

Ac H

Au H

Bengtsson S.

1925

Arkiv. Mat. Astron. Fysik, 18,
N 27, 9 pp.

The combination relationships
in the band spectrum of the
gold flame.

Air H

Hulthen &, Zumstein R. | 1926

Phys. Rev., 28, 13.

The absorption spectra of
some hydride compounds in
the ultraviolet.

Анн
Агн

St. Farkas

1929

Z. phys. Chem. B 5, 467, 1929

①

Об образовании газобразного шриза золота

Углекисл. пер., нагретая 300 мм длиной и 28 мм ϕ . $t = 1400^\circ \text{C}$.
в $\text{H}_2 + \text{N}_2$. Опыты в трубе соединяющей Рутковскую массу
(Haldenwanger, Spangau) и трубу длиной 500 мм и сечения ширины
20 мм. Образование газобраз. шриза ~~при пропускании~~ при пропускании
 H_2 над Au утончалась и утончалась и по количеству
образованного шриза рассчитывалась температура смеси
по теории Менделеева

Одновременно проводились энергетич. наблюдения. Анн
показал в положении при $t = 1400^\circ \text{C}$, при котором

$R_{\text{лин}} = 7,8 \times 10^{-2} \text{ м}$, т.е. кубическое сечение
обнаружено при давлении 15 ат, как и суж. отжиг, сжат.
0,01 - 0,1 мм

Спектр $\lambda_{\text{дн}}$ наблюдается при 1100°C , т.е. при $P_{\text{дн}} =$
0,01 мм.

Получены облученные диссипации

V. 738

1929

AuH, CuH, CdH, ZnH, 2, D, E ∞ ∞ .

Bengtsson and Hulthen
1. Trans. Faraday Soc. 25, 751₇₅₇ (1929)

Circ. 500

ЕОТЪ Ф. К.
J

F

АиН

T. Heimer

1937

(20)

Z. Phys. 104, 303, 1937

Полосистый спектр штриха золота.

Спектр АиН получен в излучении в дуге. В ранне
уровнею $1\Sigma^* - 1\Sigma$ - системе найдены новые уровни $\sigma' = 3, 4, 5$
Рассчитана термодиссоц и изъём энергии

1.95 A / мм

Волны от перемещения штриха.

АиН

T. Heimer Z. Phys. 101, 121, 1936

BP- V 2818

1937

AuH; AuD (D)

Heimer T.

Z.Physik. 1937, 104, 303-8

The band spectrum of gold hydride.

CA, 1937, 2922⁴

J.

Est. f. k.

ЕСТЬ Ф. К.

Am H

Heimer T.

1937

86 pp., Thesis, Stockholm. 1937

The band spectra of hydrides
and deuterides of copper and
gold.

AuD.

Sunao Imanishi

1937

H¹Σ-¹Σ Sci pap. Inst. Phys. Chem. Res. (Tokyo)

(21)

31,247, 1937

Система полос AuD $^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$ в ближеск у-ф и
новый анализ спектра излучения золота.

$\rho D_2 = 120$ мм ртст $D = 1,75$ А/мм

Время экспозиции в обл 3370-4440 30 мин

Анализ II полос. Электролитический водородный
спектр 21.6 см^{-1} ...

1934

AuD; AuH (Te, We, XeWe; JeWe; Be, De, λ)

Imanishi S.

Sci. Papers Inst. Phys. Chem. Research (Tokyo)
1937, 31, N 694, 247-64

The near ultraviolet $^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$ band system
of gold deuteride and a new analysis of gold
hydride spectrum.

CA., 1937, 6556⁵

1963

AuH

Bp-3477-VI

✓ 1 Д154. Спектр поглощения гидрида золота в УФ-области. Ringström Ulf. Absorption spectrum of gold hydride in the ultra-violet. «Nature» (Engl.), 1963, 198, №4884, 981 (англ.)

В области 2200—2900 Å сфотографированы 11 полос поглощения AuH, отнесенных в красную сторону. Приведены волн. числа полос, проведено отнесение полос переходам $B'\Sigma^+ - X'\Sigma^+$, $a^3\Pi_1 - X'\Sigma^+$ и $C'\Sigma^+ - X'\Sigma^+$; дан их колебательный анализ; для указанных электронных состояний AuH предложены диссоциационные схемы, обнаружены преддиссоциация состояния C, приведены следующие предварительные значения констант (в см^{-1}): для $B'\Sigma^+$ $B=5,849$, $\omega_e=1693,1$, $\omega_e x_e=74,3$; для $a^3\Pi_1$ $B=5,464$, для $C'\Sigma^+$ $B=5,79$. По спектру поглощения AuH при $\lambda < 2700 \text{ Å}$ также показано наличие новых Σ - и Π -состояний. В дополнении при корректуре отмечено, что последующий анализ AuD показал некорректность результатов для состояния $a^3\Pi$. Ф. Ортенберг

фр. 1964. 19

Full
Cuepp

Bep - 3477 - VI

1963

) Absorption spectrum of gold hydride in the ultraviolet. Ulf Ringstrom (Univ. Stockholm). *Nature* 198, 981(1963). The absorption spectrum of Au hydride was photographed, 2200-2900 Å. Eleven bands were found, all shaded towards the red. The band farthest to the ultraviolet was too weak and diffuse to be analyzed: the other 10 bands were analyzed, and the results are tabulated. The table lists the head of the band in cm^{-1} , characterizes the transition it represents, and gives preliminary consts. for the 3 excited states: $B^1\Sigma^+$, $a^3\Pi_1$, and $C^1\Sigma^+$.

Robert D. Cloney

C.A. 1963. SG. 6

5944d

Ал Н

Логинов В. А.

1964

Тур. Комис. по спектроско-
пии. АН СССР, Вып. 1,
689-695.

Метод получения спек-
тров спектров помощи
и звуковых волн
и радиансов/ири высо-
ком давлении.

(Ал. Ал Н)

Анн. Ж

Ломанов В. А.

1964

Опты. и спектры, 1964, XVI, IV3,
402.

Формирование элементарных
полосатых спектров посто-
янного метода элект-
рического возбуждения проволо-
чек в жидкостях.
(см. Методы возбужд.)

АuH
AuD



U. Ringstrom

1964

BO⁺-Y¹Z¹

C¹E¹-X¹Z¹

G¹L¹-Y¹E¹

E¹L¹-Y¹E¹

C¹O⁺-Y¹E¹

Art. tys. 27 (17), 227-65

Спектр поглощения AuH и AuD в далеком
ультрафиолете.

в обл. 2200-2000 с диск. 0.6 A/mm

Au-металл, помещается в цоол. ячейку и каретаж в кассе как
до 1960°C в атмосфере чистого H₂. Дальность до каретажной ~250 мм
р. сг. В кассе каретажной системы сужения зрения
лампа. В обл. 2200-2000 (AuH) и (2200-2000) AuD фототар.
с диск 12 A/mm. С 1000 W - источник лампы вращ. системы
15-60 мм. 60 мм для больших вертикаль для лам

$f_{22} = 600$ или 100 , $600 - f_{22}$. Случайные ошибки в определении
минимума имеют значение порядка 10^{-3} от ширины полосы в г/сек.
Для случайных ошибок ~ 0.06 сек $^{-1}$, для систематических
 0.2 сек $^{-1}$. Подтверждение — не требуется.

Указания для презентов разглагольствования
Программы для расчета

AuH
AuD
energy
(D_0)

B9-3478-11

1964

Absorption spectra of gold hydride and gold deuteride in the far ultraviolet. Ulf Ringstrom (Univ. Stockholm). *Arkiv Fysik* 27(17), 227-65(1964)(Eng). The absorption spectra of AuH and of AuD were studied, 2200-3000 Å. In AuH, 12 new vibrational levels were found; in AuD, 9. These belong to 5 electronic states: $B0^+$, $C^1\Sigma^+$, $a2$, $b1$, and $c0^-$. The last 4 have Hund's case c (far nuclei case c) coupling of the angular momenta. They have large internuclear distances and small dissocn. energies. The transition $c0^- - X^1\Sigma^+$ was found only in AuH. It is usually forbidden, as is $2-1\Sigma^+$, but appears here because of rotational uncoupling of electronic angular momenta. The $B0^+$ state is strongly perturbed by $C^1\Sigma^+$, and is perturbed by $b1$. Many of the levels are predissocd. by an unstable 1 state. The dissocn. energy of the ground state of AuH is estd. to be $D_0 = 26,000 \pm 1000 \text{ cm.}^{-1}$. The mol. consts. are tabulated. C. F. Aten

C.H. 1965. 62.2

12/1/84

AuH
AuD

1964

14 Б123. Спектр поглощения гидрида и дейтерида золота в дальней ультрафиолетовой области. Ringström Ulf. The absorption spectra of gold hydride and gold deuteride in the far ultraviolet. «Arkiv. fys.», 1964, 27, № 3, 227—265 (англ.)

В области 2200—3000 Å исследованы спектры поглощения AuH и AuD. Для AuH найдено 12 новых колебательных уровней, а для AuD 9 уровней. Эти уровни принадлежат 5 электронным состояниям: BO^+ (прежнее обозначение $B'\Sigma^+$ или Σ^{**}), $C'\Sigma^+$, $a\ 2$, $v\ 1$ и $s\ 0^-$. В последних 4 состояниях осуществляется тип s связи по Гунду орбитальных моментов. Они имеют большие расстояния между ядрами и малые энергии диссоциации. Переход $s\ 0^- \rightarrow X'\Sigma^+$ найден только у AuH. Этот переход, так же как и $2 \rightarrow \Sigma^+$, обычно запрещен. Состояние BO^+ сильно возмущается состояниями $\Sigma'\Sigma^+$ и $v\ 1$. Многие уровни преддиссоциируют на нестабильное состояние.

11-87-128-11
B99-3478-11



ж. 1965. 14

Энергия диссоциации основного состояния AuH составляет $26000 \pm 1000 \text{ см}^{-1}$. Без исправления на возмущение приведены мол. константы ν_{00} , B_0 , $B_0 - B_1$, $\Delta G_{1/2}$ и D_0 . Сделано предположение, что первое возбужденное состояние является состоянием $C^1\Sigma^+$, а состояния $\text{AO}^+ \text{BO}^+$, $a\ 2$, $v\ 1$ и $c\ 0$ имеют конфигурации типа $(d^9)(s\sigma)^2(p\sigma)$. Электроны d^9 сильно взаимодействуют друг с другом. Формально для состояний $a\ 2$, $v\ 1$, $c\ 0$ и BO^- предложены конфигурации $(d\sigma)^2(d\pi)^3(s\sigma)^2(p\sigma)$.
Р. Ф.

Au H

спектр,

Do, 10.4

Au D

5 Д253. Спектр поглощения гидрида и дейтерида золота в далекой УФ-области. Ringström Ulf. The absorption spectra of gold hydride and gold deuteride in the far ultraviolet. «Arkiv fys.», 1964, 27, № 3, 227—265 (англ.)

В области 2200—3000 исследованы спектры поглощения AuH и AuD. Для AuH найдено 12 новых колебательных уровней, а для AuD — 9 уровней. Эти уровни принадлежат 5 электронным состояниям: $B0^+$ (прежнее обозначение — $B^1\Sigma^+$ или $^1\Sigma^{**}$), $C^1\Sigma^+$, $a2$, $b1$ и $c0^-$. В последних 4 состояниях осуществляется тип s -связи Гунда орбитальных моментов. Они имеют большие расстояния между ядрами и малые энергии диссоциации. Переход $c0^- \rightarrow X^1\Sigma^+$ найден только у AuH. Этот переход также, как и $2 \rightarrow ^1\Sigma^+$, обычно запрещен. Состояние $B0^+$ силь-

1964

11-87/48-11
B9-34/48-11



ф. 1965. 5A

но возмущается состояниями $C^1\Sigma^+$ и $b1$. Многие уровни преддиссоциируют на нестабильное состояние 1. Энергия диссоциации основного состояния AuH составляет $26\,000 \pm 1000 \text{ см}^{-1}$. Без исправления на возмущение приведены молекулярные константы ν_{00} , B_0 , $B_0 - B_1$, $\Delta G_{1/2}$ и D_0 . Сделано предположение, что первое возбужденное состояние является состоянием $C^1\Sigma^+$, а состояния $A0^+$, $B0^+$, $a2$, $b1$, $c0$ имеют конфигурации типа $(d^9)(s\sigma)^2(p\sigma)$. Электроны d^9 сильно взаимодействуют друг с другом. Формально для состояний $a2$, $b1$, $c0^-$ и $B0^+$ предложены конфигурации $(d\sigma)^2(d\pi)^3(d\delta)^4(s\sigma)^2(p\sigma)$.

AuH

Bp-3478-VI

1964.

AuS

Ringstrom u.

(u.n.)

Arxiv fys., 1964,

27, ~~17~~ 227-265.

Hutt

A-576

1966

Hussain Z.,

Can. J. Phys. , 1966, 44,
N4, 917-19.

(We)

AgH
AgD

Ringström U., Åslund N.

- 1966.

$B^1\Sigma-X$ (3) Ark. Fys. 32, N1, 19, 1966

$C^1\Pi-X$

$D^1\Pi-X$

$B^3\Sigma-X$

$C^3\Pi-X$ Спектр поглощения AgH и AgD в газовой фазе.

Поглощение в нити кинта, $t = 1550^\circ\text{C}$ в атмосфере H_2 или D_2 . Давление в нити до накалывания ~ 400 мм рт.ст.

Четотичек сплошного спектра 1000 тг H_2 -лампы.

I порежок 21 ft-решетки 1,2 А/мм Экспозиция 20 мин
(дальний у.р. 2200-2500)

очень красивые фотографии

AuH

ommuca N 11
B namke Stockholm, Univ.

1966

Ringström U.

Inaugural Dissertation.
Uppsala, 1966

do, descr.
coomomue
ye

Spectroscopic investigation
of the hydrides and deuterides
of Cu, Au, and Ag.

ommuca 912

AuH; CuH

1973

(do)

164368n⁻ Floating type wave functions in molecular pseudopotential calculations. Gaspar, R.; Tamassy-Lentei, I. (Inst. Theor. Phys., Kossuth Lajos Univ., Debrecen, Hung.). *Acta Phys.* 1973, 33(3-4), 387-98 (Eng). Electronic structure, dissociation energy, and equilibrium nuclear separation were determined for CuH, AgH, AuH, ZnH⁺, CdH⁺, HgH⁺, NaH, KH, RbH, CsH, MgH⁺, CaH⁺, SrH⁺, BaH⁺, and RaH⁺ using the pseudopotential method. In such molecules, 2 valence electrons are moving in the field of a proton and a positive ion X⁺, the interaction energy of these valence electrons and the positive ion being accounted for by a Hellman-type pseudopotential. As a first approximation, floating H-type 1s, 1-center wave functions were used to describe the closed-shell and open shell molecular bonding functions.

C.A. 1973, 78 N 26

(+14)



AtuH

ommureu 3323

1975

Gaspar R; et al.

(Y; 7e). Acta phys. Acad. Sci. Hung.,
1975, 38 N1, 3-13.

Molecular pseudopotential
Calculations ● I. ...

H-Au

num. 4824

1975

Kerr J. A., et al.

(Do) Handbook Chem. Phys.,
55th Ed., 1974-75

60604.3708

Ph, Ch, TC, LGU

96201

АЧН (кв. мех.
расчет)

1976

*9-13206

Desclaux J. P., Pyykkö P. Dirac - Fock
one-centre calculations. The molecules
CuH, AgH and AuH including p-type symmetry
functions. "Chem. Phys. Lett.", 1976,
39, N 2, 300-303 (англ.) (св CuH) III

0029 п.х

614 615 62

ВИНИТИ

AuH

AuCl

HgCl₂

np, ier,
pacer

(+2) $\boxtimes$

C. A. 1978
N²⁰

55.165-112) AB initio studies of gold monohydride, gold monochloride, mercury monohydride and mercury dichloride using relativistic effective core potentials. Hay, P. Jeffrey; Wadt, Willard R.; Kahn, Luis R.; Bobrowicz, Franck W. (Los Alamos Sci. Lab., Univ. California, Los Alamos, N. Mex.). *J. Chem. Phys.* 1978, 69(3), 984-97 (Eng). Relativistic effective core potentials (ECP) are derived for Au and Hg atoms, where the ECP incorporated the Coulomb and exchange contributions of the core orbitals; the core-orthogonality terms for the valence orthogonality terms for the valence orbitals, and the effect of the "mass-velocity" and "Darwin" relativistic effects on the valence orbitals. The results of at. valence-electron (VE) calcs. with the ECP's compare favorably with relativistic Hartree-Fock and Dirac-Hartree-Fock calcs. and with expt., when the effects of spin-orbit coupling are included in the VE calcs. Nonrelativistic calcs., by contrast, lead to erroneous predictions and to differences in excitation energies of 1.5-3.5 eV. The large relativistic effects in the atoms carry over into the AuH, AuCl, and HgCl₂ mols, as they are important in detg. correct bond lengths and bond energies and in influencing the charge distributions. Similarly large relativistic effects are encountered in ionization potentials calcd. for HgCl₂ from orbital energies and from SCF calcs. Spin-orbit coupling is introduced to compare with the exptl. photoelectron spectrum. An extensive study of the lowest electronic states of HgH is presented, where the effects of spin-orbit coupling are crit. in describing the potential energy curves of the excited $2^1\Pi_{1/2}$ and $2^2\Sigma_{1/2}^+$ states.

1978

6366

annua

AuH

*45-18847

Boeyens Jan. C. A

1977

"J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2",
1977, 73(3), 321-6.

(ZeDe
кв. мех.
параметр.)

(с.ч. Cu-Au; III)
(~~с.ч. Cu~~) III

1978

3 Б35. Неэмпирические исследования AuH , $AuCl$, HgH и $HgCl_2$ с использованием релятивистских эффективных потенциалов остова. Hay P. Jeffrey, Wadt Willard R., Kahn Luis R., Bobrowicz Franck W. Ab initio studies of AuH , $AuCl$, HgH and $HgCl_2$ using relativistic effective core potentials. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 3, 984—997 (англ.)

Определены релятивистские эффективные потенциалы (ЭП) остовов атомов золота и ртути. Найденные ЭП аппроксимированы линейными комбинациями гауссовых функций и использованы для расчетов энергий атомов Au , Hg и молекул AuH , $AuCl$, HgH и $HgCl_2$ методом МК ССП. Спин-орбитальное взаимодействие учтено в рамках полуэмпирич. модели. Для сравнения проведены вычисления с использованием тех же приближений с нерелятивистскими ЭП. Впервые продемонстрирована важность учета релятивистских эффектов при расчете св-в молекул. Релятивистские эффекты оказывают сильное влияние на длины и энергии связей и характер распре-

AuH
 $AuCl$
 HgH
 $HgCl_2$

кв. мех.
 расчет

(+3) 4

2.1979, N3

деления электронной плотности в AuH , AuCl и HgCl_2 .
 Отмечено, что в релятивистском приближении результаты лучше согласуются с эксперим. данными. Показано, что спин-орбитальное взаимодействие ответственно за правильное описание $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Sigma_{1/2}^+$ состояний молекулы HgH .

А. В. Немухин



AuH

1 2 Д130. Неэмпирическое исследование AuH, AuCl, HgH и HgCl₂ с использованием эффективных потенциалов остова. Hay Jeffrey P., Wadt Willard R., Kahn Luis R., Bobrowicz Franck W. Ab initio studies of AuH, AuCl, HgH and HgCl₂ using relativistic effective core potentials. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 3, 984—997 (англ.)

кв. мех.
расчет

Выполнены неэмпирич. расчеты электронной структуры атомов Au и Hg и молекул AuH, AuCl, HgH и HgCl₂ в валентном приближении с использованием релятивистских эффективных потенциалов остова (РЭПО). РЭПО включают члены, ответственные за кулоновские и обменные взаимодействия орбиталей остова и релятив. эффекты, связанные с зависимостью массы от скорости, а также дарвиновские члены. Спин-орбитальное взаимодействие учитывалось методом теории возмущений, РЭПО и нерелятив. ЭПО представлены в виде разло-



зова

Ф. 197Ф.2

1978

лений по гауссовым ф-циям. Расчеты проводились в гауссовых базисах в приближении ССП, многоконфигурационным методом (МК) ССП и методом МК ССП+КВ. Предварительно сопоставлены результаты расчетов энергий АО и энергий возбужденных состояний, ΔE , Au и Hg, выполненных с учетом (I) и без учета (II) релятив. эффектов (РЭ). Лишь в случае (II) наблюдается согласие рассчитанных ΔE с экспериментом. Учет РЭ приводит к сжатию и понижению энергий орбиталей, имеющих ненулевую амплитуду в области ядра (s -АО). Результаты расчетов в валентном приближении с РЭПО находятся в хорошем согласии с данными, полученными в полных расчетах с включением РЭ. Рассчитаны кривые потенц. энергии для основных состояний молекул AuH, AuCl, HgH и HgCl₂ с использованием РЭПО и нерелятив. ЭПО. Для HgH выполнены расчеты потенц. кривых ряда возбужденных состояний (с учетом и без учета спин-орбитального взаимодействия). О. В. Сизова

АиН

1978

12 Д154. Проявление нарушения приближений Борна-Оппенгеймера в спектрах некоторых двухатомных молекул. Rai S. B., Yadav B. R., Rai D. K. Breakdown of Born-Openheimer approximation in the spectra of some diatomic molecules. «Nat. Acad. Sci. Lett.», 1978, 1, № 7, 286—268 (англ.)

На основании теории Банкера (Bunker P. R. «J. Mol. Spectr.», 1968, 28, 422) рассчитаны электронные изотопич. сдвиги в молекулах AuH, AlH, LuH, ZnH⁺, Li₂, BaH и BH.

расчет
эл. изотоп.
сдвигов

(+6)

⊠

P.1978, N/2

Au H

1949

Kant Arthur, et al

High Temp. Sci 1949, 11,
vs, 55-62

(D, Y)

cm. Cu H-1

AUH
AUD

arrived 8904

1979

Ohwada E.

Cul. 1266.

Spectrochim acta,
1979, A35, 1353-57.

Auth Lammela 9033 1979

Pitzer R.S.

unrec.
ref. unrec.
packet Accounts Chem. Res.
1979, 12 (8), 241-46
Relativistic Effects on
Chemical Properties.

АиН

1980
4 Б57. О природе релятивистского сжатия длины связи. Ziegler T., Snijders J. G., Baerends E. J. On the origin of relativistic bond contraction. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 75, № 1, 1—4 (англ.)

В рамках метода Хартри—Фока—Слейтера (вариант метода ДВМ с аналитич. базисом слейтеровских ф-ций) с учетом релятивистских поправок в 1-м порядке теории возмущений рассчитаны потенциальные кривые и спектроскопич. постоянные молекул Au₂, AuH и AuCl.

В кач-ве возмущения рассматривались релятивистские поправки 1-го порядка малости по величине α^2 , где α — постоянная ТС: поправка на зависимость массы электрона от скорости (ПЗС), дарвиновское и спин-орбитальное взаимодействие. Помимо поправки 1-го порядка к полной энергии молекулы вычислены также релятивистские поправки 2-го порядка малости, связанные с релятивистским сжатием волновых ф-ций. Релятивистское сжатие длин связей (по отношению к нерелятивист-

кв. мех.
расчет,
г.л. связи

(+1) □

с. 198/24.

скому значению) составило 16, 13 и 5% в Au_2 , AuH и AuCl , соотв., причем все это сжатие обусловлено практически только релятивистскими поправками 1-го порядка. Энергии диссоциации и частоты колебаний в релятивистском случае увеличиваются и для всех трех молекул хорошо согласуются с эксперим. значениями. Сделан вывод о том, что релятивистское сжатие длин связей не связано с релятивистским сжатием волновых функций и обусловлено, в основном, ПЗС. Отриц. величина ПЗС частично компенсирует возрастание кинетич. энергии, уменьшает отталкивание между атомами, связанное с ростом кинетич. энергии, и вызывает сдвиг минимума потенциальной кривой в сторону меньших значений.

И. А. Тополь

AuH

Malli B. Z.

1981

КБ.мех.
рацем
левосторонний

Relativistic Eff. Atom,
Mol., and Solids. Proc.
NATO Adv. Study Inst.,
Vancouver, 10-21 Aug.,
1981. New York; London,
1983, 183-211. (cer. H₂; III)

АИИ

1981

1 B1021. Расчет энергий связи методом переходного состояния в приближении Хартри—Фока—Слейтера с учетом релятивистских эффектов. Calculation of bonding energies by the Hartree—Fock—Slater transition state method, including relativistic effects. Ziegler Tom. «Relativistic Eff. Atoms, Mol., and Solids. Proc. NATO Adv. Study Inst., Vancouver, 10—21 Aug., 1981». New York; London, 1983, 421—436 (англ.)

Статья обзорного характера. Изложен формализм нерелятивистского метода Хартри—Фока—Слейтера (ХФС) и обсуждены возможности прямого расчета энергий связи двухатомных молекул или фрагментов методом переходного состояния (МПС) в рамках приближения ХФС, а также возможности учета в рамках метода ХФС релятивистских эффектов как с использованием 4-компонентного приближения Дирака, так и 2-компонентного приближения Паули. В последнем приближении рассмотрены релятивистские вклады в полную

До, М. П., рас-
чет

73

X. 1984, 19, N1

энергию и волновую функцию в пертурбац. разложении по степеням α^2 , где α -ПТС. В рамках формализма МПС исследованы релятивистские вклады в вычисляемые значения энергий связи. Результаты учета релятивистских эффектов в методе ХФС продемонстрированы на примерах расчетов спектроскопич. постоянных молекул AuH, AuCl, Au₂ и HgCl₂. Обсуждены причины релятивистского сокращения длин связей. Показано, что учет релятивистских эффектов приводит к изменению порядка следования относит. стабильности соединений в ряду CuCH₃—AgCH₃—AuCH₃. И. А. Тополь



Aust

Commen 11507 1981.

Ziegler T, et al.

re; Do; We
papers

J. Chem. Phys., 1981,

74 (2), 1271-84.



АиМ

Оммуек 13702) 1982

Гел. Y.S., McLean A.D.

редактирующей.

Эффекты,

Кв. всех.

распредел.

J. Chem. Phys., 1982,
76, N1, 735-736.



A4H

1982

McLean A.D., Lee

Yoon S.

pacrēu Curr. Aspects Quantum
ser. n. Chem., 1981. Proc. Int. Conf.
and Workshop, Barcelona
28 Sept.-30 Oct., 1981. Amster-
dam e.a., 1982, 219-238.

(ser. A9M; III)

AuM

(Ummueck 13382)

1982

Methfessel M., Kübler J.

электрон.
структура,
расчет

J. Phys F: Metal. Phys;
1982, 12, N1, 141-161.

ActH

[Am. 17890]

1983

McLean A.D.,

neop.
pacrim

J. Chem. Phys., 1983, 79,
N7, 3392-3403.

Aufl. 10m. 203911 1983

Sassenberg U.,

Dr. N.,
Обзор
Inaugural dissertation,
Institute of Physics,
University of Stockholm
S-113 46 Stockholm,
1983.

AetH

[Om. 18488]

1984

Kahn L. R.,

Int. J. Quantum. Chem.

1984, 25, n1: Proc. Symp.

Relativ Eff. Quantum.

Chem., A60, June 21-23,

1982, ● 149-183.

meop.
paeem

1985

AgH

Krauss M.,
Stevens W. J., et al.

et al.
J. Comput. Chem.,
1985, 6, N4, 287-295.

(see AgH; III)

Auth

Om. 25501

1986

neop.
pacem.

Malli G.L., Pypers N.C.,
Proc. Roy. Soc. London,
1986, A 407, 377-404.

Aukl

[OM 22686]

1985

Ross R.B., Ernler W.C.,

ab initio
program.

J. Phys. Chem., 1985,

89, N24, 5202-5206.

(Cor. Fig. 2 III)

Autl(2) [Om. 22 261, a"] 1985

Squires R.R.,
Do J. Amer. Chem. Soc., 1985,
107, N 15, 4385-4390.

AuH

1986

106:9531p Ab initio fully relativistic molecular calculations: bonding in gold hydride. Malli, G. L.; Pyper, N. C. (Dep. Chem., Simon Fraser Univ., Burnaby, BC Can. V5A 1S6). *Proc. R. Soc. London, A* 1986, 407(1833), 377-404 (Eng). The electronic structure of AuH was investigated by ab initio fully relativistic extended basis set SCF and CI calcns. based on Dirac equation. The Au 6p orbitals play only a very minor role in the bonding. The 10 electrons occupying the 5d orbitals in the free Au atom are significantly affected by the formation of the mol. whose electronic structure exhibits substantial 5d-6s hybridization. The extended-basis calcns. show that relativity shortens the bond length by 0.45 a.u., substantially increases the fundamental vibration frequency and doubles the binding energy predicted by using a single determinant wavefunction. The bonding cannot be fully understood by using nonrelativistic theory.

ab initio
pacien

C.A. 1987, 106, N2

AuH

1986

4 Д108. Полностью релятивистские неэмпирические расчеты молекул. Связь в гидриде золота. Ab initio fully relativistic molecular calculations. Bonding in gold hydride. Malli G. L., Pyper N. C. «Proc. Roy. Soc. London», 1986, 1986, A407, № 1833, 377—404 (англ.)

Неэмпирическим полностью релятив. методом ССП в расширенном базисе, выбор которого детально обоснован, с учетом конфигурационного взаимодействия исследовано электронное строение AuH (I). Отмечено, что $6p$ -АО играют весьма незначительную роль в связи, в которой существенна $5d-6p$ гибридизация. Отмечено, что релятив. эффекты столь велики, что нерелятив. приближение приводит к совершенно неадекватному описанию связи (энергия диссоциации 0,994 эВ, тогда как в нерелятив. приближении выгоден распад на атомы с энергией 0,19 эВ). Равновесная длина связи оценена в 2,8794 ат. ед.). В. Л. Лебедев

(м.п.)

ф. 1987, 18, № 4

AuH

1987

107: 141714a Relativistic effects on orbital energies in silver hydride and gold hydride; a clue to the origin of relativistic correlation effects. Lee, Yoon Sup; McLean, A. D. (Dep. Chem., Korea Adv. Inst. Sci. Technol., Seoul, 131 S. Korea). *Bull. Korean Chem. Soc.* 1987, 8(2), 122-6 (Eng). Orbital energies for AuH and AgH were calcd. with an all-electron, relativistic-SCF method by using Slater-type basis functions. The major relativistic effects for AgH were spin-orbit splittings, and those for AuH were large shifts in the orbital energies in addn. to spin-orbit splittings. Relativistic effects on the orbital energies in AgH and AuH imply that changes in correlation energies for relativistic calcs. of AuH will be significantly larger than those of AgH, providing partial explanation for the large discrepancies in equil. bond length and the dissocn. energy between expts. and theor. ests. for AuH. Large relativistic effects on the orbital energies indicate that the relativistic contributions should be included for the correct interpretation of ionization potentials for these mols. Relativistic effects were also evident in the dipole moments of these mols.

muop. paper

ⓧ (H)

C.A. 1987, 107, N16

AgH

1988

Авт

Miyoshi Eisaku;
Sakai Yoshiko.

неоп.
патент
компьютер,
Di;

J. Comput. Chem. 1988,
9 (7), 719-27.

(сер. CuF; III)

AuH

1988

109: 237445f Relativistic effects in bonding and dipole moments for the diatomic hydrides of the sixth-row heavy elements. Ramos, A. F.; Pyper, N. C.; Malli, G. L. (Theor. Sci. Inst., Simon Fraser Univ., Burnaby, BC Can. V5A 1S6). *Phys. Rev. A: Gen. Phys.* 1988, 38(6), 2729-39 (Eng). Ab initio Dirac-Fock (DF) and nonrelativistic-limit (NRL) wave functions and dipole moments are calcd. to investigate the bonding characteristics and the relativistic effects in the systems HgH^+ , TlH , PbH^+ , and BiH . The dipole moment of AuH is evaluated using the DF SCF and relativistic CI wave functions obtained by G. L. Malli and N. C. Pyper (1986). Contour plots of relativistic MO densities and difference d. maps are presented to illustrate the arrangement of electronic charge in these systems. The 5d orbitals are involved in the bonding of HgH^+ , whereas they do not play a significant role in TlH and PbH^+ . The relativistic calcns. predict HgH^+ , TlH , and PbH^+ to be bound. The nonrelativistic-limit wave functions predict HgH^+ and BiH to be unbound but TlH and PbH^+ to be bound. The calcd. dipole moments using the DF and the NRL wave functions for these heavy systems differ significantly in magnitude, and in some cases even in the sign.

14, meop.
racem.

(+3)
⊗

c.A. 1988, 109, N 26

HgH^+ , TlH , PbH^+

SHH

1989

Boca R.

Int. J. Quantum. Chem.
1989. 36, N6, C. 727-739.

(cu.  NaH; III)

Аул

1989

111: 240191s Relativistic all electron configuration interaction calculation of ground and excited states of the gold hydride molecule. Jansen, G.; Hess, B. A. (Inst. Phys. Theor. Chem., Univ. Bonn, D-5300 Bonn, 1 Fed. Rep. Ger.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1989, 13(4), 363-75 (Eng). Relativistic CI calcs. were made with the spin-free no-pair Hamiltonian on the gold hydride mol., treating the ground state as well as the eleven lowest excited states. The calcs. provide a picture of the bonding in the $X^1\Sigma^+$ ground state consistent with previous work on this species using four-component spinors: compared to non-relativistic calcs., the dipole moment is reduced by a factor of two, hybridization (and thus participation of d orbitals at the bonding) is greatly enhanced, the bond length is shortened by 20 pm, and the dissecn. energy is increased by 50%. Comparison of the spin-averaged potential curves of the excited states with expt. suggests a reinterpretation of the $C^1\Sigma^+$ as the 0^+ fine structure component of 2^3H and the prediction of a weakly bound $3\Sigma^+$ state with weak transitions to the ground state in the range of 2.9-3.1 eV.

11 боргунаг.
состояний,
рацем

С.А. 1989, 111, N 26

АиН

1989

4 Б1014. Релятивистский расчет с учетом всех электронов методом конфигурационного взаимодействия основного и возбужденных состояний молекулы гидроксида золота. Relativistic all electron configuration interaction calculation of ground and excited states of the gold hydride molecule / Jansen G., Heß B. A. // Z. Phys. D.— 1989.— 13, № 4.— С. 363—375.— Англ.

Неэмпирическим релятивистским методом ССП в широком базисе с послед. учетом релятивистского конфигурац. взаимодействия рассчитаны потенциальные кривые 12 низших электронных состояний молекулы AuH в приближении нулевого спин-орбитального взаимодействия. Показано, что предложенный метод, основанный на бесспиновом непарном гамильтониане с проекторами внешнего поля, является быстрым и эффективным, в то же время вычисленные результаты хорошо согласуются с результатами наиболее точных методов, учитывающих релятивистские эффекты (РЭ). Проводится сравнение х-к основного состояния с учетом и без учета РЭ. Релятивистское сокращение связи Au—H состав-

М. Л.

Х. 1990, № 4

ляет 0,20 А; вклад РЭ в энергию диссоциации 1,14 эВ; дипольный момент уменьшается в 2 раза. Найдено, что в релятивистском приближении молекула AuH значительно более ковалентна. Подробно обсуждается электронная структура и диабатич. кривые для всех возбужденных состояний Σ , Π и Δ -типа и сравниваются с эксперим. Отмечено, что для получения колич. результатов необходим учет спин-орбитального взаимодействия.

В. К. Михалко

AuK^+

AuK

AuK^-

М.П.

1989

4 Б1021. Релятивистские эффекты в химии золота.
I. Двухатомные соединения золота. Relativistic effects
in gold chemistry. I. Diatomic gold compounds /
Schwerdtfeger P., Dolg M., Schwarz W. H. E., Bow-
maker G. A., Boyd P. D. W. // J. Chem. Phys.—
1989.— 91, № 3.— С. 1762—1779.— Англ.

Нерелятивистским и релятивистским методами ССП
как с учетом всех электронов, так и в различных
приближениях псевдопотенциала рассчитано электрон-
ное строение, спектроскопич. постоянные и дипольные

(76) 

170.

X. 1990, № 4

моменты двухатомных соединений Au: $\text{AuH}^+(^2\Sigma^+)$,
 $\text{AuH}(^1\Sigma^+)$, $\text{AuH}^-(^2\Sigma^+)$, $\text{AuLi}(^1\Sigma^+)$, $\text{AuO}(^2\Pi, ^2\Sigma^-)$,
 $\text{AuF}(^1\Sigma^+)$, $\text{AuNa}(^1\Sigma^+)$, $\text{AuS}(^2\Pi, ^2\Sigma^-)$, $\text{AuCl}(^1\Sigma^+)$,
 $\text{AuBr}(^1\Sigma^+)$, $\text{AuI}(^1\Sigma^+)$, $\text{Au}_2^+(^2\Sigma_g^+)$, $\text{Au}_2(^1\Sigma_g^+)$ и
 $\text{Au}_2^-(^2\Sigma_g^+)$. Корреляц. эффекты учитывали в рамках
 приближений configuraц. взаимодействия и связан-
 ных и связанных электронных пар. Исследовано
 влияние релятивистских эффектов на различные св-ва
 молекул. Показано, что релятивистская стабилизация
 или дестабилизация связей зависит от электроотрица-
 тельности лиганда. Наибольшая дестабилизация связи
 обнаружена для AuF (86 кДж/моль) и наибольшая
 стабилизация связи — для AuLi (—174 кДж/моль).
 Релятивистское сокращение длин связей имеет различ-
 ную величину от 1,09 Å для AuH^+ до 0,16 Å для
 AuF . Многие рассчитанные спектроскопич. постоянные
 имеют предсказат. характер.

И. А. Тополь

Auth +

[Om 34017]

1990

Ohanessian G., Brusick M.J.
et al.,

meop.
pacrem

J. Amer. Chem. Soc. 1990,
112, 7179-7189.

Theoretical Study of Transition-
Metal Hydride. ●

5. $H_f H^+$ through $H_g H^+$,
 $Ba H^+$, and $La H^+$.

Arkl

(OM 34574)

1990

Reddy R.R., Reddy A.S.R.,
Viswanath R.,

M.N.,
Oyler

J. Quant. Spectrosc.
and Radiat. Transfer,
1990, 43, ● N 4, 347-349.

AuH

1992

117: 258634x A scalar-relativistic extension of the linear combination of Gaussian-type orbitals local density functional method: application to gold hydride, gold chloride, and gold diatomic (AuH, AuCl, Au₂). Haeblerlen, Oliver D.; Roesch, Notker (Lehrstuhl fuer Theor. Chem., Tech. Univ. Muenchen, W-8046 Garching, Germany). *Chem. Phys. Lett.* 1992, 199(5), 491-6 (Eng). The linear combination of Gaussian-type orbitals local d. functional (LCGTO-LDF) approach to the electronic structure of mols. was supplemented by a self-consistent scalar-relativistic method based on external field projectors. By means of an unitary Douglas-Kroll transformation, the method decouples the large and small components correct to 2nd order in the nuclear potential and thus yields a numerically stable two-component all-electron method. The computational effort beyond that of a nonrelativistic mol. LCGTO-LDF calcn. remains moderate. The results obtained for Au₂, AuH and AuCl are encouraging as spectroscopic consts. are found to compare well with exptl. data.

neop. paper,
M.A.

(42) 

C.A. 1992, 117, n 26

AuH⁺

1992

Д 5 Д76. Неэмпирические ССП расчеты методом Дирака—Фока для систем с открытой оболочкой и тяжелым атомом. Связь в ионе AuH⁺. Ab initio Dirac—Fock self-consistent field calculations for open-shell heavy-atom systems. Bonding in AuH⁺ ion / Ishikawa Yasuyuki, Malli Gulzari L., Pyper N. C. // Chem. Phys. Lett. — 1992. — 194, № 4—6. — С. 481—484. — Англ.

Для исследования влияния релятив. эффектов на хим. связь в основном состоянии $\Gamma_{1/2}$ иона AuH⁺ применен неэмпирич. метод ССП Дирака—Фока для молекул с открытыми оболочками. Показано, что релятив. эффекты приводят к существенному (на 1,01 Å) укорочению связи в указанном состоянии; результирующая длина связи равна 1,56 Å. Энергия диссоциации и силовая постоянная с учетом релятив. эффектов возрастают на порядок величины по сравнению с нерелятив. результатами.

М.П.

Сб. 1993, №5

AuH⁺

1992

/ 117: 118748n Ab initio Dirac-Fock self-consistent field calculations for open-shell heavy-atom systems: bonding in the hydrogold (AuH⁺) ion. Ishikawa, Yasuyuki; Malli, Gulzari; Pyper, N. C. (Dep. Chem., Univ. Puerto Rico, Rio Piedras, P. R. 00931). *Chem. Phys. Lett.* 1992, 194(4-5-6), 481-4 (Eng). A Dirac-Fock SCF scheme for open-shell mols. is implemented in terms of the generalized coupling operator formalism. The method is applied to the ground state $\Gamma_{1/2}$ of the AuH⁺ ion in order to evaluate relativistic effects on the chem. bonding of this species. The effects result in a dramatic bond contraction of 1.01 Å at the SCF level; the predicted bond length for the $\Gamma_{1/2}$ ground state is 1.56 Å. The computed dissocn. energy for the ground $\Gamma_{1/2}$ state is 0.59 eV at the SCF level. The ab initio fully relativistic Dirac-Fock-SCF treatment leads to an order of magnitude larger dissocn. energy and force const. for the ground state of the AuH⁺ ion as compared to the non-relativistic SCF treatment.

Do, M.N.
ab initio pre-
vM.

C.A. 1992, 117, N 12

AuH

1993

3 Б1058. Потенциал ионизации и сродство к электрону атома Au и молекулы AuH, рассчитанные релятивистскими методами конфигурационного взаимодействия и пропагатора с учетом всех электронов. Ionization potential and electron affinity of the Au atom and the AuH molecule by all-electron relativistic configuration interaction and propagator techniques /Pizlo Artur, Jansen Georg, Heß Bernd Artur, Niessen Wolfgang von //J. Chem. Phys. .—1993 .—98 ,№ 5 .—С. 3945—3951 .—Англ.

Y, Ae

Проведены релятивистские и нерелятивистские неэмпирич. расчеты (с учетом всех электронов) потенциалов ионизации, сродства к электрону и энергий возбуждения атома Au и молекулы AuH. Использованы метод конфигурац. вз-вия, усредненный метод функционала связанных пар и различные варианты метода ф-ции Грина. Библ. 30. А. А. Сафонов

X. 1994, №3

At H

1995

Collins Ch. L., Dyall K.G.
et al.

J. Chem. Phys. 1995,
102, N 5. C. 2024-2031.

sp. n.

(see, C₁H; III)

1995

F: AuH

P: 3

8Б169. Электронная корреляция и релятивистские эффекты для соединений металлов группы IB. I. Гидриды металлов группы IB. Electron correlation and relativistic effects in the coinage metal compounds. I. The coinage metal hydrides / Kello Vladimir, Sadlej Andrzej J. // Theor. chim. acta. - 1995. - 92, N 4. - С. 253-267. - Англ.

эмпирическим методом ССП МО ЛКАО в больших базисах с включением поляризац. ф-ций и учетом электронной корреляции методом связанных кластеров (с учетом трехкратных возбуждений), а также с учетом релятивистских эффектов (РЭ) в квазирелятивистском приближении исследовано электронное строение М, М=Cu, Ag, Au. Дипольные моменты найдены равными 1,13; 1,35 и 1,21 ат. ед., а при учете РЭ они понижаются до 1,05; 1,14 и 0,64 соответственно. Обсуждено влияние учета электронной корреляции и РЭ на распределение электронной плотности. Библ. 59.

Р.Ж.Х. N 8, 1996

Auth

1995

Van Wuelen, Christoph

J. Chem. Phys., 1995,

103(9), 3589-99.

(mop.
pam)

(cu. Agt; III)

AuH

1997

128:81448p The AuH $AO^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ system. Fellows, C. E.; Rosenberg, M.; Campos, A. P. C.; Gutierrez, R. F.; Amiot, C. (Laboratorio de Espectroscopia e Laser, Instituto de Fisica, Universidade Federal Fluminense, 24210-340 Niteroi, Brazil). *J. Mol. Spectrosc.* 1997, 185(2), 420-421 (Eng), Academic Press. AuH mol. consts. are calcd. in A-X transitions of 0-0, 1-0, 2-0, 0-1, 1-2, and 2-1. The rotational quantum no. J ranges from 9 in the 2-1 band to 24 in the 0-0 band so that the rotational extension is clearly not as high as in older studies. However, the wavenumber accuracy is more than two orders of magnitude better.

$AO^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$

C.A. 1998, 128, N7

AuH

1997

127: 268265y Relativistic effects on covalent bonding: role of individual valence atomic orbitals. Onoe, Jun (The Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN), 2-1 Hirosawa, Wako, Saitama, Japan 351-01). *J. Phys. Soc. Jpn.* 1997, 66(8), 2328-2336 (Eng), Physical Society of Japan. Relativistic effects on covalent bonding, in particular the role of individual valence AOs, have been investigated for diat. (AuH and Pb₂) and hexafluoride (XF₆: X = S, Se, Mo, Ru, Rh, Te, W, Re, Os, Ir, Pt, Po, Np, U and Pu) mols., by anal. of bond overlap population using both nonrelativistic and relativistic DV-X α MO methods. The contributions of valence AOs to the relativistic effects on covalent bonding for the mols. are clarified. The present approach is applied to interpret the phys. picture of the relativistic effects on bond length of the AuH mol. The origin of the relativistic bond-length contraction is discussed in comparison with previously reported results obtained by bonding energy calcns.

(re, meop.
param)

C.A. 1997, 127, N19

Aull

1998
Franke, Robert; et al;

J. Comput. Chem. 1998,
19 (14), 1596-1603

re, We,
meopem-
pacem

(all. Aull;

III)

Arch

10M-41219

1998

neopen.
packet

Christoph van Wüllen,
J. Chem. Phys., 1998,

109, N2, 392-399.

I^X атомные сечения Au
и eka-gold (элемент 111)

1999

of 39962

AuX

$X = H, F, Cl, Br, O$
Au

u.n.

Δ

(4)

111X

130: 273342n Spectroscopic constants of gold and eka-gold (element 111) diatomic compounds: The importance of spin-orbit coupling. Liu, Wenjian; van Wullen, Christoph (Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität, D-44780 Bochum, Germany). *J. Chem. Phys.* 1999, 110(8), 3730-3735 (Eng), American Institute of Physics. Scalar-relativistic d. functional calcns. in the zeroth-order regular approxn. as well as fully relativistic Dirac-Kohn-Sham calcns. were performed to investigate spectroscopic consts. of the eka-Au (element 111) compds. (111)X (X = H, F, Cl, Br, O, Au) and the dimer of element 111. For calibration, we also report results for homologous Au compds. The bond lengths for the compds. of element 111 are similar but slightly

C.A., 1999, 130, N20

larger than those of the Au compds. Spin-orbit coupling increases the bond length by a few pm. For the hydride and the halides, the force consts. of the eka-Au compds. are generally larger than those of the Au compds. although the dissocn. energy is smaller. The oxide of eka-Au is more strongly bound than the Au oxide. The dimer of element 111 has an open shell instead of a closed-shell electronic structure and is less stable than the Au dimer. The effect of spin-orbit coupling on the dissocn. energy depends on the extent to which spin-orbit coupling is quenched in the mol. This effect was estd. based on a spinor occupation population anal.



Auth
Auth

(Om. 39739)

1999

Jenning Y. Seto, Zulfikar M.,
et al.,

Kor.-Kraus
Fussion.
Energy,
M.P.

J. Chem. Phys., 1999,
110, N24, 11756-11767.

Vibration - rotation. emission
spectra and  combined

isotopomer analyses for the
coinage metal hydrides: CuH ,
 CuD , AgH , AgD , and AuH , AuD

1999

F: AuH

P: 3

132:69565 Ground-state properties of MH, MCl, and M₂ (M = Cu, Ag, and Au) calculated by a scalar relativistic density functional theory.

Suzumura, Toshihisa; Nakajima, Takahito;
Hirao, Kimihiko Department of Applied Chem
Graduate School of Engineering, The University of
Tokyo Tokyo 113-8656, Japan Int. J. Quantum
Chem., 75(4/5), 757-766 (English) 1999 The effects
of relativity on the bond lengths, vibrational
frequencies, dissociation energies, and dipole moments
of the ground states of the group I hydrides MH,
chlorides MCl, and dimers M₂ (M = Cu, Ag, and Au)
have been by relativistic d. functional theory
(DFT) with the B88 plus one-parameter progressive
(BOP) exchange-correlation functional. The

C.A. 2000, 132

relativistic effects were included through a scalar relativistic scheme by the elimination of small components (RESC) of the four-component Dirac spinors. Comparisons made between all-electron results using the nonrelativistic Hamiltonian, with quasi-relativistic effective core potentials (ECP), and results with spin-free RESC scheme. The RESC approach clearly works very well. The bond distances, vibrational frequencies, and dissociation energies show good agreement with the experiment. The expected trends of bond length decrease, harmonic vibrational frequency increase, and dipole moment decrease with relativity are found. Although the dissociation energy increases with the relativity for hydrides and dimers, the reverse trend is observed for chlorides. A quasi-relativist also works well for hydrides. However, ECP gives a rather poor description of chlorides and dimers.

~~Utgang~~ ~~be~~

2001

Aug Aiki, Jg. H.

Aug, Jg. 2 ~~Aug~~

meopem . pac

um n.e.n., J.

8 0 ch. H. 007

(45) 

C.A. 2001, 135, N20

135: 294206q Accurate relativistic Gaussian basis sets for H through Lr determined by atomic self-consistent field calculations with the third-order Douglas-Kroll approximation. Tsuchiya, Takashi; Abe, Minoru; Nakajima, Takahito; Hirao, Kimihiko (Department of Applied Chemistry, Graduate School of Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, Japan 113-8656). *J. Chem. Phys.* 2001, 115(10), 4463-4472 (Eng), American Institute of Physics. Highly accurate relativistic Gaussian basis sets are developed for the 103 elements from H (Z = 1) to Lr (Z = 103). Orbital exponents are optimized by minimizing the at. SCF (SCF) energy with the scalar relativistic third-order Douglas-Kroll approxn. The basis sets are designed to have equal quality and to be appropriate for the incorporation of relativistic effects. The basis set performance is tested by calcns: on prototypical mols., hy-

drates, and dimers of copper, silver, and gold using SCF, Moller-Plesset theory, and the singles and doubles coupled-cluster methods with and without perturbative triples [CCSD, CCSD(T)]. Spectroscopic consts. and dissocn. energies are reported for the ground state of each species. The effects of relativity, electron correlation, and the basis set superposition error (BSSE) are investigated. At the BSSE cor. CCSD(T) level, the mean abs. error relative to expt. in D_e for three dimers (hydrides) is 0.13 (0.09) eV; for R_e the error is 0.024 (0.003) Å, and for ω_e it is 2 (13) cm^{-1} . These illustrative calcs. confirm that the present basis sets fulfill their design objectives.

Акт

2001

Legge, F. Sue et al.,

проверка
метода
расчета
DFT

J. Phys. Chem. A 2001,
105(33), 7905-16

в разнук-
предмет.

● (all. Act;
III)

AuH

[Om 41154]

2001

(H₂) AuH

AuH₃

(H₂) AuH₃

u.k. chem.

u. DFT
pauze

Xue Deng Wang
and Lester Andrews[†],

J. Am. Chem. Soc.
2001, 123, 12899—
— 12900.

AuH, AuH₂ | DM. 4-1 359 | 2002
(H₂)AuH(H₂)AuH₂ Xuefeng Wang et al.,

DF CCKM

4 DFT J. Phys. Chem. 2002, A106,
parent 3744-3748.

AutH₂ -

[DM 41925]

2013

AutH₄ -

Z. Andrews, X. Wang

AutH₂ -

J. Am. Chem. Soc.,

UK chempr 2003, 125, 11751-760

Infrared Spectra
and Structures of the State

CuH_2^- , AgH_2^- , AuH_2^-
and AuH_4^- anions and
the AuH_2 molecule.