с учетом и без учета обменных взаимодействий между атомами Н.

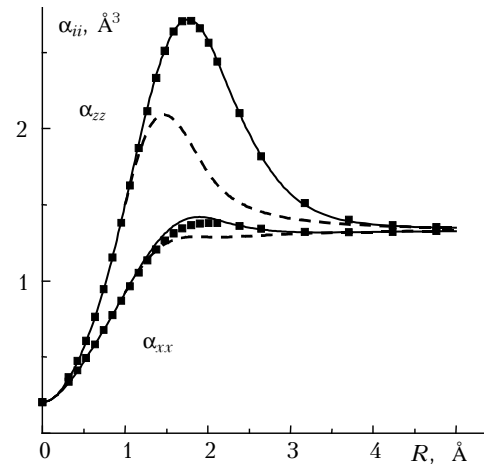


Рис. 1. Функции поляризуемости молекулы H_2 . Сплошные линии — данная работа, штриховые линии — данная работа (без учета обменного взаимодействия), квадраты — *ab initio* расчет [2]

Хорошо видно, что учет вклада этих взаимодействий в функцию поляризуемости $\alpha_{ii}(R)$ позволил достичь хорошего согласия с *ab initio* расчетами [2] во всем диапазоне межъядерных расстояний. Использование всего одного подгоночного параметра B_i свидетельствует о физической корректности описания вклада обменных взаимодействий в функции поляризуемости $\alpha_{ii}(R)$.

Параметры для расчета функций поляризуемости молекул H_2 , N_2 и O_2

| Молекула Терм | H_2 $^1\Sigma_g^+$ | N_2 $^1\Sigma_g^+$ | O_2 $^3\Sigma_g^-$ | |
|---------------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|---------------------|
| $(\alpha_{xx})_e, \text{Å}^3$ | 0,679 ^{a)} | 1,53 [10] | 1,25 [10] | |
| $(\alpha'_{xx})_e, \text{Å}^3$ | 0,669 ^{a)} | 1,12 [10] | 0,70 [10] | |
| $(\alpha''_{xx})_e, \text{Å}^3$ | 0,121 ^{a)} | 0,33 [10] | 0,80 ^{b)} | |
| $(\alpha_{zz})_e, \text{Å}^3$ | 0,947 ^{a)} | 2,24 [10] | 2,33 [10] | |
| $(\alpha'_{zz})_e, \text{Å}^3$ | 1,372 ^{a)} | 3,35 [10] | 3,89 [10] | |
| $(\alpha''_{zz})_e, \text{Å}^3$ | 1,221 ^{a)} | 2,93 [10] | 8,60 ^{b)} | |
| «Объединенный» | | | | |
| атом | He | Si | S | |
| Терм | 1S | $^1D (M_L = 0)$ | $^3P (M_L = 0)$ | |
| $\alpha_{xx}^{(0)}, \text{Å}^3$ | 0,205 [11] | 5,62 [12] | 2,68 [12] | |
| $\alpha_{zz}^{(0)}, \text{Å}^3$ | 0,205 [11] | 7,50 [12] | 3,35 [12] | |
| Изолированный | | | | |
| атом | H | N | O | |
| Терм | 1S | 4S | $^3P (M_L = 0)$ | $^3P (M_L = \pm 1)$ |
| $\alpha_{xx}^0, \text{Å}^3$ | 0,6668 [11] | 1,101 ^{b)} | 0,755 ^{b)} | 0,825 ^{b)} |
| $\alpha_{zz}^0, \text{Å}^3$ | 0,6668 [11] | 1,101 ^{b)} | 0,895 ^{b)} | 0,755 ^{b)} |
| $\alpha_0, \text{Å}^3$ | 0,6668 | 1,101 | 0,802 | |
| $\eta_0, \text{Å}^3$ | 1,1 [13] | 1,5 [13] | 1,4 [13] | |
| ϵ | 4,01 ^{r)} | 2,45 ^{r)} | 2,24 ^{r)} | |
| $\gamma C_6, \text{Å}^{12}$ | 4,18 ^{л)} | 10,51 ^{л)} | 5,03 ^{л)} | |
| $\beta_0, \text{a.e.}$ | 1,000 [8] | 1,033 [8] | 1,000 [8] | |
| $\bar{\beta}, \text{a.e.}$ | 0,41 | 0,31 | 0,31 | |
| $A, \text{a.e.}$ | 2,00 [8] | 1,49 [8] | 1,32 [8] | |
| $B_x, \text{Å}^{(3-2\delta)}$ | 32,60 | 50,16 | 24,25 | |
| $B_z, \text{Å}^{(3-2\delta)}$ | 108,81 | 167,44 | 80,94 | |
| $R_1, \text{Å}$ | 0,9 | 1,1 | 1,2 | |
| $R_2, \text{Å}$ | 2,2 | 3,0 | 2,8 | |

^{a)} Рассчитано из данных [2]; ^{b)} значения, уточненные авторами в сравнении с [10];

^{в)} взято из таблицы [6]; ^{r)} вычислено по формуле (11); ^{л)} значения γ и C_6 для H взяты из [14], γ для N и O – из [15], C_6 для N и O – из [16].

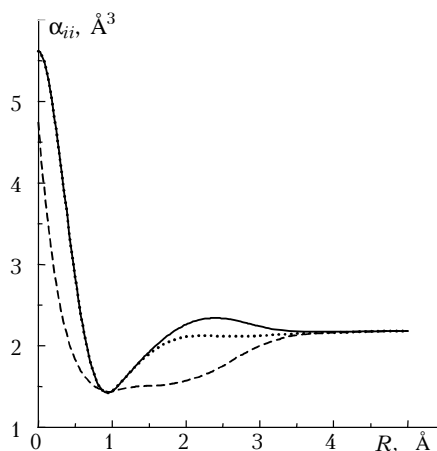


Рис. 2. Функция поляризуемости $\alpha_{xx}(R)$ молекулы N_2 . Сплошная линия – данная работа, пунктирная линия – данная работа (без учета обменного взаимодействия), штриховая линия – расчет [5]

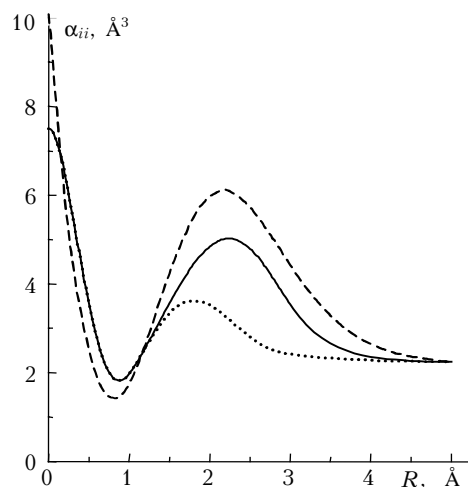


Рис. 3. Функция поляризуемости $\alpha_{zz}(R)$ молекулы N_2 . Сплошная линия – данная работа, пунктирная линия – данная работа (без учета обменного взаимодействия), штриховая линия – расчет [5]

Предложенный метод расчета функций поляризуемости был применен к молекулам N_2 и O_2 , при этом для молекулы кислорода рассмотрены оба канала ее распада (рис. 2–5).

Хорошо заметно, что, как и для молекулы H_2 , учет обменных взаимодействий атомов приводит к возрастанию функций поляризуемости молекул N_2 и O_2 в диапазоне межъядерных расстояний $1 \div 3 \text{ \AA}$. Отметим, что рассчитанные функции поляризуемости молекул N_2 и O_2 следует рассматривать как приближенные, поскольку параметры B_i и $\bar{\beta}$ для молекул N_2 и O_2 являются оценочными. Тем не менее полагаем, что полученные в данной работе функции поляризуемости молекул N_2 и O_2 более точны, чем в работах [3–6].

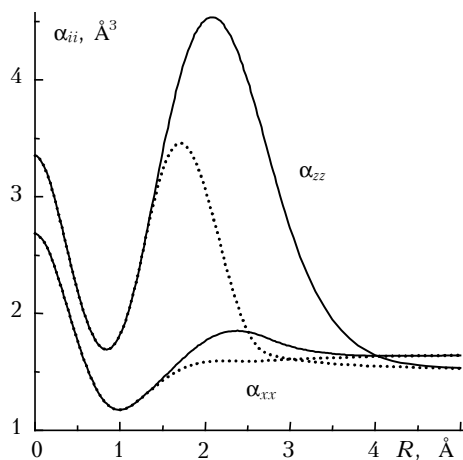


Рис. 4. Функции поляризуемости молекулы O_2 (атомы O в состояниях с $|M_L|=1$). Сплошные линии — данная работа, пунктирные линии — данная работа (без учета обменного взаимодействия)

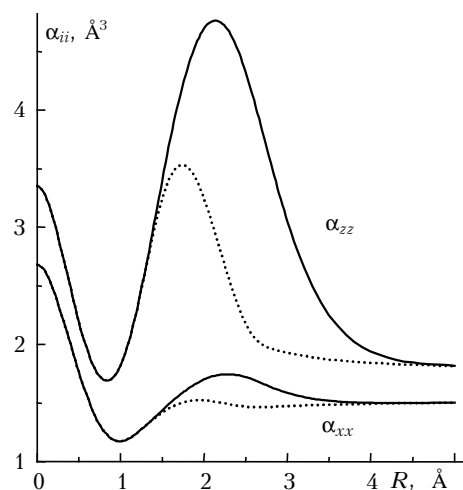


Рис. 5. Функции поляризуемости молекулы O_2 (атомы O в состояниях с $|M_L|=0$). Сплошные линии — данная работа, пунктирные линии — данная работа (без учета обменного взаимодействия)

Представляет интерес сравнить полученные функции поляризуемости молекулы N_2 с рассчитанными альтернативным методом, в котором сделана попытка учесть обменные взаимодействия

с помощью найденных корреляционных соотношений [5]. Отвлекаясь от некоторых различий функций поляризуемости в области малых R , связанных с различным выбором значений $\alpha_{xx}^{(0)}$ и $\alpha_{zz}^{(0)}$ атома Si , обратим внимание на неоправданное занижение $\alpha_{xx}(R)$ для $R \approx 1 \div 3 \text{ \AA}$ (см. рис. 2). Причиной этого, по нашему мнению, является необоснованное распространение на молекулу азота корреляционных соотношений, которые установлены для молекул, состоящих преимущественно из атомов первой группы Периодической системы элементов Д.И. Менделеева.

Заключение

Рассмотренный в данной статье полуэмпирический метод позволяет в аналитическом виде получить функции поляризуемости двухатомных гомоядерных молекул во всем диапазоне межъядерных расстояний. Показано, что учет обменных взаимодействий между отдельными атомами позволяет заметно улучшить функции поляризуемости в области средних значений R . Несмотря на недостатки, присущие полуэмпирическим методам, данный подход позволяет создать корректное представление о физических механизмах формирования функций поляризуемости двухатомных молекул.

1. *Kolos W., Wolniewicz L.* Polarizability of the hydrogen molecule // *J. Chem. Phys.* 1967. V. 46. N 4. P. 1426–1432.
2. *Ruchlewski J.* An accurate calculation of the polarizability of the hydrogen molecule and its dependence on rotation, vibration and isotopic substitution // *Mol. Phys.* 1980. V. 41. N 4. P. 833–842.
3. *Булдаков М.А.* Поляризуемость двухатомных гомоядерных молекул: функция межъядерного расстояния // *Оптика атмосф. и океана.* 2002. Т. 15. N 9. С. 829–833.
4. *Temkin A.* Internuclear dependence of the polarizability of N_2 // *Phys. Rev. A.* 1978. V. 17. N 3. P. 1232–1235.
5. *Varandas A.J.C., Rodrigues S.P.J.* Internuclear dependence of static dipole polarizability in diatomic molecules // *Chem. Phys. Lett.* 1995. V. 245. N 1. P. 66–74.
6. *Булдаков М.А., Матросов И.И.* Поляризуемость двухатомной молекулы как функция межъядерного расстояния // *Оптика и спектроскопия.* 1995. Т. 78. Вып. 1. С. 26–30.
7. *Смирнов Б.М.* Асимптотические методы в теории атомных столкновений. М.: Атомиздат, 1973. 296 с.
8. *Никитин Е.Е., Смирнов Б.М.* Атомно-молекулярные процессы: в задачах с решениями. М.: Наука, 1988. 304 с.
9. *Булдаков М.А., Васильев Н.Ф., Матросов И.И.* Поляризуемость двухатомной молекулы при малых межъядерных расстояниях // *Оптика и спектроскопия.* 1993. Т. 75. Вып. 3. С. 597–603.
10. *Buldaikov M.A., Ippolitov I.I., Korolev B.V., Matrosov I.I., Cheglokov A.E., Cherepanov V.N., Makushkin Yu.S., Ulenikov O.N.* Vibration rotation Raman spectroscopy of gas media // *Spectrochim. acta. A.* 1996. V. 52. N 8. P. 995–1007.
11. *Радицг А.А., Смирнов Б.М.* Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980. 240 с.

12. *Andersson K., Sadley A.J.* Electric dipole polarizabilities of atomic valence states // *Phys. Rev. A.* 1992. V. 46. N 5. P. 2356–2362.
13. *Полинг Л., Полинг П.* Химия. М.: Мир, 1978. 688 с.
14. *Buckingham A.D., Clarke K.L.* Long-range effects of molecular interactions on the polarizability of atoms // *Chem. Phys. Lett.* 1978. V. 57. N 3. P. 321–325.
15. *Das A.K., Thakkar A.J.* Static response properties of second-period atoms: coupled cluster calculations // *J. Phys. B.* 1998. V. 31. N 10. P. 2215–2223.
16. *Zeiss G.D., Meath W.J.* Dispersion energy constants $C_6(A, B)$, dipole oscillator strength sums and refractivities for Li, N, O, H₂, NH₃, H₂O, NO and N₂O // *Mol. Phys.* 1977. V. 33. N 4. P. 1155–1176.

M.A. Buldakov, V.N. Cherepanov. **Electronic polarizability of the N₂ and O₂ molecules: role of the exchange interactions.**

A semiempirical method is proposed to describe the polarizability function for diatomic homonuclear molecules taking into account the exchange interaction of atoms. The exchange interactions are described in the analytical form in the framework of the asymptotic method. The polarizability functions have the piecewise-continuous form with the physically true behavior at small and large internuclear separations and describe correctly the polarizability functions near the equilibrium position of the molecular nuclei. The polarizability functions for the N₂ and O₂ molecules are calculated in the internuclear separation range [0, ∞).