

B₂

Douglas H. Herzberg G.

Phys. Rev. 57, 152

B₂

(от науки стелвенной)

1940.

Синтезом. изучение молекул B₂

Сравнен. B₂ и молекул. Вещи и предположений
30. Взаимно. сравнение с 2^й группой B

B₂ спектр. Набл. при разрыве цепи He при 10 микрон
и спектры B₂ в обл. 3300-3400 Å, которая
является группой (по Р и R ветви). BN.

Кабл. 2 ряда $\Delta V = 0$ и $\Delta V = +1$.

Кристаллич. квант. анализ, гал:

$$V = 30546,1 + (929,35 - 2.75V^2) - (10352V'' - 9.58V''^2)$$

Вращат. анализ, гал $B_0^4 = 1,205 \text{ см}^{-1}$ $B_0^1 = 1,155 \text{ см}^{-1}$

и срод. $\tau_0'' = 1,595 \text{ Å}$ и $\tau_0^1 = 1,628 \text{ Å}$

Отношение сил. Сильн. и слаб. линии
линии между 2:1 и 1.5:1, след ядерный

Атом $B_0^1 \gamma = 3/2$. Переход $3\Sigma_u^- - 3\Sigma_g^-$

при добавл. азота появля. 2 новых
линии 3600 и 3220 $\rightarrow$ ВН

При добавл. водорода появля. линии 3415 и 3100 $\rightarrow$ ВН.

1940

$B_2(V; B; \alpha; \tau_e)$

Douglas A.E., Herzberg G.

Cau. J. Research. 1940, 18, A, 165-74

Spectroscopic evidence of the B_2 molecule and
determination of its structure".

C.A.1941, 690⁷

J

B₂

В.К. Торокотов и др

1956

Отчёт 43, ТОЧ

Методико-калентельный
спектр.

(Методика)

B₂⁺

Bp-631-V

1957

Margrave F.L.

A.P.

"J. Phys. Chem"
1957, 61, 1, 38-40.

B_2 | A. A. Padgett (NBS) 1959
 J. Chem. Phys. 30, 1286-91 V-4765
 LCAO-MO, SCF изучение B_2 .
 Показано, что опт. конф. B_2 ява.
 $5\Sigma^-$, а не $3\Sigma_g^-$ основное.
 CAS3 W19 Conf. $3\Sigma_g^-$ и $3\Pi_u$ расщеплены
 17660 B на 1,586 eV.  Внешне конф. $5\Sigma^-$ или
 могут быть ниже при более точн. расч.

B₂ .

at. rocky guess. 1961

Evans W.H.

Preliminary Report on the
Thermodynamic Properties of
Selected Light-Element and
Some Related Compounds.

US.NBS, Report ~~18~~ N7093, 1961.



B₂

Müller H.

1962

жидкости
структуры
Z. Chem., 1962, 2, N 12, 380-1.

В молекулах двухатомных
молекул A₂ из атомов A
равных групп. IX. Класси-
фикация термов и прин-
цип построения.

(см. C₂)

11-519H-d601

24 Б63. Масс-спектрометрическое определение теплоты сублимации бора и энергии диссоциации B_2 . Verhaegen G., Drowart J. Mass spectrometric determination of the heat of sublimation of boron and of the dissociation energy of B_2 . «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 6, 1367—1368 (англ.)

С помощью масс-спектрометра в интервале t -р 1900—2400° К изучено испарение бора. Установлено, что давление пара не зависит от размера эффузионного отверстия и от навески в-ва. Значения ΔH_0^0 для р-ции $B(\text{тв.}) \rightarrow B(\text{газ})$, рассчитанные из зависимости $\lg P$ от $1/T$ ($-127,3 \pm 5$ ккал/г-атом) и с использованием функций свободных энергий для $B(\text{тв.})$ и $B(\text{газ})$ ($-128,1 \pm \pm 2,5$ ккал/г-атом), хорошо согласуются. В паре над бором зарегистрированы также молекулы B_2 . Отношение P_{B_2}/P_B при 2330° К составляет $9 \cdot 10^{-5}$. Рассчитав из спектроскопич. данных термодинамич. потенциал для молекулы B_2 , авторы нашли величину ΔH_0^0 для р-ции $B_2(\text{газ}) \rightarrow B(\text{газ}) + B(\text{тв.})$ ($-62,0 \pm 5$ ккал/моль), которая приводит к значению $D_0^0(B_2) = 65,5$ ккал/моль.

Ю. Ходеев

1982

86

В. 90 - 7052 - V

У. 1983. 24

1964

4 Д98. Термохимические исследования масс-спектрометрическим методом. D r o w a r t J. Etudes thermochimiques par spectrométrie de masse. «Bull. Soc. chim. belg.», 1964, 73, № 5—6, 451—457. Discuss., 458 (франц.)

Методом масс-спектрометрии определены энергии диссоциации двухатомных молекул легких и тяжелых металлов типа B_2 , Al_2 , Ca_2 и т. д. Полученные энергии диссоциации сопоставлены с результатами спектроскопических измерений; согласие в общем удовлетворительное, однако в ряде случаев (C_2 , Pb_2) расхождения весьма большие. Тем же методом измерены энергии диссоциации молекул щелочноземельных окислов и сульфидов MgO , CaO , SrO (все в состояниях $^3\Pi$), ScO ($^4\Sigma$), CaS , SrS , BaS (все в состояниях $^3\Sigma$); эти энергии диссоциации соответ-

см. н.р.б



ср. 1965. 42

 B_2

До

отличия 81?

1

ственно равны 3,34, 3,58, 4,01, 6,85, 3,20, 3,21, 4,10 ($\pm 0,2$ эв во всех случаях). Подчеркивается, что другими методами энергии диссоциации перечисленных в-в еще не измерялись. Наиболее полные измерения и сопоставления со спектроскопич. данными выполнены для окислов, сульфидов, селенидов и теллуридов элементов четвертой группы, при этом согласие со спектроскопич. данными весьма удовлетворительное. В. Быховский

B₂

A-424

1965

Siegel B.

(Do)

Quart. Revs. London
chem. Soc., 1965, 19,
N2, 77-94

B2 I George John. W. 1965

J. Chem. Educ., 42, N3, 152-153.
Инструкция по освое-
нию лабораторной работы
по химии.

(C. Lie)

V-5390

1967

B₂электрон.
структура

12 Д109. Электронная структура молекулы B₂. Ben-
der Charles F. Davidson Ernest R. Electronic
structure of the B₂ molecule. «J. Chem. Phys.», 1967, 46,
№ 9, 3313—3319 (англ.)

Метод конфигурационного взаимодействия применен
для расчета низколежащих состояний молекулы B₂ с
целью определения с большой достоверностью относит.
положения этих состояний. Было рассмотрено 81 состоя-
ние, образованное из конфигураций, в которых в добав-
ление к $1\sigma_g^2$ - и $1\sigma_u^2$ -оболочкам остающиеся 6 электронов
распределены на $2\sigma_g$, $2\sigma_u$, $3\sigma_g$, $3\sigma_u$, $1\pi_u$, $1\pi_u^*$, $1\pi_g$,
 $1\pi_g^*$ -орбиталях во всех возможных комбинациях. Рече-
ты производились при 10 значениях межъядерного рас-
стояния. Нижайшим состоянием оказывается $^5\Sigma^-_u$ -со-
стояние при равновесном расстоянии 2,95 ат. ед.

М. П. Долгушин

09.1967. 12

B₂

1967

6835f Electronic structure of the B₂ molecule. Charles F. Bender and Ernest R. Davidson (Univ. of Washington, Seattle). *J. Chem. Phys.* 46(9), 3313-19(1967)(Eng). The low-lying electronic states of the B₂ mol. have been investigated by using configuration interaction. Eighty-one states were considered and the lowest state was found to be the $^5\Sigma_u^-$ (-49.14567 hartrees at $r_e = 2.95$ bohrs). RCJQ

C.A. 1967. 67.2

B₂

ommuck 3392 1967

Fever R.C.
Herrick C C

u.n.

Report LA-3597 uc-4
Chem. TID -4500'

BCP-A 1158

1968

B₂

Empedocles P.

Theor. chim Acta 1968, 10 (4) 331-6

cul.
noem.

B₂
(с. 42 об)

вс. уч. м.

Anderson A. B.,
Parr R. B.

1970

J. Chem. Phys, 1970,
53, ~ 8, 3375.

● (с. В. М.) И

B_2	$k_e \times 10^5$	$-l_e \times 10^{13}$	$m_e \times 10^{21}$	$k_e m_e / l_e^2$
	4,31(3,58)	19,3(18,1)	72,2(63,7)	0,88(0,70)

B₂

1970

12 Д93. Расчет $^5\Sigma_u^-$ — состояния молекулы B₂.
Kockel B. Eine Berechnung des $^5\Sigma_u^-$ -Zustands des
B₂-Moleküls. «Z. Naturforsch.», 1970, 25a, № 5, 595—
598 (нем.)

Состояние $^5\Sigma_u^-$ молекулы B₂ рассчитано с учетом взаимодействия 25 конфигураций, содержащих 4 электрона из К-оболочек, 4σ- и 2π-электрона из обеих L-оболочек. Слейтеровские детерминанты построены 1) из ортонормированных МО ЛКАО; 2) из АО; способ (2) позволяет оценить характер связи в молекуле B₂. Рассчитаны полная энергия и энергия связи; обсуждается характер кривых электронной плотности вдоль молекулярной оси. М. С. Борисов

расчет
полной энергии
и энергии
связи

00. 1970. 129

B₂

Кб. м.м.
парен

Sutton P. et al.

1970

Int. J. Quant. Chem.
1970, Sympos. N 3,
Part 2, 449.

(Cell. Li₂) III

B₂

Исправление!

Sutton P, et al. 1970

Int. J. Quant. Chem.,
1970, 4, no 6, 633.

к статье: "Методы
расчета молекулы C..." "



(Cu. Li₂)III

1971

Boyd R. F.
Whitehead M. A.

J. Chem. Soc.,

1971, A, 122, 3579.

(Coll. BH) IV



B₂

ан. на об.

y

Сравнение орбит. внутренней и внешней
потенциалов несогласия (Э В).

Система параметров.

М-но	Орбит.	I	II	III	IV	Эксер.
------	--------	---	----	-----	----	--------

B ₂	T_u	9.48		9.82		
	σ_u	11.47		12.22		
	σ_g	20.03		18.46		

B₂

racem
re

Chu S. Y.
Frost A. A.

1981

J. Chem. Phys., 54(2),
764.

(Cu. Li₂) III

1972

B₂

u.h.

ОТЧЕТ ПО НАУЧНО-ИССЛ. РАБОТЕ
ИЗДАИ 1972, 1973, 7

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДОЗ. РАБОТ. И ТОЧНО-
АНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДОЗОВ.



B2

Ulmer W.

1842

kv. lex
nacet

Z. Naturforsch

A 1842, 24(1), 133-7

C.A. 1842. 76. 20

ent Neg, III

B₂

1973.

(c. n.)

Anderson, Alfred B.

J. Chem. Phys.

1973, 58(I), 381-3.

● (cur. LiH; III)

B₂

1973

pacrum

Ze: cur.

1. noet.

Fleischhauer J., et al.

"Extended Nickel Theoric"

"tetrahedron Lett."

1973, 1743, 4273-4274.



(cur. N₂, III)

40222.1940

Ph, TE, Ch

1973

B₂

31469

интервал N 1992

Kulkarni K.S., Sarma C.R., Murthy J.S.

Semi-empirical evaluation of single bond energies of some polyatomic molecules.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1973,
11; N 6, 431-432 (англ.)

0050 мкм

038 038

0048

ВИНИТИ

31101.1811

Ch, Ph, TE

B₂

Смисек 2936

40604

1973

1284

Náray-Szabó G. Decoupled Hartree-Fock
methods. II. Calculation of the potential
curves of diatomic molecules.

"Int. J. Quant. Chem.", 1973, 7, N 3,
569-581

(англ.; рез. франц., нем.)

0993 ББК

973 976

806

ВИНИТИ

B₂

1973

Sinagogla Ektor, Family II, Order.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1973, 95, 317, 9159-9142.

периме
связи

(сч BH; III)

1974.

B₂

расчет
молу.

(см. плотность)

Hirschfeld T.L., et al.

Pol. Phys., 1974, 27, 15
1539-1543.

(см. LiH; III)

40508.6013

TE, Ph, Ch

B₂

40892 112

1974

2118

k p.N 40508.6012

Lie George C., Clementi Enrico.

Study of the electronic structure of
molecules. XXII. Correlation energy
corrections as a functional of the
Hartree-Fock type density and см. прод.

086 087 098 0100 ВИНИТИ

its application to the homonuclear diatomic molecules of the second row atoms.
 "J.Chem.Phys.", 1974, 60, N4, 1288-1296
 (англ.)

		Индекс буквы	Фамилия	Шифр	Категория оплаты
Гонорар. Выработка.	Референт				
	Редактор I				
	Редактор II				
Виза редактора			Виза зав. сект.	Сдача в набор	

1475

В 2

Годовой отчет за 1975
по гос 17-41

(Э.А. спектр)

Лич. ф-т №24
руковод. Тлатевский В.М.

Комплексное исследование
т.д. св.в и малек.
пост.

B-B

num. 4824

1975

Kerr J. A., et al.

Handbook Chem. Phys.
55th Ed., 1974-75

(Do)

50328.6997

Ф, Х, ТС

01921

Вз (сир. наст) * 5-8342

1975

Ab initio

Вер-9037-X

расчет силовых постоянных

некоторых двухатомных молекул.

Перевозчиков В.И., Грибов Л.А.

"Оптика и спектроскопия", 1975, 38,

№ 3, 510-512

(см. Lit; III)

0327 пик

312 314

319

реф

ВИНИТИ

B₂

оттис. А-2948

1975

Радзиг А. А.

м.п. до Всб. "Ммме плазмос"
Г. сел. пост. 1975, вып 2, 3-61.
м., Автоиздатель

1975

 B_2

8 Д135. Применение метода наименьших квадратов в расчетах конфигурационного взаимодействия. Roegen I. Application of a least-squares method in configuration interaction calculations. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 31, № 2, 271—276 (англ.)

Предложен приближенный метод расчета конфигурац. взаимодействия (КВ), основанный на модификации метода наименьших квадратов. Для проведения вычислений по предложенной методике требуются лишь небольшая прямоугольная часть матрицы КВ и ее диагональные элементы. В качестве примера выполнены расчеты нижнего $^1\Sigma_g^+$ -состояния молекулы B_2 в базисе 96 конфигураций.

Резюме

расчет

 $^1\Sigma_g^+$

ф. 1975 № 8

1975

 B_2 Кб. мех.
парем

160481d Application of a least-squares method in configuration interaction calculations. Roeggen, I. (Theor. Chem. Dep., Univ. Oxford, Oxford, Engl.). *Chem. Phys. Lett.* 1975, 31(2), 271-6 (Eng). A least-squares method is proposed for obtaining approx. solns. of large CI matrices. The method requires that only a small rectangular part and the diagonal of the interaction matrix need to be constructed. The method should be particularly useful as a supplement to multiconfiguration SCF procedures. As a test example the method is applied to a 96 configuration calcn. of the lowest ${}^1\Sigma_g^+$ state of the B_2 mol.

C. A. 1975, 82 N 24

B₂

1975

85157t Resolvent technique and Pade approximants in configuration interaction calculations. Roeggen, I. (Theor. Chem. Dep., Univ. Oxford, Oxford, Engl.). *Int. J. Quantum Chem.* 1975, 9(3), 431-43 (Eng). A perturbation approach based on resolvent technique and Pade approximants is proposed. The eigenvalue of interest is part of a soln. of 2 nonlinear algebraic equations. The nonlinear equations are arrived at by considering 2 different expressions of the expectation value of the resolvent of an outer projection of the Hamiltonian. The 1st expression is based on the spectral resolution of the resolvent, and the 2nd one is obtained by a power series expansion analogous to that applied in the derivation of the energy expression in the Brillouin-Wigner perturbation theory. The truncated power series is extrapolated by Pade approximates of type II. The method is tested on a CI calcn. of the energy of the lowest ${}^1\Sigma$ state of the B₂ mol.

kb. mex.
pacrem.

C.A. 1975, 23, 10.

B₂

Sannigrahi A. B.

1975

[(Zē; T); u.n.]

"Indian J. Pure and
Appl. Phys" 1975, 13,
N12, 811-815 (a.u.)

(cu Li₂; III)



B₂

1976

Arce F., et al

An. quim. Real. soc.

esp. fis. y quim. 1976,
72, N^o 6, 505-8.

(partem
cua. uoel.)

(all Li₂; III)

B₂

*U-14835

1976

H₂BO

u.n

(+1) ⊗

85: 114310m Boron atoms, diatomic boron and dihydrogen
oxoboryl molecules: ESR and optical spectra at 4°K.
Graham, W. R. M.; Weltner, W., Jr. (Dep. Chem., Univ.
Florida, Gainesville, Fla.). *J. Chem. Phys.* 1976, 65(4),
1516-21 (Eng). Elemental B was vaporized and trapped in solid
Ar at 4-10°K. The Douglas-Harzburg transition of B₂ was obsd.
in absorption at 3300 Å at 10°K, indicating that the lower Σ
state is the ground electronic state. However, B₂ was not obsd.
via ESR, which is interpreted as support for a $^3\Sigma_g^-$ ground state
with a zero-field splitting greater than ~ 4 cm⁻¹, rather than $^5\Sigma_u^-$
favored by ab initio calcs. The ESR spectrum of B atoms in
solid Ar was also detected. It exhibits axial symmetry and
almost complete quenching of the orbital angular momentum of
the $^2P_{1/2}$ free atom, with $g_{\parallel} = 2.0014(5)$, $g_{\perp} = 1.9645(30)$. The
simple crystal field model was applied in the interpretation of
the g and hyperfine tensors and comparison made with Al and
Ga in Ar. The ESR spectrum of H₂BO, appearing as an

impurity, was obsd. for the 1st time, and its magnetic parameters
detd.

C.A. 1976 85 N16

Х. 1977. № 3 - 14835

1976

B₂

H₂BO

спектр
ЭПР

3 Б258. Атомы B, молекулы B₂ и H₂BO. Спектры ЭПР и оптические спектры при 4° К. ~~G. A. L. H. W. R. M.~~ Weltner W., Jr. A atoms, B₂ and H₂BO molecules: ESR and optical spectra at 4° K. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 4, 1516—1521 (англ.)

Исследованы спектры ЭПР и оптич. спектры элементарного бора, захваченного из парообразного состояния в тв. аргоне при т-рах в интервале 4—10° К. В оптич. спектре при 10° К наблюдали переход Дугласа — Герцберга в B₂ при ~3300 Å, свидетельствующий о том, что низшее Σ-состояние является основным электронным состоянием. Спектры ЭПР молекулы B₂ не наблюдаются. Это подтверждает предположение о том, что основным состоянием с большей вероятностью является ³Σ_g⁻ с расщеплением в нулевом поле больше 4 см⁻¹, а не со-

(+1) 18

Х. 1977. № 3

стояние $^5\Sigma_u^-$ — как следует из неэмпирич. расчетов МО. Получены спектры ЭПР атомов В в тв. аргоне. Спектры характерны для центров с аксиальной симметрией в случае почти полного гашения орбитального углового момента $^2P_{1/2}$ свободного атома. Определены параметры спин-гамильтониана спектров ЭПР атомов В в матрице аргона при 4°K : $g_{\parallel}=2,0012-2,0014$, $g_{\perp}=1,9645$, $A_{\parallel}(^{10}\text{B})=15$; $A_{\parallel}(^{11}\text{B})=45$, $A_{\perp}(^{10}\text{B})=-4$; $A_{\perp}(^{11}\text{B})=-12$ гс. Полученные значения g - и A -тензора объяснены в рамках простой модели крист. поля. Результаты сопоставлены с данными по ЭПР атомов Al и Ga в матрице аргона, также имеющих основное состояние $^2P_{1/2}$. Получены спектры ЭПР молекул H_2VO , присутствующих в системах в кач-ве примеси, и определены параметры спектров: $g=2,0082$, $A(\text{H})=372$, $A(^{11}\text{B})=87$, $A(^{10}\text{B})=28$ Мгц.

В. В. Жуков

B₂

1976

Туревозников В.И. и др

Дит. спектроск. 1976, 41(2),
332 - 4,

(результ.
сп. и др.)

(с. И. 2) III

1976

B2

Pamuk H. Onder

Chim. acta turc. 1976,
4, N3, 224-6 (anus.)

парное
использ.
энергии

с. ВМ-III

61115.1944

Ch, Ph, TC

B2

34469

1976

* 4-15287

Sannigrahi A. B., Mohammad S. Noor.

Contracted basis set extended Hückel calculations on the first-row homonuclear diatomics.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1975, 13, N 12, 811-815 (англ.) 0746 пнк

713 713

7 3 8

ВИНИТИ

1977

 B_2 C_2 N_2 O_2 F_2 CO BF

(расчет энергии связи)

ср. 1978, N 8

8 Д152. Молекулярные расчеты, использующие метод ячеечных орбиталей. Gunnarsson O., Harris J., Jones R. O. Molecular Calculations Using the Muffin-Tio Orbital Method. «Int. J. Quantum Chem.», 1977, Quantum Chem. Symp.», № 11, 71—74 (англ.)

Предложен новый метод расчета электронной структуры кластеров и молекул, основанный на формализме Хоэнберга — Кона — Шэма, в котором обменно-корреляционная энергия представляется в виде функционала от локальной плотности. Одночастичное уравнение Шрёдингера, возникающее в задаче самосогласованного поля, решается методом линейных ячеечных орбиталей Андерсена (Andersen O. K. et al., «Mol. Phys.», 1973, 26, 905). Этот метод использует не зависящий от энергии базис и дает вариационное решение для «ячеечного» потенциала. В методе не используются подгоночных па-

(76)

⊠

раметров — единственными исходными данными являются заряды ядер. Для двух атомных молекул B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , F_2 , CO и BF рассчитаны энергии связи, равновесные расстояния, частоты колебаний и дипольные моменты. Результаты вычислений приведены графически. Они хорошо согласуются с экспериментом и сравнимы с наилучшими имеющимися результатами расчетов с учетом конфигурац. взаимодействия. Тенденции в ряде двухатомных молекул, передаются правильно, а различия между расчетом и экспериментом являются систематическими: рассчитанные энергии связи на 1—2 эв меньше экспериментальных, рассчитанные частоты колебаний на $100\text{—}200\text{ см}^{-1}$ меньше, а рассчитанные равновесные расстояния на $0,1\text{—}0,2$ а. ед. массы больше экспериментальных.

И. Гегузин

B₂

1974

Gunnarsson O, et al

(u.n; γ^-) Phys. Rev. B; Solid
State, 1974, 15 (6),
3027 - 38

(em. H₂; III)

оттиски 9476

1977

B_2

5 Д142. Теория функционала плотности и молекулярная связь. I. Двухатомные молекулы второго периода таблицы элементов. Gunnarsson O., Harris J., Jones R. O. Density functional theory and molecular bonding. I. Firstrow diatomic molecules. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 9, 3970—3979 (англ.)

М.П.

Представлены результаты расчетов распределений электронной плотности, кривых электронных термов, спектроскопич. постоянных и величин полной энергии для основного состояния молекул B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , F_2 , CO и BF с помощью метода решения самосогласованной системы одночастичных ур-ний, у которых потенциал

C_2

(45)

✕

П/3.

9, 1978, 15

(а тем самым эффекты обмена и корреляции электронов) определен через функционал от электронной плотности. Метод решения является альтернативным обычно используемым приближениям Хартри - Фокса и конфигурац. взаимодействия электронов. Кратко рассмотрены детали процедур разложения волн. ф-ций по выбранному базису и других упрощающих предположений. Результаты расчетов для каждой из молекул сопоставлены с другими имеющимися данными; обсуждается точность полученных значений, которая сравнима с аналогичным показателем в методе КВ. Найденные в рамках метода зависимости собств. значений энергии от межъядерных расстояний для ряда состояний молекул анализируются с точки зрения вклада в них отталкивательного и притягивающего взаимодействия зарядов. Рассмотрен вопрос о чувствительности полученных результатов к выбранной форме функционала электронной плотности.

А. Радциг

B₂

omnica 9476

1977

88: 28085x Density functional theory and molecular bonding.
I. First-row diatomic molecules. Gunnarsson, O.; Harris, J.;
Jones, R. O. (Inst. Festkoerperforsch., KFA, Juelich, Juelich,
Ger.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(9), 3970-9 (Eng). The d.
functional equations of Hohenberg, Kohn, and Sham (HKS)
(1964, 65) are solved self-consistently for simple mols. using a
method described originally by O. K. Andersen and R. K.
Woolley (1973). Spectroscopic consts., calcd. for B₂, N₂, F₂, CO,
and BF and for the four lowest lying states of C₂, are in good
agreement with expt. Results are consistently better than
Hartree Fock and comparable with those of configuration
interaction calcs.

M. R.

kl. uet.
pact

(+4) ☒



C.A., 1978, SS, NY

Оттиса 9476 1977

8 Б18. Теория функционала плотности и связыва-
ние в молекулах.. I. Двухатомные молекулы второго
периода. Gunnarsson O., Harris J., Jones R. O.
Density functional theory and molecular bonding. I.
Firstrow diatomic molecules. «J. Chem. Phys.», 1977, 67,
№ 9, 3970—3979 (англ.)

B₂

C₂

N₂

O₂

F₂

CO

BF

(расчет с крив. корр.)



2, 1978, № 8

Рассмотрено применение формализма функционала плотности (ФП) Хоэнберга, Кона и Шэма к молек. задачам. Указанный формализм позволяет свести задачу об N взаимодействующих электронах, находящихся во внешнем потенциале V , к задаче о невзаимодействующих электронах в нек-ром потенциале $V_{\text{эфф}}$. Потенциал $V_{\text{эфф}}$ определяется в ходе процедуры самосогласования. Обсуждена возможность расчета состояний с заданной мультиплетностью. Приведены результаты расчета основных состояний двухатомных молекул B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , F_2 , CO и BF методом ФП. Для C_2 рассмотрены также нижние возбужденные состояния. Получены значения энергий диссоциации, равновесных межъядерных расстояний и частот колебаний, а также карты разностной электронной плотности. Согласие результатов метода ФП с эксперим. данными лучше, чем при расчете методом Хартри—Фока, и соответствует расчетам с учетом конфигурац. взаимодействия.

А. В. Абраменков

B₂

osmuck 5457

1977

Lowe J.P.

J. Amer. Chem. Soc.,

1977, 99, (17), 5557-70.

(y)

B₂⁻

ommuck 5757

1977

Lowe J.P.

Do; Ae;
J J. Amer. Chem. Soc.
1977, 99 (17), 5557-70

B₂

1974

Weltner William Jr.

Int. Conf. Matrix Isol.
Spectroscopy. Diskussions
tag. Dtsch. Bunsen ges.
Phys. Chem. West-Berlin,
1977. Extended abstr.
Berlin, s.a., I64-I69.

сериозн.
директ.
координат

(см. TiO₂, III)

В₂

23 Б20. Основное электронное состояние В₂. Dupuis H., Liu B. The ground electronic state of В₂ «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 6, 2902—2910 (англ.)

Проведены расчеты молекулы В₂ в низших электронных состояниях $^3\Sigma_g^-$, $^5\Sigma_u^-$, $^3\Sigma_u^-$. Базис слейтеровских орбиталей, включающий функции f-типа построен из АО, оптимизированных для систем В и В⁻. После определения Мо методом ССП и многоконфигурац. методом ССП (МКССП), проведено разбиение их на три класса: класс МО остова (1), класс валентных МО, коррелирующих с АО 2s- и 2p-типа (2), и внешние МО (3). Далее найдено МО σ - и π -типа использованы в методе конфигурац. взаимодействия с полным учетом всех конфигураций с валентными МО и с дополнительным учетом всех конфигураций, полученных замещением одной МО класса 2 на МО класса 3. При этом все конфигурации содержат неизменную часть с МО класса 1. В области межъядерных расстояний от 2 до 20 ат. ед. рассчитаны потенциальные кривые, проанализирована чувствительность потенциалов взаимодействия к выбору МО класса 2. Определены спектроскопич. постоянные, фрак-кондоновские факторы и ширины полос для основных переходов. Результаты использованы для интерпретации спектра молекулы В₂.

В. И. Пупышев

1978
12.19.78
Пупышев

14.17.

2.1978, N 23

B₂

ommuu 6174

1948

88: 198089u The ground electronic state of diatomic boron. Dupuis, M.; Liu, B. (IBM Res. Lab., San Jose, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(6), 2902-10 (Eng). An accurate ab initio configuration interaction calcn. has established that the ground electronic state of B₂ is of $^3\Sigma_g^-$ symmetry, and that the Douglas-Herzberg emission system near 3200 Å is due to transitions from the 2nd $^3\Sigma_u^-$ state to the X $^3\Sigma_g^-$ state. The lowest $^5\Sigma_u^-$ state, suggested by previous calcns. as the ground state, is found to lie ~1300 cm⁻¹ above the X $^3\Sigma_g^-$ state. The assignment of the Douglas-Herzberg transition is based on the close agreement between calcd. and obsd. mol. consta. which, with obsd. values in parentheses, are $R_e(^3\Sigma_g^-) = 1.622(1.590)$ Å, $\omega_e(^3\Sigma_g^-) = 988.5(1035.2)$ cm⁻¹, $R_e(2^3\Sigma_u^-) = 1.660(1.625)$ Å, $\omega_e(2^3\Sigma_u^-) = 884.5(929.3)$ cm⁻¹, and $T_e(2^3\Sigma_u^-) = 31438(30546.1)$ cm⁻¹. Further support for this assignment is seen in the close agreement between calcd. and obsd. isotope shifts and intensity distributions. An explanation is given for why the $1^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ transition has not been obsd.

u, n.

C.A. 1948, 88, N26

B_2

основн.
дискр.
состоян.

фр. 1978, № 10

10 Д112. Основное электронное состояние B_2 . Dupuis M., Liu B. The ground electronic state of B_2 . «J. Chem. Phys.», 1978, 68(6), 2902—2910 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе орбиталей слэтеровского типа $6s5p3d1f$ с учетом конфигурац. взаимодействия, а также в многоконфигурац. приближении проведены расчеты B_2 в состояниях $X^3\Sigma_g^-$, а $^5\Sigma_g^-$, $1^3\Sigma_u^-$ и $2^3\Sigma_u^-$. Приведены потенц. кривые для межъядерных расстояний 2—20 ат. ед., энергетич. характеристики, равновесные длины связей, вращательные постоянные, спектроскопич. постоянные ω_e , $\omega_e x_e$, B_e , D_e , энергии, дипольные моменты и силы осцилляторов переходов, факторы Франка — Кондона, величины изотопных сдвигов. Показано, что основным состоянием B_2 является $X^3\Sigma_g^-$ (предполагавшееся ранее основным состояние $^5\Sigma_u^-$ расположено на ~ 1300 см $^{-1}$ выше по энергии). Система полос Дугласа — Герцберга в эмиссионном спектре, располагающаяся в области 3200 Å, отнесена к переходам между состояниями $2^3\Sigma_u^-$ и $X^3\Sigma_g^-$. Рассчитанные характеристики хорошо согласуются с эксперим. данными. Интенсивность перехода $1^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ найдена малой; видимо, по этой причине переход не наблюдается на опыте.

В. Л. Лебедев

1978

6174

Синтез

B₂

ammonia 6441

1978.

расов
фаворит.

сиренев.
д. сиренев.

Meheran S. P., et al.

Indian J. Chem.

1978, A16, 247-49

(see. Li₂, III)

B₂

[Дм. 17578]

1978

Степанов Н. Ф., Серекент

В. Я. и др.

Расчет
суммы
новых
моментов

Вестник Моск. ун-та,
Сер. химия, 1978, 19, №
484-5.

B2

B9-N-6249 1979
Dunlap B.T. et al

и.п.
кв. мех.
парет

J. Chem. Phys., 1979, 41,
N12, 4993-8

Cell Res; III

оттиск 8480

1979

 B_2 C_2 N_2 O_2 F_2

(44)

расчет
кривых
потенц. эи.
равнов. геом.

Ф. 1980. № 1

1 Д111. Канонические модуляционные параметры обменной энергии в молекулярных расчетах $MTX\alpha$. Некоторые гомоядерные двухатомные молекулы второго периода. The canonical exchange energy modulation parameters in molecular $MTX\alpha$ calculations. Some first row homonuclear diatomic molecules., Konowalow Daniel D., McAdon Mark H., Rosenkrantz Marcy E., Maffuid Paul, Freinhar Jack P., Ottman Randall J., Bennett Reid, Tipton Paul. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 65, № 3, 494—499 (англ.)

Предложена новая схема расчета электронной структуры молекул методом $X\alpha$ в ячеечном приближении (MT-модель). Схема ... звана канонической, поскольку в ней предлагается использовать для всех объектов одни и те же значения модуляционных параметров при вычислении обменных потенциалов, а именно $\alpha_I = 2/3$ (модель Кона — Шэма) и $\alpha_{II} = \alpha_{III} = 1$ (модель Слэтера). Схема применена к расчету кривых потенц. энергии, равновесных межатомных расстояний, энергий диссоциации и потенциалов ионизации для основных состояний двухатомных молекул B_2 , C_2 , N_2 , O_2 и F_2 . Библ. 38. И. И. Гегузин

B₂

C₂

N₂

O₂

F₂

2 Б24. Канонические модуляционные параметры обменной энергии в молекулярных расчетах X_α методом рассеянных волн. Некоторые гомоядерные двухатомные молекулы [из элементов] второго периода. Kopowalow Daniel D., McAdon Mark H., Rosenkrantz Marcy E., Maffuid Paul, Freinhar Jack P., Ottman Randall J., Bennett Reid, Tipton Paul. The canonical exchange energy modulation parameters in molecular MTX_α calculations. Some first row homonuclear diatomic molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 65, № 3, 494—499 (англ.)

Предложена схема расчетов потенциальных кривых двухатомных молекул методом $SSH-X_\alpha$ рассеянных волн, основанная на использовании канонич. обменных параметров $\alpha_I = 2/3$ для всех атомных сфер в молекуле и значений $\alpha_{II} = \alpha_{III} = 1$ для межсферной и внешней области молекулы. Разработанная схема обладает тем

расчет
потенц. кривых

2.10.80.112

(4-4) X

1979
отмечен 8480

достоинством, что все расчеты проводятся в обычном приближении «маффин — тин» с касающимися атомными сферами (MTX_α) и не возникает особых проблем с выбором параметров сфер. На примере расчетов потенциальных кривых молекул B_2 , C_2 , N_2 , O_2 и F_2 показано, что в рамках канонич. схемы выбора параметров α рассчитанные равновесные длины связей превышают эксперим. значения не более, чем на 10—15% для всех молекул. Рассчитанные энергии диссоциации удовлетворительно согласуются с экспериментом. Канонич. MTX_α -метод приводит также к надежным значениям энергий ионизации. Результаты проведенных расчетов сопоставлены с другими X_α -расчетами и с экспериментом.

И. А. Тополь

B₂

[ommu 9746]

1979.

Mehandru S. P.
et al.

prob.
receptus,
Le

Proc. Indian Nat.
Sci. Acad., 1979,
A 45, (5), 367-71

● (cu. li₂; III)

B₂

Emmick 8401

1979

Ohwada K.

Spectrochim acta,
1979, A35, 1353-57.

Env. No. 7.

B_2

(-1)

B

O

расчет
основн.

состояния.

оттиска 10261

1049

10 Б21 Деп. Расчеты основного и ряда возбужденных состояний молекулы B_2 и атомов B и O . Павловский И. В., Степанов Н. Ф. «Вестн. МГУ. Химия.» М., 1979. 9 с., ил., библиогр. 5 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 12 янв. 1979 г., № 144—79Деп.)

Рассчитаны основное и ряд возбужденных состояний молекулы $B_2(1,3\Sigma^{\pm}_{u,g}, 1,3\Pi_{u,g}, 1,3\Delta_{u,g})$ методом взаимодействия конфигураций и атомов $B(2P, 2P_i, 2D, 4S)$ и $O(3P, 1D, 1S)$ ограниченным методом Хартри—Фока.

Автореферат

отт. 17519

отт. 10260

(+1)

⊗

х. 078.110

B₂

(common 10481)

1980.

Aufderheide K. H. et al.

Ab. ver.
factes

J. Chem. Phys., 1980, 73,
(4), 1789-1804

3B_2

1980

Jug R, et al.

Theor. chim. acta, 1980,
54, n2, 131-44

кв. мех.
расп.; 8;
м. свдм

суд. FH-III

B₂

[amnu 11245]. 1980.

Klimo V., et al.

кв. мех.
расчет,
дисперс.
предл.

Mol. Phys., 1980, 41,
(3), 477-81.

B₂

of paper 102601

1980

кв. мек,
расер

93: 83785d Calculations of the ground state and a series of excited states of molecular boron and boron and oxygen atoms. Pavlovskii, I. V.; Stepanov, N. F. (USSR). *Vestn. Mosk. Univ*, Ser. 2: *Khim.* 1980, 21(2), 198 (Russ). Ground and a series of excited states were calcd. of B₂ ($1^3\Sigma_{u,g}^{\pm}$, $1^3\Pi_{u,g}$, $1^3\Delta_{u,g}$) by the CI method and of at. B ($2P$, $2P_i$, $2D$, $4S$) and at. O ($3P$, $1D$, $1S$) by the RHF method.



Beary

CA 1980 93 v8

B₂

Оммуек 12815 1981

обзор,
теорет.
расчет
сложек.
орбитали,
геометрия.

Bohm M.C., Gleiter R.

Theor. Chim. acta,
1981, 59 (2), 153-179.

B₂

Ommuck 13408 | 1981

B₂⁺

Gollick H.

Ei, u. n.

J. Phys. B: Atom. and

Mol. Phys., 1981, 14,

N 23, 4457-4467.



(see Be₂; III)

B₂

1981

Klimo Viliam, et al.

потери. Collect. Czech. Chem.

кривые Commun. 1981, 46 (12)

к.б. смх.

3171 - 3178.

расчет

● (см. Gix; III)
(см. Be₂; III)

B₂

1981

Weltner W. Jr.

Gov. Rep. Announce.

Index (U.S.) 1981, 81(14),
2837.

спектр
в единице
V_i; м.н.

● (см. CM₂; III)

Вн (кластеры)

1981

Whiteside R.A.

морей. Diss Abstr. Int. B. 1981,
расий. 42 (3), 1038.

(Вен (кластеры, III))

B₂

Ит. 14999

1982

1 Д116. Численные расчеты Хартри—Фока—Слэтера для двухатомных молекул. Numerical Hartree—Fock—Slater calculations on diatomic molecules. Беске А. Д. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 12, 6037—6045 (англ.)

Предлагается численный метод для расчета молекулярных волн. ф-ций в рамках формализма Хартри—Фока—Слэтера, основанный на определении волн. ф-ций на двумерной сетке в вытянутой сфероидальной системе координат. Задача нахождения энергии сводится тогда к определению собств. значений симметричной матрицы с блок-диагональной структурой. Метод применяется к расчету двухатомных молекул B₂, C₂, N₂, CO, O₂, причем полученные энергии диссоциации, равновесные расстояния и частоты колебаний хорошо согласуются с эксперим. данными и результатами ССП расчетов. Отмечается невозможность—использования предлагаемого метода для многоатомных молекул из-за трудностей построения ортогональных трехмерных координатных систем для многоцентровых конфигураций.

А. А. Зембеков

Кв. мех
расчет
M.P., D₀, V_i

(74) 7

ср. 1983, 18,

NI

B₂

От. 14999

1982

2 Б24. Численные расчеты двухатомных молекул методом Хартри—Фока—Слейтера. Numerical Hartree—Fock—Slater calculations on diatomic molecules. Вессе А. Д. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 12, 6037—6045 (англ.)

Предложен чисто численный метод решения уравнений Хартри—Фока—Слейтера, не использующий ни разложения по базису, ни ячеечной аппроксимации потенциала. Для двухатомных молекул использованы вытянутые

Рф. физ.-
раств.

X. 1983, 19, № 2

сфероидальные координаты, все вычисления проводятся на двумерной дискретной сетке в этих координатах. Проведены расчеты молекул B_2 , C_2 , N_2 , CO , O_2 , F_2 , изучена сходимость решения (~~путем увеличения кол-ва точек в сетке~~). Вычисленные энергии диссоциации, длины связей, частоты колебаний, квадрупольные моменты и функция дипольного момента (для молекулы CO) сопоставлены с результатами хартри-фоковских расчетов, нек-рых подходов, использующих X_α -приближение (дискретный вариац. метод и метод ЛКАО- X_α) и с эксперим. данными. Предложенный метод дает хорошую точность для изученных молекул. Сделан вывод, что приближение Хартри—Фока—Слейтера с удовлетворительной точностью описывает молек. свойства.

М. Гофман

B₂

Omnick 14999 1982

neopem
pacem

97: 115596u Numerical Hartree-Fock-Slater calculations on diatomic molecules. Becke, A. D. (Dep. Phys., McMaster Univ., Hamilton, ON Can. L8S 4M1). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(12), 6037-45 (Eng). A completely numerical method is presented for the calcn. of Hartree-Fock-Slater wave functions for diat. systems. The method is numerical in the sense that no LCAO basis sets are employed. Muffin-tin or other cellular approxns. are also avoided. All mol. functions are defined on a 2-dimensional discrete mesh in prolate-spheroidal coordinate space. The method is math. very simple, and numerical accuracy is easily controlled by changing the no. of mesh points. Calcns. on the mols. B₂, C₂, N₂, CO, O₂, and F₂ are reported; dissocn. energies, bond lengths, vibrational frequencies, and charge moments are compared with recent LCAO results and with expt. The method works well for the mols. considered; the Hartree-Fock-Slater theory describes mol. systems remarkably well.

X

(+5)

C.A. 1982, 97, N14

B₂

Ommeck 14472

1982

97:14313u The emission spectrum of diatomic boron. Bredohl, H.; Dubois, I.; Nzohabonayo, P. (Inst. Astrophys., Univ. Liege, B-4200 Liege, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 93(2), 281-5 (Eng). The emission spectrum of B₂ was reinvestigated under high resolu. Six bands of ¹¹B₂ (0-0, 1-1, 1-0, 2-1, 3-2, and 0-1) as well as 4 bands of ¹⁰B¹¹B (0-0, 1-0, 2-1, and 3-2) were rotationally analyzed. Accurate rotational and vibrational consts. were obtained. The triplet character of the transition (³Σ_u⁻-X³Σ_g⁻) was unambiguously established for the first time and spin-spin interaction const. is obtained for the excited state.

³Σ_u⁻-X³Σ_g⁻

высокое
разрежение.

C. A. 1982, 97, N2.

B₂

Оттиск 14472 1982

12 Д628. Спектр испускания B₂. The emission spectrum of B₂. Bredohl H., Dubois I., Nzohabo-payo P. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 93, № 2, 281—285 (англ.)

С высоким разрешением заново исследован спектр испускания молекулы B₂, возбуждаемый СВЧ-разрядом в смеси He/BCl₃. Выполнен вращательный анализ полос (0—0,1—1,1—0,2—1,3—2 и 0—1) молекулы ¹¹B₂ и 4 полос (0—0,1—0,2—1 и 3—2) молекулы ¹⁰B¹¹B. Определе-

ны колебательные и вращательные спектроскопич. постоянные. Впервые однозначно продемонстрирован триплетный характер перехода ³Σ_u⁻—X³Σ_g⁻. Для возбужденного состояния определена константа спин-спинового взаимодействия. В. С. Иванов

Спектр,
М.П.

Ф. 1982, 18, № 12

B₂

Дмитев 14472 1982

24 Б155. Спектр испускания B₂. Bredohl H., Dubois I., Nzohabonayo P. ~~The~~ emission spectrum of B₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 93, № 2, 281—285 (англ.)

С высоким разрешением заново измерен электронный спектр испускания молекул B₂, возбуждаемый МВ-разрядом через поток гелия (~2 Торр) со следом BCl₃. В области 3170—3400 Å наблюдается семь полос ¹¹B₂ с красным оттенением, образующие три прогрессии — интенсивную Δv=0, более слабую и развитую Δv=+1 и прогрессию Δv=-1, в которой проявляется только первый член. Более слабые полосы отнесены к молекуле ¹⁰B¹¹B. Проанализирована колебательная структура измеренной системы и вращательная структура полос 0—0, 1—1, 0—1, 1—0, 2—1 и 3—2 ¹¹B₂ и 0—0, 1—0, 2—1 и 3—2 ¹⁰B¹¹B. Рассчитаны спектроскопические постоянные молекул B₂ для каждого вибронного уровня,

М.П.

Х. 1982, 19, № 24.

а также равновесные молек. постоянные для основного состояния (см^{-1}) — $\omega_e=1052,74(52)$, $\omega_e x_e=9,94(25)$, $B_e=1,2157(9)$, $\alpha_e=0,0152(8)$, $D_e=6,5(4)$ и возбужденного — $T_e=30574,44(23)$, $\omega_e=937,19(36)$, $\omega_e x_e=2,58(12)$, $B_e=1,1648(11)$, $\alpha_e=0,0122(6)$, $D_e=7,0(4)$. В полосе 0—0 наблюдается спиновое расщепление при низких значениях вращательного квантового числа N . Показано, что постоянная спин-вращательного взаимодействия мала как для верхнего, так и для нижнего состояния, а постоянная спин-спинового взаимодействия в возбужденном состоянии ($\lambda_0'=-0,068 \text{ см}^{-1}$) на порядок больше, чем в основном. Подтверждено отнесение измеренной системы к переходу $^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$. С. Б. Осин



B_2

B_2^+

1982

1 Д127. Расчеты гомоядерных двухатомных молекул первого и второго рядов методами Хартри — Фока и КВ. Hartree—Fock and CI calculations on homonuclear diatomic molecules of the first and second row. McLean A. D., Liu B., Chandler G. S. «Moment. Wave Funct. 2 Meet., Adelaide, 18—24 Febr., 1982». New York, 1982, 90—100 (англ.)

Методами ССП и конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитаны кривые потенц. энергии гомоядерных двухатомных молекул элементов II и III периодов ($B_2 \div Cl_2$) и их однозарядных положит. ионов. В расчетах использованы базисные наборы слэтеровских ф-ций ($6s5p3d2f$) и ($8s6p3d2f$) для атомов II и III периодов соответственно. Пространство конфигураций включало все одно- и двукратные возбуждения валентной обо-

И. Мех.
расчет

(412) ☒

ср. 1983, 18, №1

лочки хартри-фоковской конфигурации. Вклады 4-кратно возбужденных конфигураций в полную энергию оценивались с помощью приближенных соотношений Дэвидсона и Зигбана. Путем численного интегрирования ур-ний Шрёдингера с полученными потенциалами определены колебательно-вращательные термы. Разложение энергий термов в ряд по степеням колебательных и вращательных квантовых чисел позволило получить значения спектроскопич. постоянных. Все расчетные энергии диссоциации занижены по сравнению с экспериментальными; средняя ошибка составила 56% для приближения ССП и 13% — для метода КВ с поправкой Зигбана. Для приближения ССП характерно систематич. занижение длин связей (в среднем на 0,04 Å), завышение частот колебаний (на 10—22%) и адиабатич. потенциалов ионизации (в среднем на 5%). Учет корреляции значительно уменьшает отклонение расчетных значений от экспериментальных.

А. В. Зайцевский

B₂

1982

Ohwada Ken.

расчёт. *J. Chem. Phys.*, 1982,

Ссыл. посыл. 77, N1, 424-428.

и E.

(ссыл. BeB; III)

B₂

Ommeck 13987

1982

Okwada K.,

Кв. мех.

расчёт

колеб.

постоянных

J. Chem. Phys., 1982,

76, N5, 2565-2568.



B₂

Ommuck 16283

1982

Sheepens
cb834

Painter G. S., Averill F.W.,
Phys. Rev. B. Condens.
Matter, 1982, 26, N4,
781-790.

B₂

1983

—18-Б27. Расчеты численным методом Хартри—Фока—Слейтера двухатомных молекул: дополнение. Numerical Hartree—Fock—Slater calculations on diatomic molecules: Addendum. Becke A. D. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 7, 4787—4788 (англ.)

Ответ на замечания Б. И. Данлопа (см. пред. реф.). Данлоп утверждал, что отличия между величинами энергий диссоциации (ЭД), рассчитанными автором для молекул B₂, C₂, N₂, CO, O₂ и F₂ численным методом Хартри—Фока—Слейтера (ХФС) и величинами ЭД, вычисленными Данлопом и сотр. для тех же самых молекул методом ЛКАО-Х α , связаны не с различием в базисах, а с отличающимся учетом эффектов спиновой поляризации. Автором в рамках численного метода ХФС рассчитаны ЭД с учетом спиновой поляризации, в том числе с вариацией 1s-орбиталей. Показано, что величины ЭД, рассчитанные в таком приближении численным методом ХФС, с точностью лучше, чем 0,1 эВ, согласуются с ЭД, рассчитанными методом ЛКАО-Х α

расчет

X, 1983, 19, N 18

в базисах сгруппированных гауссовых функций, и обнаруженное Данлопом противоречие в результатах расчета ЭД методом ХФС с использованием различных базисов полностью устраняется. И. А. Тополь



B₂

1983

Huxley P., Murrell J. N.

потенц. J. Chem. Soc., Faraday

ф-ция
основн.
соед.

Trans 2 1983, 79 (2),

323-328.

(см. Li; III)

B₂

1984

Politzer Peter.

расчёт

J. Chem. Phys., 1984,
80, n1, 380-382.

E

жесткая
система

● (сер. Лиз; III)

B₂

1985

Гусейнов И.И., Мурза-
лов Т.М. и др.

теор. Множеств. рождение и
реакт. структура молекул.
Баку, 1985, 65-66.

● (св. В₂; III)

B₂

1985

3 Д144. Двумерные, полностью численные молекулярные расчеты. IV. Результаты расчетов методом Хартри — Фока — Слэтера двухатомных молекул, включающих атомы второго периода. Two-dimensional, fully numerical molecular calculations. IV. Hartree-Fock-Slater results on second-row diatomic molecules. Laaksonen Leif, Sundholm Dage, Pyykkö Pekka. «Int. J. Quantum Chem.», 1985, 27, № 5, 601—612 (англ.)

Полностью численным методом Хартри — Фока — Слэтера, предложенным ранее (см. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, 6037), проделаны двумерные расчеты молекул B₂, C₂, N₂, CO, O₂, F₂ и BF. Найдены полные и орбитальные энергии, равновесные длины связей, энергии диссоциации, квадрупольные моменты и ф-ции дипольного момента. Выполнено несколько тестов по оценке влияния неполноты используемых базисов на точность неэмпирич. расчетов и даны критерии оценки точности проводимых расчетов. Ч. III «Chem. Phys. Lett.», 1983, 96, 1. Библ. 21. А. И. К.

⊗ (+6)

расчет
структур

ср. 1986, 18, №3

B₂

1985

4 Б1042. Численные молекулярные расчеты в двумерном пространстве. IV. Результаты расчетов двухатомных молекул, образованных элементами второго периода, методом Хартри — Фока — Слейтера. Two-dimensional, fully numerical molecular calculations. IV. Hartree — Fock — Slater results on second-row diatomic molecules. Laaksonen Leif, Sundholm Dage, Pyykkö Pekka. «Int. J. Quantum Chem.», 1985, 27, № 5, 601—612 (англ.)

расчет
структур

Методом Хартри — Фока — Слейтера (ХФС) с численным интегрированием двумерного уравнения Шредингера с $X \alpha$ -потенциалом в системе эллиптич. координат рассчитаны полные и орбитальные электронные энергии, спектроскопич. постоянные, вириальное отношение и нек-рые одноэлектронные св-ва молекул B₂, C₂, N₂, CO, O₂, F₂ и BF в основном электронном состоянии. Результаты расчетов сопоставлены с известными лит. данными аналогичных расчетов св-в вышеуказанных молекул методом ЛКАО- $X \alpha$ в базисе сгруппированных

17(+6)

X.1986, 19, 14

гауссовых ф-ций. Установлено, что ошибка, обусловленная ограниченностью базиса в приближении ЛКАО-Х α , для исследованных молекул проявляется в третьем знаке после запятой (в ат. ед.) для полной энергии и в четвертом знаке после запятой для орбитальных энергий соотв. Исследованы также обусловленные конечным базисом ошибки в величинах равновесных расстояний и электронных мультипольных моментов. Сообщ. 3 см. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 96, 1.

B₂

1985

[103: 11723] Two-dimensional, fully numerical molecular calculations. IV. Hartree-Fock-Slater results on second-row diatomic molecules. Laaksonen, Leif; Sundholm, Dage; Pyykko, Pekka (Dep. Phys. Chem., Abo Akad., 20500 Turku, Finland). *Int. J. Quantum Chem.* 1985, 27(5), 601-12 (Eng). For B₂, C₂, N₂, CO, O₂, and BF, total and orbital energies, dissocn. energies, bond lengths, and electronic expectation values and moments were obtained in the described two-dimensional Hartree-Fock-Slater calens. Basis-set truncation errors are discussed. Comparisons are made with other existing calens. Improved accuracy in the dissocn. energies, bond lengths, and electronic multipole moments was obtained, which can be used in future assessment of basis set errors.

meop.
pacrim

(+5) ~~AD~~

C.A. 1985, 103, N2

B₂

(OM-31102)

1985

Ragharachari K.,

Do;

J. Chem. Phys., 1985,
82, N10, 4607 - 4610.

B₂

[Om. 21456]

1985

Rozendaal A., Baerends E.J.

meep.
pacem
M.N.

Chem. Phys., 1985, 95,
N1, 57-91.

B₂

1985

Schmidt M.W., Lam

M.T. Brenda, et al.

Расчет
основного
и ряда
возбуж-
денных
состоян.

Theor. chim. acta,
1985, 68, N1, 69-86.

● (с.с. H₂; III)

B₂

1986

Becke A.D.

мюп.
рарем
Ze, We, De
оч.
сөөр.

Phys. Rev. A: Gen. Phys.
1986, 33 (4), 2786-8.

(сөөр. M₂; III)

B₂

1986.

Thakkar Ajit J.,
Sharma B. S., et al.

Хим.
Физ.

J. Chem. Phys. 1986,
85(5), 2845-9.

(Cor. Li₂; III)

B_2^{K+}

23273

1986

Wells B.H., Wilson S.

Рассчет
низко-
лежащ.
электрон.

состоян.

H_2^+, HeH_2^+

использ. хар. гуд B_2

J. Phys. B: Atom.
and Mol. Phys., 1986,
19, N1, 17-32.

(см. H_2^+ ; III)

B₂

Ом. 25528

1987

➤ 5 Д71. Природа основного состояния B₂, C₂, N₂ в методе аппроксимирующего квазичастичного функционала плотности. Безносюк С. А., Минаев Б. Ф., Кульжанов А. Т., Мулдахметов З. М. «Докл. АН СССР», 1987, 292, № 2, 379—383

Неэмпирическим методом аппроксимирующего квазичастичного функционала плотности проведен вариационный расчет основного состояния молекул B₂, C₂, N₂ в диапазоне длин связи (R) 1,5÷10 a_0 . Обнаружена перестройка электронной структуры молекул B₂ и C₂ в окрестности равновесной длины связи. Электронный, «фазовый» переход в основном состоянии этих молекул классифицирован как переход Мотта с изменением

(М.П.)

(+2) 

ф. 1987, 18, № 5

типа электронной корреляции по известной схеме: электронная «жидкость» (α -терм) — электронный «кристалл» (β -терм). Для молекулы B_2 основное триплетное состояние в области минимума энергии соответствует α -терму. При укорочении длины R связи на $0,2 a_0$ относительно R_0 происходит $\alpha \rightarrow \beta$ трансформация основного состояния, причем β -терм идентифицирован как триплетный бирадикал. В случае C_2 α -, β -термы — синглеты, β -терм идентифицирован как бирадикал с антиферромагн. порядком локализованных спинов. Для молекулы N_2 основное состояние соответствует синглетному α -терму. Рассчитанные значения равновесных параметров молекул B_2 , C_2 , N_2 хорошо согласуются с экспериментом. Обсуждена химическая реакционная способность молекул B_2 и C_2 в связи с α — β -трансформациями их основного состояния.

Автореферат

B_2 (Am. 25528)

1987

106: 220218z Nature of the ground states of diatomic boron, diatomic carbon, and molecular nitrogen obtained using the approximate quasiparticle density functional method. Beznosyuk, S. A.; Minaev, B. F.; Kul'zhanov, A. T.; Muldakhmetov, Z. M. (Karagand. Univ., Karaganda, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1987, 292(2), 379-83 [Phys. Chem.] (Russ). The ground-state energies of B_2 , C_2 , and N_2 were calcd. by the approx. quasiparticle d. functional method (B. and V. P. Fadin, 1980). The calcd. ground-state dissoci. energy, equil. interat. distance, and zero-point vibrational frequency of B_2 , C_2 , and N_2 are compared with Hartree-Fock and MC-SCF calcns. as well as with exptl. data. The results agree well with expt. data. The ground state is represented by intersecting triplet α - and β -type states for B_2 , by superimposing singlet α - and β -type states for C_2 , and by α -type state for N_2 , where α and β correspond to electron-liq.- and Wigner-type correlation.

моп. паvem
оч. соcmоrеh.

(72) ☒

C.A. 1987, 106, N 26

B₂

Ом. 25528

1987

⊕13 Б1031. Природа основного состояния B₂, C₂, N₂ в методе аппроксимирующего квазичастичного функционала плотности. Безносюк С. А., Минаев Б. Ф., Кульжанов А. Т., Мулдахметов З. М. «Докл. АН СССР», 1987, 292, № 2, 379—383.

основн.
состоян.

(42) ⊗

Х. 1987, 19, N 13

B₂

1987

У 7 Л179. Возбужденные колебательные уровни основного состояния молекулы B₂: переход $A^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$. Excited vibrational levels of the ground state of B₂: the $A^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ transition. Bredohl H., Dubois I., Mélen F. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 121, № 1, 128—134 (англ.)

С высоким разрешением получены спектры испускания $A^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$, $0 - v''$ ($v = 12 \div 15$) молекулы $^{11}\text{B}_2$. Вращательный анализ полос позволил более точно, чем в предшествующих работах, определить колебательные и вращательные постоянные состояния $X^3\Sigma_g^-$. Авторы не смогли объяснить отсутствия в спектре полос с $4 < v'' < 12$, но высказали предположение, что этот факт вызван возмущением состояний $X^3\Sigma_g^-$ состояниями $^3\Pi_u$ или $^1\Pi_u$.

М. А.

М. А.

ф. 1987, 18, № 7

B₂

1987

13 Б1198. Возбужденные колебательные уровни основного состояния B₂. Переход A³Σ_u⁻—X³Σ_g⁻. Excited vibrational levels of the ground state of B₂: The A³Σ_u⁻—X³Σ_g⁻ transition. Bredohl H., Dubois I., Mélen F. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 121, № 1, 128—134 (англ.)

Выполнен анализ вращат. структуры полос 0—12, 0—13, 0—14 и 0—15 перехода A³Σ_u⁻—X³Σ_g⁻ в спектре испускания молекулы B₂, возбуждаемом в микроволновом разряде через смесь He (2 мм) со следами BCl₃. Значения ν₀, B', D' (·10⁶), B'', D'' (·10⁶) (в см⁻¹): полосу 0—12—19014,323; 1,16568; 6,32; 1,00114; 7,04; 0—13—18211,093; 1,16392; 4,84; 0,98563; 5,09; 0—14—17423,081, 1,16616; 6,41; 0,97502; 6,88; 0—15—16649,825; 1,16526; 5,66; 0,96111; 6,35. Равновесные молек. постоянные B₂ (в см⁻¹): состояние X³Σ_g⁻—ω_e=1059,68, ω_ex_e=15,66, ω_ey_e=1,489, ω_ez_e=0,0687, B_e=1,2211, α_e=0,02102, γ_e=2,75·10⁻⁴, D_e=6;55·10⁻⁶; состояние A³Σ_u⁻—T_e=30576,66, ω_e=937,22, ω_ex_e=2,59, B_e=1,1689, α_e=0,01439, D_e=6,95·10⁻⁶. В. М. Ковба

М.П.

X. 1987, 19, №13

B₂

(Om. 25844)

1987

возражен.
копиям.
уровни
основн.
состоян.,
 $A^3\Sigma^- - X^3\Sigma^-$

Bredohl H., Dubois J.,
Mélen F.,

J. Mol. Spectrosc.,
1987, 121, N1, 128-134



"B₂

1987

$A^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$

$v'' \leq 15$

Франц-
Ананы

C.A. 1987, 106, N 10

106: 75305u Excited vibrational levels of the ground state of diatomic boron: the $A^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ transition. Bredohl, H.; Dubois, I.; Melen, F. (Inst. Astrophys., Univ. Liege, B-4200 Cointe-Liege, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 121(1), 128-34 (Eng). A better description of the electronic ground state of $^{11}\text{B}_2$ was obtained from the rotational anal. of 4 $0-v''$ bands ($v'' = 12-15$) of the $A^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$.

B₂

[Om. 26905]

1987

Knight L.B., Jr.,
Gregory B.W., et al.,

спектр
в

J. Amer. Chem. Soc.,

1987, 109, N 12, 3521-3525.

лампине,
сравн.
с пром.
ab initio
расчетами

B₂

1987

Semerov S. G.

Vestn. Leningr. Univ.,

Ser. 4: Fiz. Khim.

1987, (4), 102-4.

ab initio
calculations

(see M_2^+ ; III)

1989

24 Б1054. Сильносвязанные многократно возбужденные состояния B_2^+ и B_2 . Strongly bound multiply excited states of B_2^+ and B_2 / Bruna Pablo J., Wright James S. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 2.— С. 1126—1136.— Англ.

Методом конфигурац. вз-вия в расширенном базисе АО трехэкспонентного типа, дополненном d -функциями и в ряде случаев диффузными s и p -функциями, рассчитаны низколежащие электронные состояния молекул B_2^+ и B_2 . Расчеты охватывают область межъядерных расстояний от 2,5 до 5 ат. ед. и выполнены для Σ , Π и Δ состояний, отвечающих трем низшим диссоциац. пределам иона B_2^+ ; в случае B_2 рассмотрены лишь двукратно возбужденные к основному состоянию. Для всех состояний оценены молек. постоянные T_e , R_e , ω_e и D_e . В случае иона основным является состояние $^2\Sigma_g^+$ ($R_e = 4,015$ ат. ед., $\omega_e = 423$ см $^{-1}$, $D_e = 1,94$ эВ), а первое возбужденное состояние с $T_e = 0,3$ эВ имеет тип $^2\Pi_u$. Подробно обсужден конфигурац. состав волновых ф-ций и его влияние на молек. постоянные. В. И. Пупышев

B_2^+

B_2

М.П.

X. 1990, № 24

1989

111: 181136c Strongly bound multiply excited states of the boron diatomic ion($1+$) and the boron dimer. Bruna, Pablo J.; Wright, James S. (Ottawa-Carleton Chem. Inst., Carleton Univ., Ottawa, ON Can. K1S 5B6). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(2), 1126-36 (Eng). The potential curves, transition energies (T_e), and spectroscopic consts. (R_e , ω_e) of several low-lying electronic states of B_2^+ and selected doubly excited states of B_2 are given. The data were obtained by using a multiref. single- and double-excitation (MRSD) CI approach and a triple-zeta plus polarization AO basis set. The B_2^+ ground state, which is $X^2\Sigma_g^+$, shows a rather shallow potential curve ($R_e = 4.015$ bohr, $\omega_e = 423$ cm^{-1}) when compared with that of $X^3\Sigma_g^-$ of B_2 ($R_e = 3.00$ bohr, $\omega_e = 1051$ cm^{-1} , exptl.). The 1st excited state of B_2^+ , namely $1^2\Pi_u$, lies at $T_e = 0.30$ eV. Moreover, double excitations relative to $X^2\Sigma_g^+$ are essential for the description of a large no. of excited states, such as $\sigma_u\sigma_g \rightarrow \pi_u^2(1^4\Sigma_u^-, 1^2\Sigma_u^-, 1^2\Delta_u, 1^2\Sigma_u^+)$ and $\sigma_u^2 \rightarrow \pi_u^2(1^4\Sigma_g^-, 1^2\Delta_g, 1^2\Sigma_g^+)$. Similarly, $2^2\Pi_u$ arises from the triple excitation $\sigma_u^2\sigma_g \rightarrow \pi_u^3$. In the same order as given above, such multiple excitations lead to a significant gain in bond strength (i.e., shorter R_e , larger ω_e) as a result of the simultaneous depopulation and population of strongly antibonding and bonding MOs, resp. For neutral B_2 , similar features were obsd. for the excitation $\sigma_u^2 \rightarrow \pi_u^2$ relative to $X^3\Sigma_g^-$ (leading to $3^1\Sigma_g^+$) and $1^3\Pi_u$ (leading to $2^3\Pi_u$). As a

B_2
 B_2^+

M.N., Lb. Mex.
 Pacem

C.A. 1989, 111, N20

result of the loss of the 2 π_u electrons, the ground state dissocn. energy (D_e) of $B_2^+(X^2\Sigma_g^+)$, with a calcd. value of 1.94 eV, is ~ 1.12 eV smaller than the exptl. D_e of $B_2(X^3\Sigma_g^-)$.

B₂

1989

20 Б1034. Неэмпирический расчет постоянных сверхтонкого взаимодействия для B₂. Ab initio calculation of the hyperfine coupling constants in B₂ / Carmichael Ian // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 2.— С. 1072—1078.— Англ.

В расширенном трехэкспонентном базисе ОГТ [14s9p4d1f/8s5p4d1f] неограниченным методом Хартри—Фока с послед. использованием связанных кластерных разложений или конфигурац. взаимодействия рассчитаны изотропная и дипольная постоянные A_{iso} и A_{dip} сверхтонкого взаимодействия для состояния $x^3\Sigma_g^-$ молекулы B₂ при равновесной геометрии. Найдено, что для A_{dip} удовлетворит. результаты получаются уже в методе ССП (14,4, при эксперим. оценке — 13 Мгц). Изотропная постоянная получена двумя способами; при этом отмечено, что помимо корреляции необходимо учитывать влияние колебаний из-за сильной зависимости этой величины от межядерного расстояния, при этом $A_{iso} = 14,1$ (эксперим. 15 Мгц). П. В. Ганелин

М.П.

Х. 1990, № 20

1989

 B_2

17 Б1051. Неэмпирический расчет постоянных сверхтонкого взаимодействия в B_2 . Ab initio calculation of the hyperfine coupling constants in B_2 / Carmichael I. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 2.— С. 1072—1078.— Англ.

На базе традиц. вариационных методов и методов теории возмущений с использованием неограниченного метода ССП и поправок на связанные кластеры разных порядков исследована молекула B_2 в состояниях $^3\Sigma_g^-$ и $^5\Sigma_u^-$. Приведены значения молек. постоянных, особое внимание уделено величинам изотропной и дипольной констант сверхтонкого взаимодействия, их зависимости от межъядерного расстояния и от метода учета корреляции.

В. И. Пупышев

М.П.

X. 1990, N 17

B₂

(DM-32740)

1989

Dingle T. W., Muzinaga S.,
et al.,

(35-)
(29) J. Comput. Chem. 1989, 10,
N6, 753-769.

Contraction of the Well-
Tempered • Gaussian Basis

Sets: The First-Row
Diatomic Molecules.

B₂⁴⁻

от 32488

1989

1 4 Б1016. Неэмпирическое изучение тенденций связывания в 14-электронных двухатомных системах от B₂⁴⁻ до F₂⁴⁺. Ab initio study of bonding trends among the 14-electron diatomic systems: from B₂⁴⁻ to F₂⁴⁺ / Pyykkö P. // Mol. Phys.— 1989.— 67, № 4.— С. 871—878.— Англ.

Методом ССП в базисе сгруппированных гуассовых ф-ций 6—31 ГФ* рассчитаны низшие синглетные состояния 14-электронных двухатомных систем, включающих от Н до Сl. Для 32 систем на потенциальных кривых обнаружены локальные минимумы. Определены равновесные межъядерные расстояния и колебат. частоты. Результаты сопоставлены с имеющимися эксперим. данными и с данными предшествовавших расчетов. Для 13 систем (B₂⁴⁻, BC³⁻, BeC⁴⁻, BeN³⁻, BeO²⁻, BeNa⁺, BeMg²⁺, FO³⁺, F₂⁴⁺, NeP³⁺, NeS⁴⁺, LiMg⁺ и NNe³⁺) данные получены впервые. Для указанных положит. ионов, а также для ряда карбидов с помощью теории возмущений Меллера—Плессета 2-го порядка рассчитана корреляц. поправка к энергии. А. А. Сафонов

М.А.



(412)

X. 1990, № 4

B₂

(Om 32042)

1989

meopen.
pacem

/ 111: 45514x Strongly bound doubly excited states of diatomic molecules. Wright, James S.; Bruna, Pablo J. (Ottawa-Carleton Chem. Inst., Carleton Univ., Ottawa, ON Can. K1S 5B6). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 156(5), 533-5 (Eng). Theor. calcns. are given which show the existence of strongly bound doubly excited states. These states show significant decreases in R_e and increases in ω_e compared to the ground state. Examples include B₂ and B₂⁺, but the discussion is general and may lead to the discovery of many such states.

~~(41)~~ B₂⁺

C.A. 1989, 111, N6

B₂⁺

OM 32042)

1989

~~Wright James S.,~~

Berna Pablo J.

meopem.
pacrêm

Chem. Phys. Lett.

1989, 156 (5), 533-5.

●
(cc. B₂; III)

Вз

DM-33950

1990

Бессонова С.М., Фрим-
Кельштейн А.И.

Оценка

и.п.

Ил. прик. спектро-
скопии 1990, 52, N3,
451-454.

B₂

B₂⁺, B₂⁻, B₂²⁺

M.A.

neop. paei

Om. 35061

1990

114:59243n Doubly excited states of diatomic boron molecule and ions (B₂, B₂⁺, B₂²⁺ and B₂⁻). Bruna, Pablo J.; Wright, James S. (Ottawa-Carleton Chem. Inst., Carleton Univ., Ottawa, ON Can. K1S 5B6). THEOCHEM 1990, 69, 243-52 (Eng). Extensive multireference (single and) double configuration-interaction (MRD-CI) calcs. carried out on B₂, B₂⁺ and B₂²⁺ predict the existence of several doubly excited states generated by the excitation $\sigma_u^2 \rightarrow \pi_u^2 \rightarrow \sigma_g \pi_u$. The abundance of these strongly bound mol. states having short R_e and high ω_e results from the fact that the first excited at. states are of the type sp² (B) and sp (B⁺). In the dication B₂²⁺, double excitation is essential for the existence of several metastable states, some of them with deep potential wells (e.g. 2.83 eV for 1³Σ_g⁻). The anion B₂⁻ shows no less than eight stable states below neutral B₂; here, the doubly excited states are resonant. Photodetachment from X⁴Σ_g⁻[(σ_g²σ_u²)σ_gπ_u²] of B₂⁻ should be instrumental for the exptl. characterization of the relative stabilities of X³Σ_g⁻(σ → ∞), 1⁵Σ_u⁻(σ_u → ∞) and 1³Π_u(π_u → ∞) in neutral B₂. Several optical transitions are proposed for future exptl. studies of the doubly excited states presented in this work. In the case of B₂⁻, photodetachment from stable states of type (σ_g²σ_u)σ_g^mπ_uⁿ (with m = n = 4) may play an important role in the exptl. detection of several strongly bound states of B₂.

C.A. 1991, 114, N8

0M35 061

1990

3 Д115. Дважды возбужденные состояния B_2 , B_2^+ , B_2^{2+} и B_2^- . Doubly excited states of B_2 , B_2^+ , B_2^{2+} and B_2^- / Bruna Pablo J., Wright James S. // J. Mol. Struct. Theochem.— 1990.— 210.— С. 243—252.— Англ.

Методом НИК-КВ с учетом однократных и двойных возбуждений исходных конфигураций проведены расчеты B_2 , B_2^+ и B_2^{2+} . Предсказано существование нескольких ~~дважды~~ возбужденных состояний, образованных при возбуждении $\sigma_u^2 \rightarrow \pi_u^2$ или $\sigma_u^2 \rightarrow \sigma_g \pi_u$ и обусловленных тем фактом, что первые возбужденные атомные состояния имеют тип sp^2 (В) и sp (B^+). Указанные сильно связанные молекулярные состояния имеют короткие R_e и высокие ω_e . В B_2^{2+} двойные возбуждения приводят к существованию нескольких метастабильных состояний, некоторые из них с глубокими потенц. минимумами (напр., 2,83 эВ для $I^3\Sigma_g^-$). В анионе B_2^- обнаружено не менее 8 стабильных состояний, ниже, чем состояние B_2 . В этом анионе обнаружены резонансные дважды возбужденные состояния.

Н. В. В.

B_2
 B_2^+ , B_2^{2+}

М.П.

ср. 1991, №3

B₂

Дм. 33761

1990

20 Б1035. Теоретическое изучение потенциалов ионизации B₂. Theoretical study of the ionization potentials of B₂ / Bruna Pablo J., Wright James S. // J. Phys. Chem.— 1990.— 94, № 5.— С. 1774—1781.— Англ.

В трех базисах гауссовых орбиталей методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений относительно исходного набора конфигураций рассчитаны потенциальные кривые состояний типа $2,4\Sigma_u^-$, $4\Sigma_g^-2\Sigma_g^+$, $2\Pi_u$, $4\Pi_g$ молекулы B₂⁺ и состояний $1^3\Pi_u$, $1^5\Sigma_u^-$, $X^3\Sigma_g^-$ молекулы B₂. Найдено, что основным состоянием молекулы B₂⁺ является Σ_g^+ с близким по энергии первым возбужденным состоянием $2\Pi_u$ ($T_e=0,25$ эВ) в отличие от полученного ранее экспериментально и теоретически обратного расположения уровней [Hanley L., Anderson S. L., Whitten I. L. // J. Chem. Phys.— 1988.— 92.— С. 5803]. Приведены значения R_e , ω_e и D_e для этих состояний и основного

М.П.

X.1990, №20

состояния B_2 . Рассчитаны вертикальные и адиабатич. ПТ ионизации из трех нижних состояний B_2 в различные конечные состояния, а также соотв-щие значения факторов Франка — Кондона. Отмечено, что для проверки расчета необходимы дополнит. эксперим. результаты.

П. В. Ганелин

B₂

DM 33761

1990

112: 125540p Theoretical study of the ionization potentials of boron dimer. Bruna, Pablo J.; Wright, James S. (Ottawa-Carleton Chem. Inst., Carleton Univ., Ottawa, ON Can. K1S 5B6). *J. Phys. Chem.* 1990, 94(5), 1774-81 (Eng). Extensive MRD-CI calcns. carried out with a contracted 6s5p2d1f Gaussian basis set indicate that B₂⁺ has a X²Σ_g⁺ (σ_g²σ_u²σ_g) ground and a low-lying 1²Π_u(σ_g²σ_u²π_u) state (T_e = 0.25 eV). The computed dissociation energies D_e are 1.90 eV for X²Σ_g⁺ and 1.65 eV for 1²Π_u. The adiabatic ionization potentials (IP) of B₂ from X³Σ_g⁻(σ_g²σ_u²π_u²) into X²Σ_g⁺(π_u² → σ_g, ∞) and into 1²Π_u(π_u → ∞) are 8.99 and 9.24 eV, resp.; both results are expected to underestimate the true values by about 0.15 eV. The present data do not support recent exptl. and ab initio results from Hanley, et al., (1988). Those authors reported a ²Π_u ground state, with a D_e of 0.8 ± 0.6 eV (0.7 eV) and an adiabatic IP (X³Σ_g⁻ → ²Π_u) of 10.3 eV (8.9 eV), with values in parentheses corresponding to their ab initio results. Since the photoelectron spectrum of B₂ (not yet recorded to our knowledge) represents a valuable and alternative exptl. technique for the spectroscopic characterization of low-lying states of B₂⁺, the IP's are investigated here for one-electron ionization processes having X³Σ_g⁻, 1⁵Σ_u⁻, and 1³Π_u of B₂ as lower state. The corresponding Franck-Condon factors are also reported.

I₀, D₀;
parent

C.A. 1990, 112, N14

B₂

DM 33761

1990

8 Д117. Теоретическое исследование потенциалов ионизации B₂. Theoretical study of the ionization potentials of B₂ / Bruna Pablo J., Wright James S. // J. Phys. Chem.— 1990.— 94, № 5.— С. 1774—1781.— Англ.

Расчеты, проведенные в рамках метода НИК—КВ в сгруппированном гауссовском базисе 6s5p2d1f, показали, что ион B₂⁺ имеет основное состояние X²Σ_g⁺(σ_g²σ_u²σ_g) и низколежащее состояние 1²Π_u(σ_g²σ_u²π_u) (T_e=0,25 эВ). Рассчитаны энергии диссоциации: 1,90 эВ для X²Σ_g⁺ и 1,65 эВ для 1²Π_u. Потенциалы адиабатич. ионизации B₂ из X³Σ_g⁻ в X²Σ_g⁺ и в 1²Π_u составляют 8,99 и 8 9,24 эВ соответственно. Предполагается, что оба эти результата завышены на ~0,15 эВ. Получены потенциалы ионизации для одно-электронных процессов ионизации, имеющих низшие состояния X³Σ_g⁻, 1⁵Σ_g⁻ и 1³Π_u молекулы B₂. Определены соответствующие факторы Франка—Кондона.

Н. В. В.

(9)

ф. 1990, № 8

B₂⁻

№ 34357

1990

113: 13S752e Electronic structure of the boron (B₂⁻) radical. Bruna, Pablo J.; Wright, James S. (Ottawa-Carleton Chem. Inst., Carleton Univ., Ottawa, ON Can. K1S 5B6). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1990, 23(13), 2197-215 (Eng). The stability and structure of 10 states of B₂⁻ have been investigated with highly correlated MRD-CI wavefunctions. This radical possesses the largest no. of stable states (pos. electron affinity) so far reported for a diat. anion: no less than eight states lie below B₂. The B₂⁻ ground state is X⁴Σ_g⁻[(σ_u²)σ_gπ_u²]. Two other quartets are also stable with T_e values of 1.22 and 1.63 eV, resp. The predicted lifetimes τ₀ for the transitions X⁴Σ_g⁻ ← 1⁴Σ_u⁻(σ_g → σ_u) and 1⁴Π_g ← 1⁴Σ_u⁻(σ_g → π_u) are 195 ns and 19 μs, resp. In the case of doublet states, all have the same configuration as X⁴Σ_g⁻.

М.А. В

10 экз. в
сост. в,
расчет

С. А. 1990, 113, N 16

B_2^-

DM 34357

1990

- 2 Б1021. Электронная структура радикала B_2^-
Electronic structure of the B_2^- radical / Bruna Pablo J.
Wright James S. // J. Phys. B.— 1990.— 23, № 13.—
С. 2197—2215.— Англ.

Рассчитаны потенциальные кривые 10 электронных состояний иона B_2^- . Волновые ф-ции получены методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям. Использованы процедуры отбора конфигураций и экстраполяции к полному КВ. Базис сгруппированных гауссовых ф-ций включал трехэкспонентные наборы Хузинаги — Даннинга, дополненные диффузными ф-циями s - и p -типа и поляризац. d -ф-циями (а также одной f -ф-цией при расчете энергий при равновесных расстояниях). B_2^- имеет по крайней мере 8 электронных состояний, устойчивых по отношению к отрыву электрона — больше, чем известно для любого др. двухатомного аниона. Основным явля-

М.П.

X. 1991, № 2

ется состояние $^4\Sigma_g^-$. Рассчитаны спектроскопич. постоянные связанных состояний. Особое внимание уделено определению энергий диссоциации, энергий отрыва электрона, факторов Франка—Кондона и времен жизни состояний. Сопоставлена относит. стабильность низколежащих состояний иона Br_2^- и изовалентных ему Al_2^- , C_2^+ и Si_2^+ . Библ. 65.

А. А. Сафонов

B₂⁻

Ом. 34357

1990

1 Д130. Электронная структура радикала B₂⁻.
Electronic structure of the B₂⁻ radical / Bruna Pablo J.,
Wright James S. // J. Phys. B.— 1990.— 23, № 13.—
С. 2197—2215.— Англ.

Методом КВ с включением процедуры экстраполя-
ции проведен расчет 10 электронных состояний B₂⁻.
Для расчета использованы различные базисы из сгруп-
пированных гауссовых ф-ций с включением диффузных
ф-ций. В качестве исходных МО для метода КВ
использованы МО для состояния X⁴Σ_g⁻ радикала B₂⁻.
Показано, что по крайней мере 8 электронных состоя-
ний B₂⁻ лежат по энергии ниже основного электронно-
го состояния B₂. Наряду с энергетич. характеристиками
рассчитаны также излучательные времена жизни. На
основании полученных результатов дано описание про-
цесса фотоприсоединения электрона к молекуле B₂.
Проведено также сравнение электронной структуры
иона B₂⁻ с изоэлектронными ионами C₂⁺, Al₂⁻ и Si₂⁺.
Е. А. Ж.

М.П.

Ф. 1991, N 1

1990

 B_2^{2+}

37 Д136. Сильносвязанные метастабильные состояния катиона B_2^{2+} . Strongly bound metastable states of B_2^{2+} / Bruna Pablo J., Wright James S. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 4.— С. 2617—2630.— Англ.

В рамках метода конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к набору исходных конфигураций (КВ—НИК) рассчитаны потенц. кривые 25 электронных состояний молекулярного иона B_2^{2+} . Выбран атомный базис $[6s4p2d]$, содержащий полудиффузные ф-ции для описания процессов переноса заряда. Основное состояние B_2^{2+} $X^1\Sigma_g^+$ несвязано, однако существует большое число метастабильных состояний, причем ряд потенц. кривых (состояний $1^1\Pi_g$, $1^1\Pi_u$, $1^3\Sigma_g^-$ и $1^1\Delta_g$) имеют довольно глубокие минимумы от 1,52 до 2,83 эВ. Проанализированы свойства метастабильных состояний, сопоставлено поведение потенц. кривых уровней различной симметрии. Показано, что важным фактором, обуславливающим существование метастабильных уровней, является диссоциация по симметричным $B^+ + B^+$ и несимметричным $B + B^+$ и каналам и многочисленным квазипересечениям потенц. кривых.

А. Ю. Ермилов

М.П.

фр. 1991, n 7

B_2^{2+}

1990

9 B1016. Сильно связанные метастабильные состояния B_2^{2+} . Strongly bound metastable states of B_2^{2+} / Bruna Pablo J., Wright James S. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 4.— С. 2617—2630.— Англ.

Выполнены неэмпирич. расчеты и проанализирована электронная структура для 25 электронных состояний двухатомного дикатиона B_2^{2+} . Энергии и волновые ф-ции вычислены в приближении конфигурац. вз-вия с несколькими исходными конфигурациями; при этом использованы МО основного состояния B_2 , построенные в базисе гауссовых ф-ций типа $[6s4p2d]$. На потенциальных кривых более 10 возбужденных состояний имеются минимумы выше соотв-щих диссоциац. пределов с глубинами ям от 1,5 до 3 эВ. Общей причиной

М.А.

х. 1991, № 9

появления подобной картины является смещение конфигураций, коррелирующих с пределами $V^{++}V^{+}$ и $V^{+}V^{2+}$. Наличие метастабильных состояний V_2^{2+} интерпретировано как проявление возбуждений с заселенной в основном несвязанном состоянии МО σ_u на связывающие МО σ_g или π_u . Обсуждены простые корреляц. соотношения (напр., между ПТ ионизации), приводящие к качеств. выводам о метастабильных состояниях дикатионов. Рассмотрена возможность эксперим. наблюдения V_2^{2+} .

А. В. Немухин

B_2^+

1990

113: 193438s Strongly bound metastable states of the boron diatomic dipositive ion. Bruna, Pablo J.; Wright, James S. (Ottawa-Carleton Chem. Inst., Carleton Univ., Ottawa, ON Can. K1S 5B6). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(4), 2617-30 (Eng). The stabilities of about 25 electronic states of B_2^{2+} were investigated using a multireference CI (MRD-CI) method and an AO basis set composed of 6s4p2d contracted Gaussian species per atom, including semidiffuse functions relevant for an adequate description of charge transfer interactions.

привет

25 февраля.
состояла.

с.а. 1990, 113, N 22

B₂

B₂⁺

От 34837

1990

6 Б1044. Димер бора: энергия диссоциации и потенциалы ионизации. Boron dimer: Dissociation energy and ionization potentials / Deutsch P. W., Curtiss L. A., Pople J. A. // Chem. Phys. Lett.— 1990.— 174, № 1.— С. 33—36.— Англ.

Неэмпирическим методом G1, позволяющим учитывать корреляц. поправки высокого порядка (см. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90.— С. 5622) с использованием базиса 6-31 ГФ* рассчитаны энергии систем B₂ и B₂⁺, что позволяет оценить адиабатич. ПТ ионизации B₂ как 8,9 (²Σ_g⁺-состояние B₂⁺ (и 9,27 эВ) ²Π_u). Вычисленная энергия диссоциации B₂ D₀=2,71 эВ отличается от эксперим. данных на 0,3 эВ. Предположено, что погрешность теор. величины менее 0,1 эВ, и следовательно целесообразно уточнить эксперим. оценку.

А. В. Немухин

М.А., Д₀?

X-1991, № 6

B₂

Om 34837

1990

/ 114: 12536q Boron dimer: dissociation energy and ionization potentials. Deutsch, P. W.; Curtiss, L. A.; Pople, J. A. (Chem. Technol. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1990, 174(1), 33-6 (Eng). An ab initio MO study at the G1 level of theory has been carried out on B₂ and B₂⁺. The dissociation energy of the ³Σ_g⁻ ground state of B₂ is calcd. to be 2.71 eV. The adiabatic ionization potentials of B₂ to B₂⁺(²Σ_g⁺) and B₂⁺(²Π_u) are 8.99 and 9.27 eV, resp. Comparison is made to recent theor. and exptl. studies of these quantities.

Do, I,
parent

C.A. 1991, 114, N2

B₂⁺

DM 34837

1990

3 Д114. Димер бора: энергия диссоциации и потенциалы ионизации. Boron dimer: dissociation energy and ionization potentials / Deutsch P. W., Curtiss L. A., Pople J. A. // Chem. Phys. Lett.— 1990.— 174, № 1.— С. 33—36.— Англ.

С применением многочастичной теории возмущений второго порядка в варианте Меллера—Плессета (МП2) и метода, с использованием которого можно получать поправки к значениям полной энергии, найденным методом Хартри—Фока и обеспечивающего получение результатов более высокого уровня точности по сравнению с МП2, выполнены расчеты равновесных межъядерных расстояний и полных энергий электронных состояний $^3\Sigma_g^-$, $^5\Sigma_u^-$ для B₂ и $^2\Pi_u$, $^2\Sigma_g^+$ для B₂⁺, а также энергии иона В⁺ в состоянии 1S и атома В в состоянии 2P . На основании сравнения полученных результатов с имеющимися эксперим. данными сделан вывод о необходимости повторного эксперим. определения энергии диссоциации основного $^3\Sigma_g^-$ состояния B₂ и 1-го и 2-го потенциалов ионизации В⁺. А. И. К.

М. П., До

ср. 1991, № 3

B₂⁺

OM 33946

1990

Hanley L., Whitter J. L.,
Anderson J.,

J. Phys. Chem. 1990, 94,
N5, 2218

Collision-Induced Dissocia-
tion and ab Initio Studies of

Boron Cluster Ions: Determina
tion of Structures and Stabilities

BB

(DM. 33709)

1990

Sana M., Leroy G., Henriët Ch.,

J. Chim. Phys. Et Chim.

M.N.

Biol. 1990, 87, N1, 1-11.

B₂

M.H.

365-49

011

1991

9 Д86. Теоретическое исследование спектроскопии B₂. Theoretical study of the spectroscopy of B₂ / Langhoff Stephen R., Bauschlicher Charles W. (Jr.) // J. Chem. Phys.— 1991.— 95, № 8.— С. 5882—5888.— Англ.

Методом НИК-КВ в гауссовом базисе атомных натуральных орбиталей [4s3p2d1f] проведены расчеты синглетных, триплетных и квинтетных состояний B₂ ниже энергии 45 000 см⁻¹. С использованием базиса [5s4p3d2f1g] рассчитаны также низколежащие состояния X³Σ_g⁻, A³Π_u, a⁵Σ_u⁻, b¹Δ_g и c¹Σ_g⁺ для проверки точности спектроскопич. постоянных, определенных в меньших базисах. Лучшая оценка энергии состояния

a⁵Σ_u⁻ составляет 1701 см⁻¹. Энергия диссоциации состояния x³Σ_g⁻ равна 2,78 эВ. Представлены коэф. Эйнштейна для некоторых триплет-триплетных переходов и радиационные времена жизни триплетных состояний. Кривые потенц. энергии B₂ сопоставлены с аналогично рассчитанными кривыми для Al₂.

Ф. 1992, к.9.

B₂

от 36549

1991

18 Б1031. Теоретическое изучение спектроскопии B₂.
Theoretical study of the spectroscopy of B₂ / Langhoff
Stephen R., Bauschlicher Charles W. (Jr) // J. Chem.
Phys.— 1991.— 95, № 8.— С. 5882—5888.— Англ.

Методом конфигурац. вз-вия с несколькими исходны-
ми конфигурациями рассчитаны синглетные, триплетные
и квинтетные электронные состояния молекулы B₂ с
энергиями не выше 45 000 см⁻¹. Использован базис на-
туральных АО, представленных наборами сгруппирован-
ных гауссовых ф-ций (13s8p6d4f)/[4s3p2d1f]. Орбитали
получены многоконфигурац. методом ССП в полном
активном пространстве. Получена оценка энергии дис-
социации основного состояния $2,85 \pm 0,06$ эВ. Определе-
ны вероятности переходов между нек-рыми триплетны-
ми состояниями и излучат. времена жизни триплетных
состояний. Сопоставлены потенциальные кривые изова-
лентных молекул B₂ и Al₂. А. А. Сафонов

М.А.

X. 1992, № 18.

B₂

Om 36549

1991

115: 242835m Theoretical study of the spectroscopy of the boron dimer. Langhoff, Stephen R.; Bauschlicher, Charles W., Jr. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 95(8), 5882-8 (Eng). The singlet, triplet, and quintet states of B₂ below about 45 000 cm⁻¹ were studied at the multireference configuration-interaction (MRCI) level in a [4s 3p 3d 1f] at. natural orbital (ANO) Gaussian basis set. Calcns. employing a [5s 4p 3d 2f 1g] ANO basis were also performed for the low-lying states, X ³Σ_g⁻, A ³Π_u, a ⁵Σ_u⁻, b ¹Δ_g, and c ¹Σ_g⁺, to assess the accuracy of the spectroscopic consts. detd. with the smaller basis and to position the singlet, triplet, and quintet manifolds as accurately as possible. The best est. of the T_e value for the a ⁵Σ_u⁻ state is 1701 cm⁻¹. A D₀ value is computed for the X ³Σ_g⁻ state of B₂ of 2.78 eV and D₀ is 2.85 ± 0.06 in the complete CI limit. This value is within the error bars of the rather uncertain JANAF value, but is larger than the value of 2.71 eV detd. recently using the G1 approach. Einstein coeffs. are presented for selected triplet-triplet transitions, and radiative lifetimes for the triplet states to help characterize the optical spectra. Finally the potential energy curves of B₂ are compared to those detd. in an analogous manner for Al₂.

U.N.

C.A. 1991, 115, N22

B₂

1991

120: 89436p Theoretical calculation of the oscillator strength of $A^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ of diboron molecule. Liu, Bicheng; Xiong, Ye (Dep. Math. Phys., Changsha Railw. Coll., Changsha, Peop. Rep. China). *Yunnan Daxue Xuebao, Ziran Kexueban* 1991, 13(3), 219-21 (Ch). Using the STO-4G double ζ expansive basis, the wave functions of the ground state ($X^3\Sigma_g^-$) and the first excitation state ($A^3\Sigma_u^-$) of B_2 mol. were found with the methods of MCSCF and CI. The oscillator strength of $A^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ of the B_2 mol. was obtained by using the coupled pole approxn. The value is 0.00124.

$A^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$
(fmm)

C.A. 1994, 120, N8

B_2

1991

116: 30110s Theoretical calculation of the oscillator strength of $A^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ band system of the boron (B_2) molecule. Liu, Bicheng; Xiong, Ye (Dep. Math. Phys., Changsha Railway Coll., Chengsha, Peop. Rep. China). *Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao* 1991, 8(2), 1855-8 (Ch). Using STO-4G double ζ basis, the MO's of B_2 mol. were found with the method of MCSCF. The configuration spaces with different sym. form have been built according to the different sym. form of different electronic states, and the ground state ($X^3\Sigma_g^-$) and the first excited state ($A^3\Sigma_u^-$) of B_2 mol. have been obtained by means of CI method. The oscillator strength of $A^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ band system of B_2 mol. was calcd. by using couple-pole approxn. Its value is 0.00124.

$(A^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-)$
(fmm)

C.A. 1992, 116, N 4

B₂

DM-37204

1992

117: 57917t Observation of several new electronic transitions of the boron dimer. Brazier, C. R.; Carrick, P. G. (Phillips Lab./RKFE, Propul. Dir., Edwards Air Force Base, CA 93523 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(12), 8684-90 (Eng). Several new electronic transitions of the B₂ mol. were obsd. in emission from a corona excited supersonic expansion source. The rotational analyses of two bands, designated (2) $^3\Pi_u$ -(1) $^3\Pi_g$ and (1) $^1\Delta_u$ -b $^1\Delta_g$, are presented, together with a description of three other new systems. The results are compared with recent high-level theor. calcs.

м. снкрмр

(2) $^3\Pi_u$ -(1) $^3\Pi_g$

и (1) $^1\Delta_u$ -b $^1\Delta_g$

транз. акаппу

С. А. 1992, 117, N 6

B_2

Am. 37055

1992

8 Д85. Исследование основного состояния и возбужденных состояний B_2 методом конфигурационного взаимодействия. Configuration-interaction studies on the ground state and excited states of B_2 / Hachey M., Karpa S. P., Grein F. // J. Phys. B.— 1992.— 25, № 6.— С. 1119—1136.— Англ.

С использованием сгруппированного гауссова базиса $5s3p$ с дополнительными d -поляризационными, s -, p -, d -диффузными ф-циями и p -ф-циями отрицат. иона методом конфигурац. взаимодействия проведены расчеты основного состояния и 55 низколежащих возбужденных состояний молекулы B_2 . Спектроскопич. постоянные, полученные для B_2 , сопоставлены с теоретич. и эксперим. результатами для изовалентных молекул Al_2 и Ga_2 . Обсуждены тенденции изменений величин T_e , ω_e и R_e .

М.А.

Ф. 1992, № 8

B_2

Om 37055

1992

✱ 18 Б1028. Исследование методом конфигурационного взаимодействия основного и возбужденных состояний B_2 . Configuration-interaction studies on the ground state and excited states of B_2 / Hachey M., Karna S. P., Grein F. // J. Phys. B.— 1992.— 25, № 6.— С. 1119—1136.— Англ.

Методом конфигурац. вз-вия с несколькими исходными конфигурациями рассчитаны потенциальные кривые 55 низлежащих электронных состояний молекулы B_2 . Использован базис сгруппированных гауссовых ф-ций $(11s8p2d)/[6s5p2d]$. Определены спектроскопич. постоянные 53 связанных состояний. Результаты хорошо согласуются с имеющимися эксперим. данными для состояний $X^3\Sigma_g^-$ и $A^3\Sigma_u^-$. Проанализированы причины наблюдавшегося экспериментально возмущения полосы перехода $A-X$. Сопоставлены спектроскопич. постоянные изовалентных молекул B_2 , Al_2 и Ga_2 . А. А. Сафонов

М.П.

X. 1992, N 18.

B₂

[OM. 37055] 24

1992

53 стаб. сост.;
помехи p-uu.
не нуль, We
теор. панель

116: 201543s Configuration-interaction studies on the ground state and excited states of the boron dimer. Hachey, M.; Karna, S. P.; Grein, F. (Dep. Chem., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can. E3B 6E2). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1992, 25(6), 1119-36 (Eng). Using a 5s3p contracted Gaussian basis set, with addnl. d-polarization, s, p, d diffuse and p neg.-ion functions, configuration-interaction (CI) methods were applied to the ground state and 55 low-lying states of B₂. From the potential curves spectroscopic consts. for 53 stable states were obtained. Exptl., only the $2^3\Sigma_u^- \sim X^3\Sigma_g^-$ system is known. Agreement of calcd. with exptl. values for the two known states is very good. All-electron CI studies were performed for the two low-lying states $X^3\Sigma_g^-$ and $1^3\Sigma_u^-$, which are sepd. by only about 0.14 eV. Relative to the ground state configuration $2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 1\pi_u^2$, most excited valence states derive from single and double excitations to $3\sigma_g$, $1\pi_u$ and $3\pi_g$. At higher energies, Rydberg excitations from $1\pi_u$ to σ_u^R , π_u^R and π_g^R occur. Perturbations of the $\alpha^3\Sigma_u^- \sim X^3\Sigma_g^-$ system, as obsd. exptl., were studied. The states most likely to perturb the vibrational levels of $X^3\Sigma_g^-$ are $1^3\Pi_u$ and $1^1\Sigma_g^+$, however, they are not allowed as perturbing states by Kronig's selection rules. Although $1^1\Sigma_g^+$ may interact with $X^3\Sigma_g^-$

C.A. 1992, 116, N20

via spin-orbit coupling, only vibrational bands with $v'' \geq 8$ would be affected. Another explanation of the obsd. high- v'' vibrational levels of the A-X system, identifying the upper state with $1^3\Sigma_u^-$, has been suggested, but this proposal also encounters some difficulties. Comparison of the spectroscopic consts. obtained for B_2 with theor. and exptl. results for the isovalent moles Al_2 and Ga_2 was made. Trends in T_e , ω_e , and R_e were rationalized on the basis of orbital character.

B₂

1992
Kutzler F.W., Painter G.S.,

Phys. Rev. B. 1992, 45,

u.n. NF, C. 3236 - 3244.

(all. $\tilde{\chi}_2$; III)

B₂

1992

(Damonny.)
mop. param

116: 136634f Potential energy surface of the boron tetramer and total atomization energies of the boron dimer, trimer, and tetramer. Martin, J. M. L.; Francois, J. P.; Gijbels, R. (Limburgs Univ. Cent.; 3590 Diepenbeek, Belg.). *Chem. Phys. Lett.* 1992, 189(6), 529-36 (Eng). The potential energy surface of B₄ has been studied ab initio using extended basis sets and coupled-cluster methods. The ground state (¹A_{1g}) is a singlet square that undergoes pseudo-Jahn-Teller distortion to a rhombic structure (¹A_g), but the energy gain is so small that the effective structure will be square at all practical temps. Total atomization energies ΣD₀ (kcal/mol.) for B₂(62.2 ± 2), B₃(189.1 ± 2-192.6 ± 2), and B₄(312.2 ± 2) are computed by a modification of GAUSSIAN-1 (CI) theory. The validity of scaling and bond-additivity schemes for computing binding energies of higher clusters is discussed.

(+2) B₃, B₄ ●

C.A. 1992, 116, N 14

1992

119: 279308a Computed self-consistent field and singles and doubles configuration interaction spectroscopic data and dissociation energies for the diatomics boron dimer, carbon dimer, nitrogen, oxygen, fluorine, cyanogen, phosphinidynemethyl (CP), carbon sulfide (CS), phosphorous nitride (PN), silicon carbide (SiC), silicon nitride (SiN), oxosilylene (SiO), silicon phosphide (SiP), and their ions. McLean, A. D.; Liu, B.; Chandler, G. S. (Res. Lab., IBM, San Jose, CA USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(11), 8459-64 (Eng). Single configuration SCF calcns. near the Hartree-Fock limit, and singles and doubles CI (SDCI) calcns. from this single SCF configuration have been performed for the ground and selected excited states of B_2^+ , B_2 , C_2^+ , C_2 , N_2^+ , N_2 , O_2^+ , O_2 , F_2^+ , F_2 , CN, CN-, CP, CS, PN, SiC, SiC-, SiN, SiN-, SiO, and SiP. Potential energy curves, with Davidson corrections, have been obtained around equil. sepns. Equil. bond lengths, vibrational energies, ionization potentials, and dissociation energies are reported.

for the following
 H₂, He,
 Ne, F, O,
 N, C, B

Δ (+20)

C.A. 1993, 119, N 26

B₂

1992

118: 198509u Electronic structures of Rydberg states of molecules isoelectronic with neon. Yang, Huanwang; Liu, Lei; Li, Jiaming (Dep. Phys., Shandong Norm. Univ., Jinan, Peop. Rep. China 250014). Wuli Xuebao 1992, 41(1), 10-17 (Ch). Based on the multiple-scattering self-consistent-field theory, we have studied the mol. Rydberg states of the mols. H₂, HF, H₂O, NH₃, and CH₄ isoelectronic with Ne. From the united at. limit of mol. electronic configuration, we set a convention to det. the principal quantum no. of the initial states of a Rydberg series. The dynamics of the excited mols. are elucidated. The theor. calcns. are in fair agreement with the available exptl. results.

(Pugan. com.)

HF, H₂O, NH₃, CH₄
(44) 10

C.A. 1993, 118, N20

B₂

1993

119: 190874) Singly and strongly bound multiply excited states of diboron (B₂). Cao, Zexing; Yan, Guosen; Tian, Anmin (Dep. Chem., Sichuan Univ., Chengdu, Peop. Rep. China 610064). *Goodeng Xuebao Huaxue Xuebao* 1993, 14(5), 711-13 (Ch). The optimized geometries of several low-lying electronic states of B₂ are obtained by using an energy gradient technique and SCF or SOCI energy minimization methods with a $6-15 G^*$ basis set. In the

upper states of B₂, an increase in bond strength can occur in case of one and two-excitations from the σ_x , antibonding MO into either a bonding σ_g , or π_x , MO, and the bonding effect of π_x is superior to that of σ_x is superior to that of σ_g . The transition energies (E_T) are given at an accurate second order CI (SOC1) level of theory, and based on the close agreement between the calcd. and obsd. E_T , the Douglas-Hertzberg transition is assigned by transition from $C^3\Sigma_u^-$ to the ground state $X^3\Sigma_g^-$. In addn., obtained were the vibrational frequencies (ω_e) for the ground and excited states with the model potential function method.

Huixue Huixue.
Cocmoefue

$C^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$

We

C.A. 1993, 119, N18

B₂

1993

120: 117309v Benchmark calculations with correlated molecular wave functions. III. Configuration interaction calculations on first row homonuclear diatomics. Peterson, Kirk A.; Kendall, Rick A.; Dunning, Thom H., Jr. (Mol. Sci. Res. Cent., Pacific Northwest Lab., Richland, WA 99352 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(12), 9790-805 (Eng). Using correlation consistent basis sets from double through quintuple zeta quality, potential energy functions were calcd. for the electronic ground states of the 1st row homonuclear diat. mols. B₂, C₂, N₂, O₂, and F₂ using single and double excitation CI (HF+1+2, GVB+1+2, and CAS+1+2) wave functions. Spectroscopic consts. were calcd. for each species and compared to expt. The dependence of the calcd. spectroscopic consts. on systematic extensions of the one-particle basis set are, in general, very regular. By fitting the directly calcd. values with a simple exponential function, accurate ests. of the complete basis set (CBS) limit for E_e, D_e, and r_e were obtained for each level of theory. The estd. CBS limits are compared to the available exptl. results, and the intrinsic errors assocd. with each theor. method are discussed. The accuracy of the internally contracted CAS+1+2 method is compared to conventional uncontracted calcns. using large basis sets. For B₂, a full CI calcn. were carried out for D_e with the correlation consistent double zeta basis set and is compared to the CAS+1+2 method using both a supermol. and sepd. atom approach for the dissociated limit.

M.A.,



meep - pacem

(74)

C₂, N₂, O₂, F₂

C.A. 1994, 120, N10

B₂

Reid C. J.

1993

Int. J. Mass Spectrom.

(Ae)

Ion Processes 1993, 127,
147-60.

● (C₆₀ BH; III)

1993

F: B2

P: 3

7B167. Одно- и двукратно-возбужденные состояния B[2] и соответствующие им спектры. The singly and doubly excited states of B[2] and their spectra / Yan G., Cao Z. X., Liang G. M., Tian A. M. // J. Mol. Struct. Theochem. - 1993. - 101, N 3. - С. 283-286. - Англ.

P. M. X. N⁷, 1996.

B₂

1993

119: 82260x The singly and doubly excited states of boron (B₂) and their spectra. Yan, Gousen; Cao, Zexing; Liang, Guoming; Tian, Anmin (Dep. Chem., Sichuan Univ., Chengdu, Peop. Rep. China 610064). *THEOCHEM* 1993, 101(3), 283-6 (Eng). The optimized geometries of eleven low-lying electronic states of B₂ are obtained by use of an energy gradient, SCF and second-order CI (SOC1) energy minimization methods with a std. 6-31G* basis set. Transition energy (E_t) values are given at an accurate SOC1 level and, based on the good agreement between calcd. and obsd. hE_t values, the Douglas-Hertzberg transition is assigned to transition from the C³Σ_g⁻ to the X³Σ_g⁻ state. In addn., vibrational frequencies have been reported for all given states with the model potential function method.

спукацца,
we 11 куклук
for. com.,
med. param

C.A. 1993, 119, N8

B₂

(DM. 37 773)

1994

Boldyrev A.I., Gonzalez N.,
Simons J.,

35-

29, J. Phys. Chem., 1994,

D, 98, N 40, 9931-9944

Исчерпывающее
теоретическое
исследование

B₂

DM-37620

1994

121: 68443u High resolution Fourier transform emission spectrum of the (2) $^3\Pi_g$ -A $^3\Pi_u$ transition of the B₂ molecule. Brazier, C. R.; Carrick, Patrick G. (RKFE, Phillips Lab., Edwards Air Force Base, CA 93524-7680 USA). *J. Chem. Phys.* 1994, 100(11), 7928-37 (Eng). The (2) $^3\Pi_g$ -A $^3\Pi_u$ system of B₂ has been characterized for the first time. A full rotational anal. of the 0-0, 0-1, 1-0, and 1-3 bands has been performed. The mol. parameters are compared with recent high level theor. calcns. and show good agreement. An extensive perturbation of the upper (2) $^3\Pi_g$ state by the (1) $^3\Pi_g$ state was obsd. This was most clearly evident for $v = 0$ of the (2) $^3\Pi_g$ state for the $^{10}\text{B}^{11}\text{B}$ isotopomer, which is split into components by the interaction with $v = 7$ of (1) $^3\Pi_g$. The perturbation interaction exhibited a significant rotational dependence, which was interpreted as arising from a change in the Franck-Condon factors as the rotational contribution to the potential changed. A weak local perturbation was obsd. in $v = 1$ of the A $^3\Pi_u$ state for a crossing with $v = 2$ of the α $^5\Sigma_u^-$ state.

(2) $^3\Pi_g$ -A $^3\Pi_u$
M.N.

C.A. 1994, 121, N6.

B₂

DM. 37618 (Tonko 107.) 1994

121: 43089v Nonadiabatic perturbations and fine structure splittings in the 1,2 $^3\Pi_g$ states of B₂: an analysis based on adiabatic and rigorous diabatic states. Manaa, M. Riad; Yarkony, David R. (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, MD 21218 USA). *J. Chem. Phys.* 1994, 100(11), 8204-11 (Eng). Nonadiabatic effects and fine-structure splittings in the 1,2 $^3\Pi_g$ states of B₂ were studied. Adiabatic electronic wave functions $\Psi^*(J^3\Pi_g)$ were calcd. at the MR-CI level. The interstate deriv. couplings $\langle \Psi^*(1^3\Pi_g) | (d/dR) | \Psi^*(2^3\Pi_g) \rangle$ were calcd., and used to construct "rigorous" diabatic electronic states. The spin-orbit interactions responsible for the fine-structure splitting in the 1,2 $^3\Pi_g$ states were detd., as were the 1,2 $^3\Pi_g \sim 1^1\Pi_g$ spin-orbit interactions. These electronic-structure data were used to det. the vibrational structure of the 1,2 $^3\Pi_g$ states in both coupled adiabatic and coupled diabatic states bases. As a result of an avoided crossing of the 1,2 $^3\Pi_g$ states, the fine-structure-splitting consts. exhibit a marked geometry dependence. The fine structure splitting consts. for the (1 $^3\Pi_g$, v = 0-4) levels were found to be -4.2(-4.4), -3.7, -2.8, -1.8, and -0.83 cm⁻¹, resp. The (1 $^3\Pi_g$, v = 0) value is in good agreement with a recent exptl. detn. given parenthetically. While the diabatic basis provides illuminating qual. insights into the electronic structure of the states in question, the adiabatic basis is preferred computationally.

$^3\Pi_g$ тонкая
структура
1, 2 расщеплен.

C. A. 1994, 121, 114

B₂

1995

124: 70275w Emission spectra of the $(1)^1\Sigma_u^+ - (1)^1\Sigma_g^+$ transition of B₂. DeRose, Michelle E.; Carrick, Patrick G.; Brazier, Christopher R. (Phillips Lab/Propulsion Directorate, Edwards AFB, CA 93524-7680 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 174(2), 379-87 (Eng). Emission spectra of the $(1)^1\Sigma_u^+ - (1)^1\Sigma_g^+$ electronic transition of B₂ produced by discharging dil. mixts. of diborane followed by expansion through a corona excited supersonic expansion source have been recorded and analyzed for the first time. The spectra of the 0-0, 1-1, 2-2, 3-3, and 4-4 vibrational bands of this transition will be presented along with their rotational analyses. The mol. parameters that resulted from fitting the data to a Dunham-type expansion will be reported and compared with recent theor. calcns.

$(1)^1\Sigma_u^+ -$
 $-(1)^1\Sigma_g^+$

M.N.

C.A. 1996, 124, N6.

B₂

[Dom. 38917]

1997

Lao Zexing, Wu Wei
et al.,

Myrmecodia
coccoloba

Science in China,
1997, B40, N 5, 548-553.

B₂

1997

127: 322924c Benchmark calculations with correlated molecular wave functions. Part 12. Core correlation effects on the homonuclear diatomic molecules B₂-F₂. Peterson, Kirk A.; Wilson, Angela K.; Woon, David E.; Dunning, Thom H., Jr. (Department Chemistry, Washington State University, Richland, WA 99352 USA). *Theor. Chem. Acc.* 1997, 97(1-4), 251-259 (Eng), Springer. Using systematic sequences of the newly developed correlation-consistent core-valence basis sets from cc-pCVDZ through cc-pCV6Z, the spectroscopic consts. of the homonuclear diat. mols. contg. 1st row atoms, B to F, were calcd. both with and without inclusion of 1s correlation. Internally contracted multireference CI (IC-MRCI) and singles and doubles coupled cluster (CCSD) theory with a perturbational est. of connected triple excitations, CCSD(T), were investigated. By exploiting the convergence of the correlation-consistent basis sets, complete basis set (CBS) limits were estd. for total energies, dissocn. energies, equil. geometries, and harmonic frequencies. Based on the estd. CBS limits the effects of 1s correlation on D₀ (kcal/mol), r_e (Å), and ω_e (cm⁻¹) are: +1.1, -0.0070, +10 for B₂; +1.5, -0.0040, +13 for C₂; +0.9, -0.0020, +9 for N₂; +0.3, -0.0020, +6 for O₂; and -0.1, -0.0015, +1 for F₂.

(Re, CV2)
mop. param

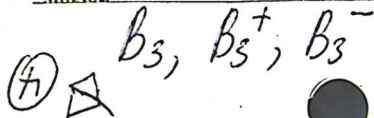
Δ

(43)

C₂, N₂, O₂

1997

- 128: 145579s A correlation study of boron dimers and trimers. Howard, I. A.; Ray, A. K. (Department of Physics, University of Texas at Arlington, Arlington, TX 76019 USA). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1997, 42(4), 299-301 (Eng), Springer-Verlag. We have carried out ab initio MO studies of neutral and charged boron dimers and trimers, using a large basis set. Electron correlation effects are included through the techniques of fourth-order many-body perturbation theory. Results for total energies, geometries, binding energies, and binary fragmentation energies are presented, and where possible compared with published results. Stabilities of the geometries considered are further studied through a vibrational-mode anal. The ground state of B_2 is predicted to be a triplet; of B_2^- , a quartet, and of B_2^+ a doublet. The ground state of B_3 is a triangular doublet, of B_3^- a linear singlet and of B_3^+ a triangular singlet.



C.A. 1998, 128, N12

OCH-7A.
COCM.
meso.
racem

B_2
 B_2
 B_2^+

B₂

1998

Moscardo F; et al.

медрем.
расем
спрухрх.
параллел,
w, p,
Δ Hamom.

J. Comput. Chem.
1998, 19 (16),
1899-1908

(cu. ● H₂; III)

B₂²⁻

1998

130: 130177b Doubly Charged Negative Ions of B₂ and C₂. Pedersen, H. B.; Djuric, N.; Jensen, M. J.; Kella, D.; Safvan, C. P.; Vejby-Christensen, L.; Andersen, L. H. (Institute of Physics and Astronomy, University of Aarhus, Aarhus, DK-8000 Den.). *Phys. Rev. Lett.* 1998, 81(24), 5302-5305 (Eng), American Physical Society. The formation of short-lived doubly charged neg. diat. mol. ions has been studied at a heavy-ion storage ring by bombarding singly charged neg. ions of B₂⁻ and C₂⁻ by free electrons of well-defined energy. Structures are obsd. in the cross sections for detachment and fragmentation which are argued to be due to short-lived dianion resonances. The resonance energy of B₂⁻ (~ 5 eV) is close to a calcd. dianion ground-state energy and to the energy of some low-lying excited states of B₂²⁻. The C₂⁻ resonance energy (~ 10 eV) is close to predicted excited states of C₂²⁻ and significantly above the calcd. dianion ground-state energy. From the width of the resonances a lifetime of about 10⁻¹⁶ s is obtained for these fragile gas-phase dianions.

Preval
Accept

(H) K

C.A. 1999, 130, N10

C₂²⁻

B_n

1998

✓ 128: 235390c Mean bond energy in B_n and Al_n clusters as a function of the equilibrium internuclear distance. Ionov, S. P.; Kuznetsov, N. T.; Alikhanyan, A. S. (Spektr Research and Technological Center, Russian Academy of Sciences and Academy of Engineering Sciences of the Russian Federation, Russia). *Russ. J. Coord. Chem.* 1998, 24(1), 9-13 (Eng), MAIK Nauka/Interperiodica Publishing. A new semiempirical formula is presented for calcg. the mean bond energy ΔE_b per atom in boron and aluminum clusters B_n and Al_n ($2 \leq n \leq \infty$). Within the framework of the structural-thermochem. model, only a single const. parameter, namely, the relative chem. potential of B (Al) in the B_2 (Al_2) mol., describes the whole B_n (or Al_n) series. This allows the calcn. of the relative chem. potential for any (nth) member of this series. Theor. ests. are made for internuclear distances in ground-state Ca_2 , Ga_2 , In_2 , and Tl_2 mols. For the first time, an empirical formula is derived for the dependence of R_e (BB) on the topol. factor of the B_n clusters.

Хлорид
соединения

Al_n

C.A. 1998, 128, N 19

1999

F: B2-

P: 3

131:107075 An ab initio molecular orbital study of the electron affinity of boron clusters. Takeuchi, T.; Yamamoto, M.; Kiuchi, M. (Nara Women's University, Kitauoyanishi-machi, Nara 630-8506, Japan). Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B, 153(1-4), 298-301 (English) 1999 The electron affinities of boron clusters were studied using ab initio MO methods to discuss the phenomenon of clustered boron anions emitted during sputtering. Calcns. were performed at the MP4(SDQ)/CBSB5 level. The calcd. electron affinities of B, B₂, and B₃ were found to be 0.214, 3.66, and 3.20 eV, resp. These values are qualitatively consistent with the experimental data of sputtering yield of B⁻, B₂⁻, and B₃⁻.

C.A. 1999, 131

F: B2

P: 3

131:107075 An ab initio molecular orbital study of the electron affinity of boron clusters. Takeuchi, T.; Yamamoto, M.; Kiuchi, M. (Nara Women's University, Kitauoyanishi-machi, Nara 630-8506, Japan). Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B, 153(1-4), 298-301 (English) 1999 The electron affinities of boron clusters were studied using ab initio MO methods to discuss the phenomenon of clustered boron anions emitted during sputtering. Calcns. were performed at the MP4(SDQ)/CBSB5 level. The calcd. electron affinities of B, B2, and B3 were found to be 0.214, 3.66, and 3.20 eV, resp. These values are qual. consistent with the exptl. data of sputtering yield of B-, B2-, and B3-.

C.A. 1999, 131

B₂ (We, 2e, meop. param)

2000

134: 9596s Quasi-classical determination of electronic energies and vibration frequencies in boron compounds. Chkhartishvili, Levan; Lezhava, David; Tsagareishvili, Otar (Laboratory for Solid State Physics, Department of Physics, Georgian Technical University, Tbilisi, Georgia 380075). *J. Solid State Chem.* 2000, 154(1), 148-152 (Eng), Academic Press. A substance is a quasiclassical system in the sense of the Maslov criterion. The interat. potential is an algebraic function of distance in the first quasiclassical approxn., and mol. or cryst. electronic structure is obtained by solving the secular equation in which matrix elements are expressed by vols. of intersections of the classically accessible areas for electron states of atoms. The quasiclassical ests. of electron orbital energies and vibration frequencies for diat. mols. B₂, BC, BN, and BO are found. The band gap of 0.14 au was established as a result of the quasiclassical calcns. of the d. of states for h-BN layered crystal. (c) 2000 Academic Press.

B₂

2700

Tam, Simon, et al.

спектр γ . Chem. Phys.
Матрицах 2000, 113(20),
9067 - 9078.

A ^{35}u -X ^{35}g

(see B;  III)

B₂

2001

meo pem.
pacem
Hepull
Ref. CCM.

135: 127379s An analysis and implementation of a general coupled cluster approach to excitation energies with application to the B₂ molecule. Hald, Kasper; Jorgensen, Poul; Olsen, Jeppe; Jaszunski, Michal (Department of Chemistry, University of Aarhus, Aarhus, DK-8000 Den.). *J. Chem. Phys.* 2001, 115(2), 671-679 (Eng), American Institute of Physics. A general scheme is presented for the calcn. of excitation energies using the std. coupled cluster hierarchy and a simple implementation is described for the higher std. models. An error anal. is performed to find to what order excitation energies in different coupled cluster models are correct. The anal. includes both the std. coupled cluster hierarchy as well as the approx. models and considers excitations to states that are dominated by one, two, and three electron replacements compared to the ref. state. Calcns. are presented up to the quadruple excitation level for the open shell B₂ mol. using an excited closed shell state as ref. state to emphasize the usefulness of the order anal. The coupled cluster excitation energies are compared to full CI results.

C.A. 2001, 135, N9

F: B2

P: 3

135:37388 A systematic theoretical investigation of the valence excited states of the diatomic molecules B₂, C₂, N₂ and O₂. Muller, Thomas; Dallos, Michal; Lischka, Hans; Dubrovay, Zsofia; Szalay, Peter G. Institute for Theoretical Chemistry and Structural Biology, University of Vienna, Vienna, Austria. Theor. Chem. Acc. (2001), 105(3), 227-243. in English.

A quant. survey on the performance of multireference (MR), CI with all singles and doubles (CISD), MRCISD with the Davidson correction and MR-av. quadratic coupled cluster (AQCC) methods for a wide range of excited states of the diat. mols. B₂, C₂, N₂ and O₂ is presented. The spectroscopic consts. r_e , ω_e , T_e and D_e for a total of 60 states have been evaluated and critically compared with available exptl.

data. Basis set extrapolations and size-extensivity corrections are essential for highly accurate results: MR-AQCC mean-errors of 0.001 Å, 10 cm⁻¹, 300 cm⁻¹ and 300 cm⁻¹ have been obtained for r_e , ω_e , T_e and D_e , resp. Owing to the very systematic behavior of the results depending on the basis set and the choice of method, shortcomings of the calcs., such as Rydberg state coupling or insufficient configuration spaces, can be identified independently of exptl. data. On the other hand, significant discrepancies with expt. for states which indicate no shortcomings whatsoever in the theor. treatment suggest the re-evaluation of exptl. results. The broad variety of states included in our survey and the uniform quality of the results indicate that the obsd. systematics is a general feature of the methods and, hence, is mol.-independent.

B₂

Qm. 40942

2001

135: 231940d Analytical potential energy functions of the neutral and cationic B₂. Yang, C. L.; Zhu, Z. H.; Wang, R.; Liu, X. Y. (Department of Physics, Yantai Normal University, Yantai, Peop. Rep. China 264000). *THEOCHEM* 2001, 548, 47-52 (Eng), Elsevier Science B.V. Ab initio quadratic CI calcn. (QCISD) and 6-311G** basis have been used to calc. the equil. geometries, potential energy curves, spectroscopic disson. energies of the ground and low-lying electronic states of B₂ and B₂⁺. The correct ground state of B₂⁺ is detd. by using the potential energy curves and optimization calcn. at the same time. The disson. limits of these states are induced by using the principles of resolu., direct product and redn. of group representation and reversibility for the microscopic process. The anal. potential energy functions of these states have been fitted with Murrell-Sorbie potential energy function from our ab initio calcn. results. The spectroscopic data of each state are calcd. through the relationship between anal. potential energy function and spectroscopic data, and compared with some other theor. data and exptl. data available from the expt. at present.

теор. расчет

ге, де,

по методу квант

вока и квант

тектр. сист.

(H) B₂⁺



С. А. 2001, 135, № 6.

B_2^+

Om. 40942

2001

135: 231940d Analytical potential energy functions of the neutral and cationic B_2 . Yang, C. L.; Zhu, Z. H.; Wang, R.; Liu, X. Y. (Department of Physics, Yantai Normal University, Yantai, Peop. Rep. China 264000). *THEOCHEM* 2001, 548, 47-52 (Eng), Elsevier Science B.V. Ab initio quadratic CI calcn. (QCISD) and 6-311G** basis have been used to calc. the equil. geometries, potential energy curves, spectroscopic dissocn. energies of the ground and low-lying electronic states of B_2 and B_2^+ . The correct ground state of B_2^+ is detd. by using the potential energy curves and optimization calcn. at the same time. The dissocn. limits of these states are induced by using the principles of resolu., direct product and redn. of group representation and reversibility for the microscopic process. The anal. potential energy functions of these states have been fitted with Murrell-Sorbie potential energy function from our ab initio calcn. results. The spectroscopic data of each state are calcd. through the relationship between anal. potential energy function and spectroscopic data, and compared with some other theor. data and exptl. data available from the expt. at present.

моп. парамет
re, De,
номеру. кривых
в осн. и нулевая
энергия. состав.
C. A. 2001, 135, N 6.

(H) $B_2^+ \Delta$