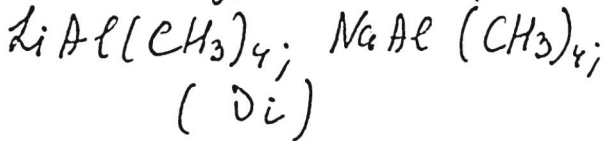
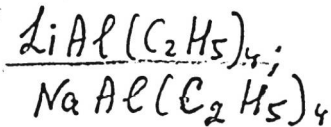


Li-de

7964

 $\bar{X}-404 \beta$ 

Mach K.

J. Organometallic Chem.

1964, 2, 25, 410-416

Рнех, 1965, 146237



10

ЕСТЬ Ф. Н.

7967

2; ($MAlH_4$; $M = Li, Na, K, Rb, Cs$)
 ($LiAlD_4$)

X 4528

Адиже Т. Г., Тавриченко В. В.
 Захаркин А. И., Угрюмова
 Л. Н., И. И. Ириш. спектро
 скопии, 1964, 6, № 806-12

РХ 1968 10

(ф)

21 (LiAl(NH₂)₄, KAl(NH₂)₄) 10 ⁷⁸⁶⁷

Bre R, Kovak A, Couxel J. X4419

Bull. Soc. chim. France, 1967, 71, 2432-2435
(9p).

Étude par spectroscopie infrarouge
des amides-luminescentes de lithium,
sodium et potassium

Bre K, 1968, 55-139 40

6

12

$\text{Li}_2(\text{NH}_2)(\text{AlO}_2)$

1967

112534s Infrared spectra of lithium, sodium, and potassium amidoaluminates. Raymond Brec, Alexandre Novak, and Jean Rouxel (Fac. Sci., Nantes, France). *Bull. Soc. Chim. Fr.* 1967(7), 2432-5(Fr). Spectra were studied in the 4000- to 200- cm^{-1} region. Band assignments are proposed. The differences between the NH_2 groups in the Li and K compds. are discussed.
John W. Ward

Li

+ 2

C.A. 1967-17-24

Ⓢ

1970

LiAlH₄ 4-н

(OC(3))_n

ИК-спектры

17 Б218. Исследование инфракрасных спектров литийалкоксиланатов. Hilal M. Abdel Kader. *Infrareduntersuchungen an Lithiumalkoxyalanaten.* «Chem. Ber.», 1970, 103, № 4, 1225—1233. (нем., рез. англ.)
 Получены $\text{LiAlH}_{4-n}(\text{OX})_n$ (I), X=Me, Et, трет-Bu; $n=0-4$ и исследованы их ИК-спектры. У I, $n=0$, в вазелиновом масле имеются полосы при 1642 и 1779 см^{-1} вал. кол. $\text{AlH}\dots\text{Al}$, что подтверждается зависимостью их положения от т-ры, и $\text{Al}-\text{H}$ соотв; аналогичные полосы наблюдаются и для I, $n=3$. В эфире полосы расположены при 1789 и 1739 см^{-1} и отнесены к вал. кол. $\text{Al}-\text{H}$ и $\text{O}\dots\text{Al}-\text{H}$ соотв. В I, $n=1$ ярко выражена склонность к образованию мостиков $\text{Al}-\text{O}\dots\text{Al}$; тенденция к образованию таких связей, а также типа $\text{Al}-\text{H}\dots\text{Al}$ у I, $n=2$ слабо выражена, вероятно, вследствие большей симметрии молекул по сравнению с I, $n=1$. Полосы в области 600—800 см^{-1} отнесены к вал. кол. связи $\text{Al}-\text{H}$. М. Д.

X. 1970. 17

20. Б195. ^6Li — ^7Li изотопические сдвиги в инфракрасных спектрах неорганических литиевых соединений. II. Ромбоэдрические соединения LiXO_2 . Tarte P.,

1970

Li-Al

(LiAlO_2)

ИК-спектр

Preudhomme J. ^6Li — ^7Li isotopic shifts in the infrared spectrum of inorganic lithium compounds. II. Rhombohedral LiXO_2 compounds. «Spectrochim. acta», 1970, A26, № 4, 747—754 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ряда соединений типа $\text{LiM}^{3+}\text{O}_2$ ($\text{M}=\text{Al}, \text{Ga}, \text{Co}, \text{Cr}, \text{Rh}, \text{Sc}, \text{In}$) с октаэдрич. расположением катионов Li и M^{3+} в области 1500 — 50 см^{-1} методом изотопич. замещения ^6Li — ^7Li . Показано, что колебания M^{3+}O_6 в области 650 — 400 см^{-1} и LiO_6 в области 300 — 200 см^{-1} являются характеристич. Этот вывод, однако, касается только соединений с ромбо-

(+1) Li-соед.

X. 1970. 20



эдрич. структурой, имеющих пространственную группу симметрии $R\bar{3}m$ ($M = Al, Ga, Co, Cr, Rh$), и не может быть распространен на все соединения типа $LiMO_2$. Отмечено, что валентная частота RhO в октаэдре RhO_6 несколько выше, чем соответствующая частота в CrO_6 .
Сробщ. I см. РЖХим, 1967, 21Б426. Е. Разумова

LiAlCl_4

1971.

Drossbach, P;

Hoff H;

и. н.

кв. мет.

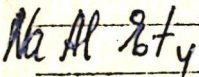
патент.

"Z. Naturforsch", A,

1971, 26, N 9, 1397-406.

● (ссыл. C_2H_2 , III)

BP-I-6790 1971



156576b Vibrational spectra of tetraethylaluminate anions. Wilkie, Charles A. (Dep. Chem., Marquette Univ., Milwaukee, Wis.). *J. Organometal. Chem.* 1971, 32(2), 161-3 (Eng). The vibrational spectra of LiAlEt_4 and NaAlEt_4 are reported. It is concluded that the former has D_{2d} symmetry and that the latter has T_d symmetry.

Спектры

C. A. 1971. 75. 26

$\text{Li}_2\text{Zn}(\text{CH}_3)_4$ (? Li-c) 10 1971
 $\text{Li}_2\text{Al}(\text{CH}_3)_4$ (? Li-c) 85419

Yamamoto J., Wilkie Ch. A.;
Inorg. Chem. 1971, 10(6), 1129-33 (and
Vibrational spectra of lithium
tetramethylaluminate and lithium
tetramethylzincate)

10 7

Ex. CA 1971-15(4), 20714W

AlLi

1973

7 Д130. Расчеты методом ССП МО ЛКАО с использованием гауссовских базисных функций. X. Результаты вычислений для AlLi и замечания о выборе конфигураций при учете конфигурационного взаимодействия. Kaufman Joyce J. LCAO-MO-SCF calculations using Gaussian basis functions. X. AlLi—SCF results and implications for choosing configurations for configuration interaction calculations. «J. Chem. Phys.», 1973, 58, № 4, 1680—1688 (англ.)

(м.и.): Методом ССП МО ЛКАО в приближении Хартри—Фока—Рутана рассмотрена гипотетич. молекула AlLi в нижнем $^1\Sigma^+$ -состоянии. Приведены вычисленные полные энергии молекулы для различных значений межъядерного расстояния, энергии МО и их заселенности, дипольный и квадрупольный моменты, а также главные вклады в сверхкорреляционную энергию AlLi. Суммар-

ф. 1973. № 7

ный вклад в энергию корреляции связи Al-Li оценен равным $\sim 1,5$ эв, что указывает на возможность существования молекул AlLi в сравнительно устойчивой форме. Атом Li в этой молекуле обесцен электронами по сравнению со свободным атомом. Отмечается возможность образования мостиковых связей или образования комплексов между индивидуальными молекулами AlLi . Обсуждается проблема отбора системы виртуальных орбит, которые дают основной вклад в энергию корреляции при проведении расчетов с учетом конфигурац. взаимодействия. Ч. IX см. РЖФиз, 1970, 9Д148. Ю. Удачни

AlLi

1973

14 B21. Расчеты методом ССП МО ЛКАО в базе гауссовых функций. X. Результаты расчета молекулы AlLi и соображения о выборе конфигураций для расчета по методу конфигурационного взаимодействия. Kaufman Joyce J. LC MO—MO—SCF calculations using Gaussian basis functions. X. AlLi—SCF results and implications for choosing configurations for configuration interaction calculations. «J. Chem. Phys.», 1973, 58, № 4, 1680—1688 (англ.)

м.и

Методом ССП МО ЛКАО проведен расчет низшего состояния симметрии $^1\Sigma^+$ молекулы AlLi в базе спондированных гауссовых функций Хузинаги: (4s, 3p) атома Al и (4s, 2p) для атома Li. Межъядерное расстояние Al—Li варьировали от 4,0 до 8,0 ат. ед. Находим, что минимум полной энергии лежит при 5,658 ат. ед. и на 0,01 ат. ед. выше энергии разделенных атомов. Включение d-АО на атоме Al (d_z^2 , d_{yz} и d_{xz} с осью z параллельно линии Al—Li) меняет полную энергию лишь на $7 \cdot 10^{-1}$ эв. Оценка различных вкладов в полную корреляц. энергию и корреляц. вклада в энергию связи показывает, что последний равен примерно —1,52 эв; этого достаточно, чтобы Al—Li оказался стабильнее системы разделенных атомов. Приведены орбитальные энергии, а также пол-

X/973 N/4

ные атомные заселенности и заселенности перекрывания как функции от расстояния. Положит. заряд в соответствии с найденными значениями дипольного момента находится на атоме Li (при равновесном расстоянии 0,15 ат. ед.). Приведены значения парц. заселенностей для равновесного расстояния. Полная заселенность перекрывания (0,56) указывает на образование связанного состояния, причем она определяется не только МО связи (6σ), но также МО, описывающими неподеленную пару Al (5σ) и $2s$ -АО Li. Заселенности практически не меняются при введении d -АО. Предложен принцип отбора конфигураций для расчетов по методу конфигурац. взаимодействия, состоящий в том, что при построении возбужденных конфигураций используются виртуальные МО, к-рые имеют достаточно высокие атомные заселенности для тех же атомов, у к-рых велики атомные заселенности в соотв-щих занятых МО ССП. Сообщ. VIII см. РЖХим, 1971, 1Б27. М. Е. Ерлыкина

LiAlCl₄
4109

1973
Rytter E., Oye H. A., Cyvin S. J., Cyvin B. N.,
Klaeboe P.

М. Н.
Осинка

J. Inorg. Nucl. Chem., 1973,
35, 1185

7

Лиссеу

М. Н.

~~197~~ LiAlCl₄ 1974
2307 Forneris R., Tabares-Forneris Y.

u. n.
Ocena

J. Mol. Struct., 1974, 23, ^{p.}241

4

LiAlCl₄

u. n.

AlO_4^{5-} (vi) ~~1974~~ ¹⁹⁷⁴ X-8999

$Al-O \dots Li^+$ (св. пост.)

Комесова В.А.,

Ис. Неорган. химии, 1974,
19 (10), 2898-9.

Инфракрасный абсорбционный
спектр (Li_5-AlO_4).

С.А. 1975, 82 и 4. 23988 к. 10

Al-Li

Raufman Joyce J.

1974

From Govt Rep Announce.

(U.S) 1975, 75(3) 56.

Кб. мх.
раерм.

(cu B Li₂; III)

X LiAlSi₂O₆

с. стр.
X 1795

1974

Li Chi-Tang, Shlichta P. Y.

Z. Kristallogr., 1974, 190, n 1/2, 100-113
(англ., рус. нем.).

Связь между углом МОМ и стабильностью LiAlSi₂O₆-III и других твердых растворов на основе высокотемпературного кварца.

РХ, 115543 (1975).

Б, Ме

40912.3900
Ch, Ph, TC

$\text{LiF} - \text{Li}_3\text{AlF}_6$

1974

раман-спектр. * 4-6159

Ratkje Signe Kjelstrup, ■ Rytter Erling.

Raman spectra of molten mixtures containing aluminum fluoride. I. The $\text{LiF} - \text{Li}_3\text{AlF}_6$ eutectic mixture.

"J. Phys. Chem.", 1974, 78, N 15, 1499-1502

(англ.)

0188

155. 159

0420

ВИНИТИ

Al Li

Guggi D. J.

1975

(Do)

Bp-9613-X

" 4ème Conf. int. thermodyn.
chim., Montpellier, 1975.
Vol. 3 " S. 1, s.a. 124-131 (auss)

(cu Al Li; I)

60319.8810
TC, Ch, Ph

и. к. Мечер
25071

1976

$\text{LiAlH}_4 \cdot n(\text{OCH}_3)_2$ *43-11817

Fusek J., Hanousek F., Haruda F.
Study of the structure of lithium and sodium hydridoalkoxoaluminates by infrared spectroscopy.

"Collect. Czech. Chem. Commun.", 1976, 41, N1,
187-192 (англ.)

0575 ТУР

558 560

Г 67

ВИНИТИ

Li AlCl₄
4077

1977
Rubbens A., Barbier P., Mairesse G.,
Wallart F., Wignacourt J. P.

M. H.
Ренка

Canadian J. of Spectroscopy,
1977, 22, p. 39

5

LiAlCl₄

M. H.

$\text{BeF}_3, \text{AlF}_4, \text{BO}_2, \text{ReO}_4$

$\text{Li}_2\text{F} \cdot \text{AlF}_4, \text{Li}_2\text{F} \cdot \text{BO}_2$

$\text{Na}_2\text{F} \cdot \text{AlF}_4, \text{Na}_2\text{F} \cdot \text{BO}_2$

$\text{K}_2\text{F} \cdot \text{AlF}_4, \text{K}_2\text{F} \cdot \text{BO}_2$

$\text{Rb}_2\text{F} \cdot \text{AlF}_4, \text{Rb}_2\text{F} \cdot \text{BO}_2$

$\text{Cs}_2\text{F} \cdot \text{AlF}_4, \text{Cs}_2\text{F} \cdot \text{BO}_2$

ВХ-1200

1977

(Al^-)

($\text{BeF}_3, \text{AlF}_4, \text{FeF}_4$) и т.д.

Сидоров Л. Н.

Кафедра химии, 1977, 3, №8, 1128-1139

связь-структура-свойства координационных
соединений мо-алюминия и железа
ионы $\text{BeF}_3, \text{AlF}_4, \text{FeF}_4$.

Резюме, 1978, 1 8 16-1 10, 11

(9)

LiAlCl₄
4078

1978
Rubbens A., Wallart F., Barbier P.,
Mairese G., Wignacourt J. P.

u. n.
Deima

J. Raman. Spectrosc., 1978, 7, 249

G

LiAlCl₄



u. n.

LiAlCl₄
4334

1978
Smyrl N. R., Mamantov G., McCurry J. E.

M. N.
Oscara

J. Inorg. Nucl. Chem., 1978,
40, p. 1489

3

LiAlCl₄

M. N.

$\text{LiAl}(\text{SO}_3\text{Cl})_4$ [unpubl 9045] 1979

U. R. creep - Dhamelicoat -
Di - Veronfeglise M. Cl.
etal.

J. chim. phys. (Fr.)
1979, 76 (10), 919-23

LiAlCl_4

1979
Kirkwood et al.

(excerpt
K.P.)

J. Inorg. Nucl. Chem.
1979, 41 (2), 183-93.



(see SnCl_2 ; III)

LiAlCl_4

3362

1979
Mamantov G., Marazzi R., Poulsen F.
Springer S. E., Wiaux I. P., Huglen R.
Smayda N. R.

Deura
u. h.

J. Inorg. Nucl. Chem., 1979, 41, ^{P.}260

LiAlCl_4

u. h.

1

LiAl
(lang.)

1981

2d. compy

95: 138951d Self-consistent electronic structure of the intermetallic compound lithium-aluminum (LiAl). Asada, T.; Jarlborg, T.; Freeman, A. J. (Coll. Eng., Shizuoka Univ., Shizuoka, Japan 432). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1981, 24(2), 510-16 (Eng). The electronic structure of the intermetallic compd. LiAl, which has a B32 structure, was studied by a self-consistent linear-muffin-tin-orbital method within the at.-sphere approxn. and in the local-d. formalism. The overall band structure and d. of states have a reasonable resemblance with those obtained previously by A. Zunger (1978), except for several important differences near the Fermi energy. Whereas the present results for ideal LiAl give poor agreement with expts. on real (vacancy-defect) LiAl, much better agreement was obtained after accounting for the presence of vacancies by shifting the Fermi level in a crude rigid-band manner corresponding to the vacancy concn. of ~2% estd. exptl. The shifted results gave satisfactory agreement with the existing magnetic-susceptibility and Knight-shift expts., and predicted p-type conduction for the real defect-phase LiAl, in agreement with recent exptl. findings.

C.A. 1981,
95, N16.

$Li(AlH_{k+1})$

1982

$k=2,3$ Boldyrev A.I.,
Sukhanov G.P.,
et al.

у,
теорет.,
практич.

Koord. Khim. 1982,
8 (4), 430-436.

(ср. $(MH_{k+1})^-$; III)

LiAlCl_4
 LiAl_2Cl_7

1982

Б1182. Инфракрасные спектры испускания хлор-
алюминатов и соответствующих расплавов. Infrared
emission spectra of chloroaluminates and related melts.
Hvistendahl Jan. «Avh. Inst. uorg. kjemi», 1982,
№ 39, X, 80 pp. (англ.)

Монография, состоящая из 6 глав и приложения.
В первых 4 главах теоретически обоснован и методи-
чески разработан способ измерения ИК-спектров ис-
пускания относительно летучих расплавов солей при
т-рах до 600°C . Получены выражения, описывающие
испускание многослойных систем, находящихся между
отражающей металлич. подложкой и поглощающим
окном. Показано, что излучательная способность рас-
плава сильно зависит от наличия отражений между
подложкой и окном, искажающих контуры эмиссионных
полос. Для учета этих искажений предложено исполь-
зовать значения эффективной излучательной способно-
сти, равной отношению интенсивностей испускания тон-

ИК спектры

☒ (47)

X. 1984, 19, № 2

кого образца и этого же образца, имеющего существенно большую толщину, при к-рой он является непрозрачным. Предложенным методом измерены ИК-спектры испускания солей $MAlCl_4$ ($M=Li, Na, K, Rb, Cs$), $KMCl_4$ ($M=Al, Ga, In$), MAl_2Cl_7 ($M=Li, Na, K, Cs$), $CsGa_2Cl_7$ и расплавов $NaAlCl_4-Al_2Cl_6$, к-рые приведены в 5-й главе. Шестая глава посвящена обсуждению полученных результатов, отнесениям частот и выводам о структуре солей в тв. состоянии и в расплаве.

А. Н. Курск

6



LiAlF_{k+1}

1982

расчёт
полей, Координаты. Железо,
структ., 1982, 8, N 7, 903-912.

Е.

● (сер. LiF_k)₂; III)

LiAlO_2

1982

Ogden S. Williams
S. J.

Ві доповіді,
Сіруктупе
J. Chem. Soc. Dalton
Trans., 1982, NY,
825-831.

● (ср. LiPO_2 ; III)

LiAlCl_4

1983

LiAl_2Cl_7

Klaeboe P., Rytter E.,
et al.

J. Mol. Struct., 1984, 113;

Vi, uauemp,
curexkm.

Mol. Spectrosc. and Mol.
Struct. 1983, Proc. 16 Eur.
Congr., Sofia, 12-16 Sept,
1983, Pt A, 213-226.

(cer. AlCl_3 ; III)

ALOLi

[От. 17836]

1983

Зюбина Т. С.,
Царкеем О. Н.

ссл.
посл.

ис. неортат. жители,
1983, 28, №12, 3003-3008.

(см. ALOCN_3 ; III)

LiAlH_3
 LiAlH_4

1984

расчет

Гаркис О. П.,
Знобич А. Р. и др.
Тр. Моск. хим.-технол.
иче-т, 1984, N 134,
13-26

(ссыл. $\text{LiHx}^{\pm}$; III)

LiAlCl₄

1984

Curtiss L.A., Blander M.

ab initio
pccrui

J. Electrochem. Soc.
1984, 131(10), 2271-4.

● (see LiAlF₄; III).

LiAlCl₄(2) OM-20746 1984

Curtiss L.A., Blander M.,

J. Electrochem. Soc., 1984,
131, N10, 2271-2274.

u.n.

Li_2AlF_6 | Dm. 20746 | 1984

Curtiss L.A., Blander
M.

во время,
сепр. 1984, 131, N10, 2271-
 ΔH_2 - 2274.

(see LiAlF_4 ; III)

$\text{Li}_2\text{AlF}_3\text{O}(2)$

(Om. 20746)

1984

$\text{Li}_2\text{AlCl}_3\text{O}(2)$

Curtiss L.A., Blander M.

u.n.

J. Electrochem. Soc.,
1984, 131, N10,

2271-● 2274.

[Om. 19309]

1984

MA_2Cl_4

MA_2Cl_7

$M = Li, Na, K, Rb, Cs$

Hvistendahl Z.,
Klaeboe P., et al.,

ИК эмиссион-
спектры

Inorg. Chem., 1984,
23, ● N 6, 706-715.

LiAl_2Cl_7

rec. 18968

1984

Klaebol P., Rytter E., et al
J. Mol. Struct., 1984, 113:
Mol. Spectrosc. and Mol
Struct. 1983, Proc. 16 Eur
Congr., Sofia, 12-16 Sept.,
1983, Pt A, 213-226.

UK chemp
practical,
vi

LiAlH₄

1985

Charikin O.P., Musa-
ev D.G., et al.

структура

и свойствам,

теор. расчёт.

Koord. Khim.

1985, 11 (6), 728-

- 733

(ср. LiBH₄; I)

$\text{LiAlCl}_4 \cdot 3\text{SO}_2$

1985

2 Б1258. Исследование спектров комбинационного рассеяния сольвата $\text{LiAlCl}_4 \cdot 3\text{SO}_2$ как функция от температуры. Raman study of the solvate $\text{LiAlCl}_4 \cdot 3\text{SO}_2$ as a function of temperature. Dhamelin court M. C., Wallart F., Barbier P., Mairiessa C. «17th Eur. Congr. Mol. Spectrosc., Madrid, 8—13 Sept., 1985: EUCMOS XVII. Abstr.» S. 1, s. a., P—145 (англ.)

спектр
комбинац.
рассеяние

X. 1986, 19, 112

AlDi
LiAlD

сент. 24/95

1986

Чаркевич О. П.,
Зюбинева Т. С.

расчет
Евзон. и
барьер
изолер.

Координат. желая,
1986, 12, № 8, 1011-1037.

LiAlF₄

1986

Gutsev G. L.,
Boldyrev A. I.

Кв. мех.
парем.

Zh. Neorg. Khim.,
1986, 31 (9), 2200-4.

(ср. LiBeF₃; III)

LiAlH

1986

18 Б1028. Структура и стабильность комплексных гидридов LMH_{n+1} и продуктов их распада по данным неэмпирических расчетов с учетом электронной корреляции. Зюбин А. С., Горбик А. А., Чаркин О. П. «Ж. неорган. химии», 1986, 31, № 5, 1091—1097

В рамках методов самосогласованных электронных пар и конфигурац. взаимодействия с учетом всех одно- и двукратно возбужденных валентных конфигураций в двухэкспонентном базисе рассчитаны энергии альтернативных конфигураций молекул $LiMgH_3$, $LiAlH$ и различных продуктов их распада. Результаты сравниваются с данными аналогичных расчетов молекул $LiBeH_3$, $LiBH_4$ и продуктов их распада, выполненных ранее в близком по кач-ву базисе 6—31 ГФ**. Анализируется влияние электронной корреляции на относит. энергетич. х-ки гидридов элементов 2- и 3-го периодов.

Резюме

(43)
IX

X. 1986, 19, N 18

Али

осн. 29508

1988

теорет.
расчёт,
характер.
хвост.

Космическо Н. Л.,
Летель А. Л.,
Чаркин О. П.

Ж. структур. химии,
связи. 1988, 29, N 3, 22-27.

Li_2AlH_5

OM. 30151

1988

СМ. УЧ. М.
Ж. ЕН. С. УЧ. М.
МЕОП. ПАЦИЕМ

111: 12742s Potential surface of dilithium pentahydroaluminate by the MO LCAO SCF method. Ozerova, V. M.; Kononov, S. P.; Solomonik, V. G. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Koord. Khim.* 1988, 14(10), 1341-4 (Russ). The energetic stability and the geometry of the Li_2AlH_5 mol. were studied using the Hartree-Fock-Roothan method with a 2-exponent basis. The ground state has a C_{2v} symmetry with a planar 6-member ring perpendicular to the plane of the AlH_2 fragment. The geometry of the ground state was detd. The relative energies of the alternative configuration were refined using an extended basis with polarization functions at the H and Al atoms.

C.A. 1989, 111, N 2

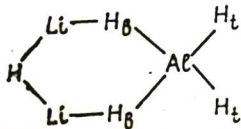
Li_2AlH_5

01130151

1988

12 3 Б1035. Исследование потенциальной поверхности молекулы Li_2AlH_5 методом МО ЛКАО ССП / Озерова В. М., Коновалов С. П., Соломоник В. Г. // Координац. химия.— 1988.— 14, № 10.— С. 1341—1344.— Рус.

Методом Хартри—Фока—Рутана в двухэкспонентном базисе изучены энергетич. стабильность и геометрич. строение молекулы Li_2AlH_5 . Основной является



структура симметрии C_{2v} вида с плоским шестичленным циклом, перпендикулярным плоскости концевой фрагмента AlH_2 . Равновесные параметры этой конфигурации: $R(\text{Al}-\text{H}_t) = 1,589$, $R(\text{Al}-\text{H}_b) = 1,665$, $R(\text{Li}-$

х. 1989, №3

$r_b) = 1,784$, $R(\text{Li}-\text{H}) = 1,738 \text{ \AA}$, $\alpha(\text{H}_t\text{AlH}_t) = 120,5$,
 $\alpha(\text{LiHLi}) = 112,2$, $\alpha(\text{LiH}_b\text{Al}) = 137,2$, $\alpha(\text{HLiH}_b) = 117,7$,
 $\alpha(\text{H}_b\text{AlH}_b) = 97,9^\circ$. Относит. энергия альтернативных
 конфигураций Li_2AlH_5 и энергии мономолек. распада
 по различным каналам, самый выгодный из к-рых
 $\text{Li}_2\text{AlH}_5 \rightarrow \text{LiH} + \text{LiAlH}_4$ (1), уточнены в расчетах с рас-
 ширенным базисом, дополненным поляризац. ф-циями
 на атомах H и Al. Найдено, что структуры молекулы,
 содержащие анион AlH_5^{2-} , различным образом коор-
 динированный катионами Li^+ , лежат по энергии на
 $\sim 100 \text{ кДж/моль}$ выше основной. Энергия $\Delta E(1)$ равна
 164 кДж/моль . Автореферат



Li_2AlH_5

От 30 151

1988

1 Д47. Исследование потенциальной поверхности молекулы Li_2AlH_5 методом МО ЛКАО ССП / Озерова В. М., Коновалов С. П., Соломоник В. Г. // Координац. химия.— 1988.— 14, № 10.— С. 1341—1344

Методом Хартри—Фока—Рутана в двухэкспонентном базисе изучены энергетич. стабильность и геометрич. строение молекулы Li_2AlH_5 . Основной является структура симметрии C_{2v} . Относит. энергия альтернативных конфигураций Li_2AlH_5 и энергии мономолекулярного распада по различным каналам, самый выгодный из которых $\text{Li}_2\text{AlH}_5 \rightarrow \text{LiH} + \text{LiAlH}_4$, уточнены в расчетах с расширенным базисом, дополненным поляризац. ф-циями на атомах Н и Al. Найдено, что структуры молекулы, содержащие анион AlH_5^{2-} , различным образом координированный катионами Li^+ , лежат по энергии на ~ 100 кДж/моль выше основной. Энергия ΔE (1) равна 164 кДж/моль. Автореферат

М.П.

ср. 1989, №1

Li_nAl
 $n=1\div 4$

М.А.

(7) $\boxtimes$

фр. 1988, 18, n 9

1988

9 Д138. Электронное строение и геометрические параметры гетероатомных кластеров. Electronic structure and geometries of heteroatomic clusters. Rao B. K., Jena P. «Phys. Rev. B: Condens. Matter», 1988, 37, № 6, 2867—2873 (англ.)

Строение кластеров Li_nAl , $n=1\div 4$, и Li_nMg , $n=1\div 7$, в основных электронных состояниях исследовано методами ССП и конфигурац. взаимодействия с учетом двукратных возбуждений хартри-фоковской конфигурации. Определены равновесные геометрич. параметры кластеров, энергии атомизации и удаления гетероатома, потенциалы ионизации; проанализированы распределения зарядовой плотности. Образование связи гетероатома с атомами Li объяснено значительным переносом электронной плотности от гетероатома. Зависимость энергии этой связи от n достаточно быстро достигает насыщения. Альтернирование свойств кластеров Li_nMg с четными и нечетными n аналогично установленному экспериментально для K_nMg .

А. В. Зайцевский

Li_nMg $n=1\div 7$

Li_3AlH_6

1989

110: 162726h Comparative study of hexahydro- and hexadeu-
terioaluminates of lithium and sodium. I. Raman and infrared
spectra of Li_3AlH_6 , Na_3AlH_6 and Li_3AlD_6 . Bureau, Jean Claude;
Amri, Zina; Claudy, Pierre; Letoffe, Jean Marie (Lab. Thermochim.
Miner., CNRS, F-69621 Villeurbanne, Fr.). *Mater. Res. Bull.* 1989,
24(1), 23-31 (Fr). Raman and IR spectra of Li_3AlH_6 , Na_3AlH_6 , and
 Li_3AlD_6 were investigated in order to study metal-H interactions. A
vibrational anal. was performed. Several force field models (Urey, H.
C., Bradley, C. A.; 1931 Orbital Valence force field, Shimanouchi, T.,
Nakagana, I., 1962, Murrell, N. N., 1969) were used in order to
compute the force consts. of Al-H bonds. No significant difference
was obsd. between the results obtained from the various models, and
the environment of Al was detd.: AlH_6^{3-} forms an almost perfect
octahedron in Li_3AlH_6 and a distorted one in Na_3AlH_6 .

(UK u CRP)

(42) 



Na_3AlH_6 , Li_3AlD_3

C.A. 1989, 110, N 18

Li_3AlD_3

1989

Bureau Jean Claude,
Amre Zina et al.

UK₄

Mater. Res. Bull. 1989,

CRP

24 (1), 23-31.

(cell.  Li_3AlH_6 ; III)

LiAlO_2

(OM · 32 269)

1989

Исхаев Д. Г., Яковсон В. В.
и др.,

структура,
стабильн.,
теорет.
расчет.

Же. Неорг. химии,
1989, 34, № 8, 1946-52.

LiAlO_2

(Dm 32269)

1989

Мусаев Д.Г., Яковсон В.В.
Чаркин О.Т.

и.и.

М. неорган. химии, - 1989. -
34, ~ 8. - С. 1946 - 52

(См. LiBO_2 , III)

LiOAlS

LiAlS₂

структура,
стойкость,
теорет.
расчет.

(ДМ. 32269) 32269

1989

Мусаев Д.Т., Якобсон В.В.
и др.,

Ж. Неорган. химии,
1989, 34, № 8, 1946-52.

LiAlS_2 OM 32269 1989

Мусаев Д. Т.,
Яковсон В. В. и др.

Ж. неорг. хим.

М. П.

1989. 34, N 8. С. 1946-
1952.

(сост. LiOBO ; III)

LiAlF₂ om 31253, 32047 1989

Seleznov V. V.,

Solomonik V. G. et al

pacrēm
c. n.,
Zekmp.
Cocci.

Zh. Neorg. Khim. 1989,
34(3), 549-55.

●
(c.c.c. LiBF₂; III)

LiAlH_4

(М. 3253), 32047 1989

Смуглов В.В., Соломонов В.Г.

и др.,

теорет.
расчет
структ.
и
стабильн.

Ж. Неорг. химии,
1989, 34, № 3, 549-555.

LiAlF_2 (от. 31 253), 32047 1989

Слизнев В.В., Соловьев В.Б.

теорет.

и ур.,

расчет
структ.

Же. Морган. Желесы,

1989, 34, N 3, 549-555.

и
таблицы.

LiAlS⁻ (M 30950) 1989
Yakovson V. V.,
Musaev A. G. et al.

геодезия,
структура,
измерения

Zh. Strukt. Khim.
1989, 30(1), 19-28.

(ср. ● LiSiN⁻; III)

LiAlF₄

(DM-30950)

1989

Яковсон В.В., Мусаев Д.Т.
и др.,

(Изотерия) Ис. структур. химии,
1989, 30, №1, 19-28.

LiALS

(DM. 30950)

1989

Якобсон В.В., Мусеев А.Т.
и др.,

(Измерения) ж. структур. химии,
1989, 30, N1, 19-28.

LiAlO (DM 30950) 1989

Яковсон В.В., Мусаев А.Т.
и др.,

(Измерения) ж. структур. химии,
1989, 30, N1, 19-28.

LiAlCl_4^+ DM 30950 1989

Yakovson V. V.,
Musaev D. G. et al.

резонанса, Zh. Strukt. Khim.
структура, 1989, 30(1), 19-28.
резонанса

(сер. LiSiN^- ; III)

1989



Знобич А.С.,

Чаркин О.П.

ЖС. структур. химия.

м.п.

1989. 30, N 5. с. 21-26.

(сер. LiBH_4 ; III)

LiAlH⁺

(Dm 32240)

1989

Зюбен А.С., Таркент О. 17.

потенц.
поверхн.
расст

м. структура химичес., 1989,
30, ~ 3, 19-23

● (Сст. LiBH⁺, 1, III)

Li A-ell⁺

(DM-32240)

1989

Знобич А. С., Таркент О. П.

потенц.

поверх.

расчет

м. структур. химии,
1989, 30, ~ 3, 19-23



(Св. Li BM⁺, III)

LiAlF⁺

(ВМ 32240)

1989

Знобич А.С., Чаркис О.П.

печень.

поверхн.,
расчет

м. структуры хлоридов,
1989, 30, ~ 3, 19-23

● (См. Li BM, ⁺III)

Li AlF^+

(ом. 32240)

1989

Li AlCl^+

Зюбин А.С., Чаркин О.П.,

теорет.
расчет
потенци-
лов.

ж. структур. химии,
1989, 30, № 3, 19-23.

ЛиАи

№ 32685

1989

Зюбин А.С., Чаркин О.Б.,

потенц.
поверхн.,
медантр.
расчет

ге. структур. химии,
1989, 30, 45, 21-26.

1990
 $Cs H_5 Al Li_2$ Гусовцев Л. Н.,
Семкин Б. Я. и др.

Л. Н. Ж. орган. химии. 1990.
36, N 1. С. 210-212.

(сер. $H_2 B Li_2$; III)

LiAlH_4 и др. Знобин А.С.,
Горбик А.А. и др. 1990

Химия неорганич. соединений:
и н. Докл. Ч Вses: совещ., Душанбе,
1987: сб. науч. тр.: АН СССР.
Уч.-м. общ. и неорганич. химии.
М., 1990. С. 182-193.
(сер. LiBH_4 ; III)

LiAlO^+
2

1991

Musaev D.F., Yakobson V.V.,
et al.,

структура,
стабильность,
теор. расчет

Zh. Neorg. Khim. 1991,
36(9), 2840-7

(all Li_2 BO^+ ; III)

Li_2AlSi^+

1991

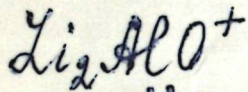
Мусаев Д. Г., Якобсон В. В.
и др.

М. П.

Ж. Неорган. химии. 1991.

36, № 9. С. 2340-2347.

(ср. $\bullet \text{Li}_2\text{BO}^+$; III)

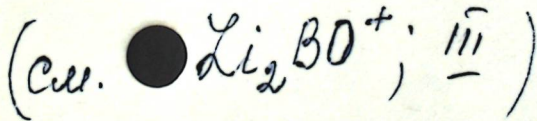


1991

Мусаев Д.Т., Яковсон В.В. и др.

и др.

Ж. Неорган. химии. 1991.

36, № 9. С. 2340-2347.

LiAlF_4

1991

Ramondo F., Bencivenni L. et al.

эксперимент,
теор.
расчет

Chem. Phys. 1991. 158,
N 1. C. 41-57.

(ср. LiBF_4 ; III)

LiAlF_3

Ramondo F.,
Bencivenni L., et al.

1991

расчет
электрон.
структуры.

Chem. Phys. 1991. 158,
N 1. C. 41-57.

(сер. ● LiBF_3 ; III)

LiAlF_2 Соломонок В. Г., 1991
Смизнев В. В.,

и.п. Координат. химия. 1991.
17, № 9. с. 1197-1206.

(с.ч. ● LiMgF ; III)

LiAlH_4

Соломонок В.Т.,
Слизнев В.В.,

1991

и.п. Координат. химия. 1991.

17, № 9. С. 1197-1206.

(ср. ● LiAlH_4 ; III)

LiBAlH_4 , от 35836 1991
 $\text{Li}^+\text{Al}_2\text{H}_7$ Зюбин А. С.,
Мусаев Д. Т., Чаркин О. П.

Ис. Меорган. химии. 1991.
М. П.
36, № 9. С. 2330-2339.

(ср. ● $\text{Li}^+\text{B}_2\text{H}_7$; III)

$\text{Li Al}_2\text{H}_7$ (DM 35836) 1991

Зюбин А.С., Мусалев Д.Т. и др.

Структура,
кв.-хим.
расчеты

Изв. Меорван. химии,
1991, 36, N 9, 2330-2339.

Квантово-химические исследов.
структуры и  стабильности

Ковалентных соединений
 YB_2H_7 , $YBAH_7$ и YAl_2H_7
($Y = Li^+$, Na^+ , Cu^+).

Г. Д. С.

1991

Структ.

Губина Т. С.

Чаркин О. Р.

суд.

З. Н. Невг. Р. М.

мер. расч. 1991, 36, (12), 3086

суд.

Г. Д. С. (11)

LiAlO_2 Bencivenni L., 1992
Pelino M. et al.

теор. y. Mol. Struct. Theo-
chem. 1992. 253. C.
раств. 109-120.

(ср. ● Al_2O_3 ; III)

LiAlS_2

1992

Bencivenni,

Pelino M. et al.

M.N. J. Mol. Struct. Theochem.
1992. 253. C. 109-120.

(Cu.  Al_2O_3 ; III)

LiOAlS

1992

LiSAlO Bencivenni L.,
Pelino M. et al.

J. Mol. Struct. Theochem.

N. N. 1992. 253. C. 109-120.

(C.M. ● Al_2O_3 ; III)

$(\text{LiAlS})_2$

1992

Мусаев Д. Т.,
Якобсон В. В. и др.

м. п. Ж. сѣруктур. хим.
мем. 1992. 33, в 1.
с. 10-17.
(см. $(\text{LiBO})_2$; III)

$(\text{LiOAl})_2$

1992
Мусаев А.Т.,
Якобсон В.В. и др.

ж. структур. химии.

и. п. 1992. 33, № 1. С. 10-17.

(см. ● $(\text{LiBO})_2$; III)

LiAlCl_4

1992

Ramondo F.,
Bencivenni L. et al.

соединения, THEOCHEM. 1992,
vi, теор. 96, 171-84.
раствор

(cell. Mg_2F_4 ; III)

LiAlF₄

1992

Politi M., Sanna N., et al.,

J. Mol. Struct. Theochem. —
1992, 258, N1-2, C-251-260

M.N.

(Cell - LiBF₄; III)

Li^+Al

Li^+Al^+

Li^+Al^-

ab initio
расчёты

осн. осес.,
и.п.

1993

Boldyrev A. I.,

Simons J. et al.

J. Chem. Phys. 1993,

99(11), 8793-504.



(осес. Li_2 ; III)

AlLi_n

$n \leq 6$

1993

119: 211206k Energetics and structures of aluminum-lithium clusters. Cheng, Hai Ping; Barnett, R. N.; Landman, Uzi (Sch. Phys., Georgia Inst. Technol., Atlanta, GA 30332 USA). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1993, 48(3), 1820-4 (Eng). Energetics and structures of small aluminum-lithium clusters were investigated using structure minimization and dynamic simulated annealing on the electronic Born Oppenheimer surface, calcd. via the local spin- σ -d-functional method in conjunction with nonlocal pseudopotentials. It is suggested that evolutionary patterns of electronic structure, energetics, and binding in $AlLi_n$ clusters may be analyzed within a framework where at.-based characteristics, assocd. mainly with closing of the Al 3p shell, dominate for $n \leq 5$, while a perturbed delocalized electronic cluster-shell pattern, contg. an $AlLi_5$ core, develops for larger clusters (i.e., for $n \geq 6$). The ground-state electronic and geometrical structures of $AlLi_n$ clusters, as well as those of $AlLi_{10}$ which may be viewed as two slightly distorted $AlLi_5$ units bonded to each other, are discussed.

структура
и

состав, мео. связь

C. A. 1993, 119, N. 20

LiAlF_4

1993

121: 308769a Ab initio molecular orbital calculations of molten salt vapor complexes using Gaussian-2 theory: LiAlF_4 and NaAlF_4 . Curtiss, L. A. (Chemical Technology Division, Argonne National Laboratory, Argonne, IL 60439-4837 USA). *Proc. - Electrochem. Soc.* 1993, 93-9 (MOLTEN SALT CHEMISTRY AND TECHNOLOGY 1993), 31-41 (Eng). The structures and energies of the molten salt vapor complexes LiAlF_4 and NaAlF_4 are studied using new high level ab initio MO methods. The structures are detd. using Moeller-Plesset perturbation theory to second-order and the total energies are detd. using a recently introduced modification of Gaussian-2 (G2) theory. The total energies are used to det. relative energies of the corner-, edge-, and face-bridged structures and accurate reaction energies. The results are compared to previous theor. and exptl. studies.

структура
и энергии,
меж-пачет

⊗ ⊕ NaAlF_4

с.А. 1994, 121, № 26

$\text{Li}_2\text{Al}_2\text{H}_8$

1993
УДК 515.1044. Квантово-химическое исследование структуры и стабильности димера алюмогидрида лития $(\text{LiAlH}_4)_2$ / Зюбин А. С., Чаркин О. П., Шлойер П. ф. Р. // Ж. неорганич. химии. — 1993. — 38, № 8. — С. 1400—1408. — Рус.

В рамках неэмпирич. подхода на уровне ССП/3-21 ГФ* с использованием аналитич. градиента рассчитаны геометрич. параметры, определен характер стац. точек потенциальной поверхности, вычислены энергии нулевых колебаний для различных конфигураций системы $\text{Li}_2\text{Al}_2\text{H}_8$. Относит. стабильность этих конфигураций и энергии распада основного изомера на более простые фрагменты уточнены с учетом электронной корреляции в рамках четвертого порядка теории возмущений (МП40ДТЧ6-31ГФ**). На примере расчетов LiAlH_4 показано, что дальнейшее уточнение результатов (реоптимизация геометрич. параметров с учетом электронной корреляции и расчет энергетич. х-к с использованием более гибких базисов) не приводит к существенным измене-

LiH

М.П.

Х. 1994, N1

ниям рассчитанных величин. Найдено, что строение основного изомера $\text{Li}_2\text{Al}_2\text{H}_8$ соответствует солеобразной структуре симметрии C_{2h} с ионами Li^+ и AlH_4^- , причем каждый из катионов Li^+ координирован с четырьмя атомами H. Конфигурации с более низкими координац. числами Li^+ менее стабильны, при этом структуры, в к-рых хотя бы один Li^+ является трехкоординированным, соответствуют локальным минимумам потенциальной поверхности. Еще менее выгодны солеобразные структуры типа $\text{Li}_2\text{H}^+ \cdot \text{Al}_2\text{H}_7^-$, хотя конфигурации с бидентатной координацией групп AlH_3 к катиону Li_2H^+ являются стабильными изомерами. Обмен протонов между двумя группами AlH_4 по симм. внутримолек. каналу энергетически невыгоден. Наиболее вероятный путь такого обмена связан с отрывом фрагмента AlH_3 и требует примерно таких же затрат энергии, что и разделение $\text{Li}_2\text{Al}_2\text{H}_8$ на две молекулы LiAlH_4 . Библ. 49.

AlLi

(DM. 37 773)

1994

D,

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

Знаменит,
неопен-
панем

J. Phys. Chem., 1994,
98, N 40, 9931-9944

LiAl

Im. 38263

1994

конст.
запрт,

Brock L.R., Pilgrim J.S.,
Duncan M.A.,

Do
gme
очк.
coet

Chem. Phys. Lett., 1994,
230, 93-98

Photoionization ● spectroscopy of
LiAl

Li_3Al

1994

121: 92422g Stabilities and vertical excited states of Li_3Al and Li_2B_2 . Zhang, Huabei; Tian, Anmin; Yan, guosen (Chem. Dep., Sichuan Univ., Chengdu, Peop. Rep. China 610064). *Wuli Huaxue Xuebao* 1994, 10(6), 481-3 (Ch). The equil. geometries of Li_2B_2 and Li_3Al were optimized with the energy gradient method by using

a double-zeta plus polarization (DZP) basis set. The vertical electronic excitation energies and oscillator strengths were obtained from ab-initio CI calcns. The transitions to 1^1B_1 , 2^1B_1 , 5^1A_1 of $\text{AlLi}_3(\text{C}_{2v})$ and 1^1B_2 , 2^1A_1 , 3^1B_2 , 3^1A_1 of $\text{AlLi}_3(\text{D}_{3h} \rightarrow \text{C}_{2v})$, and 3^1B_2 , 1^1B_1 , 4^1A_1 of $\text{B}_2\text{Li}_2(\text{C}_{2v})$ and 1^1B_{2u} , 2^1B_{1u} , 3^1B_{3u} of $\text{Li}_2\text{B}_2(\text{D}_{2h})$ have significant oscillator strengths.

структура
и стабильн.
теор. расчет

⑦ Li_2B_2



C. A. 1994, 121, N8.

ALLi⁺₆

1995

Ivanick J.,
Charikin O. P. et al.

at initio
расчёты
еемоделью.
и ее фукт.

Jh. Neorg. Khim.,
1995, 40(11), 1892-
-9

(сер. ALLi₆; III)

Al Lis

1995

Ivanic, J., Charvin O.P.,
et al,

непрет
расет

Lh Neorg Khim, 1995,
40(6), 1000-4.

(coll. B Lis; III)

AlLi₆

1995

124: 98224c Trigonal-twist rearrangement in hexalithide AlLi_6 clusters with 8 and 10 valence electrons: an ab initio study. Ivanich, J.; Charkin, O. P.; Klimenko, N. M.; Marsden, C. J. (Inst. Chem., Univ. Melbourne, Australia). *Zh. Neorg. Khim.* 1995, 40(11), 1892-9 (Russ). High-precision ab initio calcns. are presented (MP4S/DZP//HF/DZP + ZPE(HF/DZP) and QC1-SD(T)/DZP//MP2/DZP + ZPE(MP2/DZP)) on O_h and D_{3h} geometries of BeLi_6 , CLi_6 , SiLi_6 , AlLi_6^+ , NLi_6^+ , PLi_6^+ , BLi_6^+ in singlet state. The barrier for the trigonal-twist rearrangement $O_h \rightarrow D_{3h} \rightarrow O_h$ is not higher than 10-17 kcal/mol for the third-row elements. Data are presented for the geometry, total energy, relative energies, vibrational frequencies, orbital energies and electronic charges.

ab initio
расчет
и структура

(76) 

C. A. 1996, 124, N 8

Li AlH₄

1995

Schreiner Peter R., Schaefer H.F;
et al.,

u.n. J. Chem. Phys., 1995,
103, N 13, C. 5585-69

(all. • AlH₃; III)

1995

F: HALLIF

P: 3

9Б171. эмпирическое исследование геометрии HXLiF ($\text{X}=\text{B}, \text{Al}$) / Wang Y.-X., Liu C.-B., Deng C.-H. // Gaodeng xue xiao huaxun xue bao = Chem. J. Chin. Univ. - 1995. - 16, N 9. - С. 1445-1448. - Кит.; рез. англ.
эмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 6-31ГФ{*} исследован электронное строение HXLiF , $\text{X}=\text{B}, \text{Al}$. Показано, что для $\text{X}=\text{B}$ наиболее стабильна тригональная, а для $\text{X}=\text{Al}$ - четырехчленная циклич. структура
Обсуждена природа связи в этих соединениях.

Р. ЖС. Х. N 9, 1996

1995

F: AlLi_3

P: 3

1Б138. Геометрическая структура и вертикальные возбужденные состояния AlLi_3 / Zhang Hua-Bei, Tian An-Min, Yan Guo-Sen // Huaxue xuebao = Acta chim. sin. - 1995. - 53, N 6. - С. 538-542. - Кит.; рез. англ. Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в двухэкспонентном базисе с включением поляризац. ф-ций и с учетом КВ рассчитана равновесная геометрия AlLi_3 . Также рассчитаны энергии и силы осцилляторов вертикальных переходов.

Р. Ж. Х. N1, 1996

Li_3Al

1995

123: 123687v Geometric structures and vertical excited states of Li_3Al . Zhang, Hua-Bei; Tian, An-Min; Yan, Guo-Sen (Chemistry Dep., Sichuan Univ., Chengdu, Peop. Rep. China 610064). *Huaxue Xuebao* 1995, 53(6), 538-42 (Ch). The equil. geometries of the heteroat. cluster AlLi_3 have been optimized with the energy-gradient method by using double-zeta plus polarization (DZP) basis set. The vertical excitation energies and the oscillator strengths have obtained from the ab-initio CI method. Transitions to 1^1B_1 , 2^1B_1 , 5^1A_1 of AlLi_3 (C_{2v}), 1^1B_2 , 2^1A_1 , 3^1B_2 , 3^1A_1 of AlLi_3 ($\text{D}_{3h} \rightarrow \text{C}_{2v}$), 3^1B_2 , 1^1B_1 , 4^1A_1 of B_2Li_2 (C_{2v}), and 1^1B_{2u} , 2^1B_{1u} , 3^1B_{3u} of Li_2B_2 (D_{2h}) have considerable values of the oscillator strength. The single excitations (particle-hole transitions) dominate in states with large intensity.

структура

и

вертикаль

н. коэф. осц.

теор. расчет

С.А. 1995, 123, N 10

F: LiAl₂H₇

P: 3

17B134. Неэмпирическое исследование стабильности и структурной нежесткости аниона Al[2]H[7]{-} и молекул LiAl[2]H[7], Al[3]H[7] / Чаркин О. П., МакКи М. Л., Шлойер Р. // Ж. неорган. химии. - 1996. - 41, 12. - С. 2080-2095. - Рус.

Выполнены неэмпирические расчеты (QSI-SD(T)/6-31+G{**})//MP2/6-31G{*}+ZPE(MP2/6-31G{*})) с использованием квадратичного метода КВ и приближения МП2 участков поверхности потенциальной энергии в окрестности различных структур биядерного аниона Al[2]H[7]{-} и молекул LiAl[2]H[7], Al[3]H[7]. Определены их равновесные геометрические параметры, частоты нормальных колебаний, относительные энергии и энергии распада. Для аниона наиболее выгодна структура C[2] с изогнутым мостиком (угол AlHAl'ПОДОБН'145°), чрезвычайно нежестким к изгибу и вращениям групп AlH[3], но весьма жестким (барьер 'ПОДОБН'12.5 ккал/моль) к терминально-мостиковому обмену протонов. В молекуле соли LiAl[2]H[7] катион Li{+} располагается над мостиком Al-H-Al, а анион в поле катиона становится более жестким. Для молекулы Al[3]H[7] локализовано шесть низколежащих локальных минимумов, отвечающих изомерам ионных пар Al{+}*Al[2]H[7]{-}, Al[2]H[3]{+}*AlH[4]{-} и замещенного диалана Al[2]H[5](AlH[2]) с группой AlH[2] в терминальной позиции. Обсуждены возможные механизмы нежестких внутримолекул. перегруппировок в этих алюмогидридах, подчеркнута необходимость многоструктурного динамического подхода при описании их геометрического строения. Библи. 32.

РМХ 1

Li AlH₄

1996

126: 148808k Ab initio study of the stability and structural non-rigidity of the anion Al_2H_7^- and molecules LiAl_2H_7 , Al_3H_7 . Char-kin, O. P.; McKee, M. L.; Schleyer, P.v.R. (Inst. Nov. Khim. Probl., RAN, Chernogolovka, Russia). *Zh. Neorg. Khim.* 1996, 41(12), 2080-2095 (Russ), MAIK Nauka. Potential surfaces are calcd. of the title compds. by QCI-SD(T)/6-31+G**//MP2/6-31G*+ZPE(MP2/6-31G*) as well as their equil. geometries, vibrational frequencies, relative energies, and heats of dissocn. The nonrigidity in respect to mol. distortions and at. exchanges are discussed.

стабильн.,
структура -
теор. расчет

Q

(12)

C. A. 1997, 126, N 11

F: LiAl₂F₇

P: 3

17Б135. Неэмпирическое исследование стабильности структуры и нежестких внутримолекулярных перегруппировок у биядерных фторалюминатов Al[2]F[7]{-}, LiAl[2]F[7] и Al[3]F[7] / Чаркин О. П., Клименко Н. М., МакКи М. Л. // Ж. неорганической химии. - 1996. - 41, Т. 2. - С. 2096-2104. - Рус.

Выполнены неэмпирические расчеты в приближениях ХФ и МП2 (MP2/6-31G{*})//HF/6-31G{*}+ZPE(HF/6-31G{*})) потенциальной поверхности низлежащих структур аниона Al[2]F[7]{-} и молекул LiAl[2]F[7] и Al[3]F[7]. Определены их равновесные геометрические параметры, частоты нормальных колебаний, относительные энергии и энергии распада на фрагменты. Для аниона предпочтительна структура C[s] с изогнутым мостиком, чрезвычайно нежестким к изгибу и вращениям групп AlF[3], но весьма жестким (барьер 'ПОДОБН'12 ккал/моль) к терминально-мостиковому обмену атомов F. В молекуле LiAl[2]F[7] катион Li{+} располагается над мостиком Al-F-Al. Молекуле Al[3]F[7] также отвечает структура ионной пары Al{+}*Al[2]F[7]{-}, нежесткая как к изгибам мостика и вращению группы AlF[3], так и к терминально-мостиковому обмену. Результаты сопоставлены с данными аналогичных расчетов родственных гидридов Al[2]H[7]{-}, LiAl[2]F[7] и Al[3]H[7], отмечена резкая стабилизация мостиковых структур с пятикоординационным атомом Al при переходе от Al[3]H[7] к Al[3]F[7].

Р.В.

Al_nLi

n=1,13

1996

(126: 65689w Ground state geometries and energetics of Al_nLi (n = 1, 13) clusters using ab initio density-based molecular dynamics. Majumder, C.; Das, G. P.; Kulshrestha, S. K.; Shah, Vaishali; Kanhere, D. G. (Chem. Div., Bhabha Atomic Research Centre, Bombay, 400 085 India). *Chem. Phys. Lett.* 1996, 261(4,5), 515-520 (Eng), Elsevier. Based on orbital-free, ab-initio, mol.-dynamics calcns., the geometries and energetics of lithium-doped aluminum clusters (Al_nLi, n = 1, 13) have been investigated. It is seen that, a single impurity of Li affects the geometries of small (n < 6) clusters, and this effect is less pronounced for larger clusters. The results suggest extra stability for the Al₃Li, Al₆Li and Al₁₃Li clusters, which are in contrast with our earlier results on Li_nAl. The results indicate that the Li atom segregates to the surface of the aluminum cluster and prefers to form a tetrahedron, wherever possible, with one of the triangular faces of Al atoms. In particular, for Al₁₃Li, the Al₁₃ core takes the most sym. icosahedral form with the Li atom occupying the outer 'hollow-site'.

ab initio
расчет
компьют.
и эксперим.
данные

носом

C.A. 1997, 126, N5

Li_nAl_m

1996

125: 19493j. Ground-state geometries and the stability of some Li_nAl_m clusters investigated using density-based ab initio molecular dynamics. Shah, Vaishali; Kanhere, D. G. (Dep. Physics, Univ. Poona, Pune, 411 007 India). *J. Phys.: Condens. Matter* 1996, 8(17), L253-L260 (Eng). D.-based ab initio mol. dynamics has been used to investigate the stability and ground-state geometries of heteronuclear clusters of Li_7Al_n ($n = 1, 7$) and Li_nAl ($n = 1, 8$). The s-p bonded electrons favor a tetrahedral coordination, which plays a significant role in stabilizing the geometries of these clusters. A remarkable ground-state structure is reported for the Li_8Al_6 cluster, namely a face-centered cube with the Al atoms at the face centers forming an octahedron and Li atoms at the corners of the cube. These clusters do not conform to the magic shell nos. obsd. for homonuclear alkali atom clusters.

Структура
и стабильность,
ab initio
методом

C. A. 1996, 125, N 2

LiAlF₄

1996

11Б164. Неэмпирическое исследование с учетом электронной корреляции изомерии комплексных молекул типа MAF_4 ($M=Li, Na, K$; $A=Al, Ga$) / Слизнев В. В., Соломоник В. Г. // 1 Регион. межвуз. конф. «Актуал. пробл. химии, хим. технол. и хим. образ.»: «Химия-96», Иваново, 22—26 апр., 1996: Тез. докл.— Иваново, 1996.— С. 28—29.— Рус.

Методами Хартри-Фока-Рутана и теории возмущений Меллера—Плессета второго порядка в базисах сгруппированных гауссовых функций изучены геометрическое строение, силовые поля, частоты нормальных колебаний и интенсивности полос в ИК-спектрах молекул MAF_4 . Показано, что структура, соответствующие би- и тридентатной координации атома щелочного металла фрагментом AF_4 являются изомерами, а монодентатные конфигурации соответствуют седловым точкам на поверхности потенциальной энергии молекул MAF_4 . Выявленная в расчетах тенденция стабилизации тридентатного изомера по сравнению с бидентаным в ряду молекул $LiAF_4 \rightarrow NaAF_4 \rightarrow KAF_4$ показала, что у фторалюминатов

и.п.

(15)

15

X. 1997, N 15 $LiGaF_4, NaAlF_4, NaGaF_4$

и фторгаллатов более тяжелых щелочных металлов (Kb и Cs) в качестве основной следует ожидать тридентатную структуру симметрии C_{3v} . Изучены закономерности изменения геометрических параметров и силовых полей молекул MAF_4 в рядах $LiAF_4 \rightarrow NaAF_4 \rightarrow KAF_4$ и при переходе от фторалюминатов к фторгаллатам щелочных металлов. Проведен совместный анализ неэмпирических и имеющихся в лит-ре эксперим. данных о молек. параметрах рассмотренного класса соединений.

$KAlF_4, KBrF_4$



Li_kAl_j

1996

126: 122801c The bonding properties of mixed clusters Li_kAl_j ($k, j \leq 3$). Zhang, Huabei; Zhang, Jinglai; Li, Zerong; Tian, Anmin; Yan, Guosen (Dept. of Chemistry, Sichuan Univ., Chengdu, Peop. Rep. China 610064). *Sichuan Daxue Xuebao, Ziran Kexueban* 1996, 33(3), 307-310 (Ch), *Sichuan Daxue Xuebao Bianjibu*. The equil. geometries of mixed clusters Li_kAl_j ($k, j \leq 3$) were optimized at the ab initio 3-21G level by using the energy gradient method. Occupied canonical MOs (CMO) were detd. using the Boys localization method. The anal. of the properties of LMOs showed two-center, multi-center, bending bonds and lone-pair electrons in these clusters. The relationships between bonding properties and stabilities are discussed.

cmp-pa,
cmatunbH,
meop. pacuT



C.A. 1997, 126, N 9

1997

AlD₂⁺
AlS₂⁺

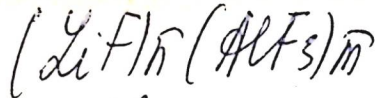
Charkin O. et al.,

Zh. Neorg. Khim. 1997,

42 (11), 1285-95

неорем.
расем
Di, составлен.
суп-рт

(Cu. Li₂ • BO⁺, III)



1997

$m, n = 1, 2$

Scholz B. et al.,

сmp-ра,
смагучесть,
теорет.
расчет

J. Fluorine Chem. 1997,
86 (2), 181-42.



1997

Li_nAl_n

n = 1-10, 12

смагнута
и смекта-
бач. та-
ко смогнута,
млоп. павет

C. A. 1997, 127, N 5

127: 71156g An ab initio molecular dynamics investigation of Li_nAl_n clusters. Shah, Vaishali; Kanhere, D. G.; Majumder, Chiranjib; Das, G. P. (Department of Physics, University of Poona, Pune, 411 007 India). *J. Phys.: Condens. Matter* 1997, 9(10), 2165-2177 (Eng), Institute of Physics Publishing. A systematic investigation of the ground-state geometries and stabilities of Li_nAl_n (n = 1-10 and 13) clusters made by employing ab initio d.-based mol. dynamics is reported. Although in the solid-state form, the 50:50 alloy takes on a B32-ordered structure, no evidence for such ordering has been seen for small clusters. Instead there is a clustering tendency of the Al atoms, and they tend to form inner clusters whose geometries are different from those of the free Al clusters. The Li and Al atoms favor a tetrahedral coordination due to the significant role of the s-p bonding of the electrons. A stability anal. based on energetics shows that the stability is enhanced in clusters where all of the Al faces have been capped by Li atoms, and this gives some remarkably interesting geometries, like the face-centered-cubic structure of Li_nAl_n.

F: LiAlO₂

P: 3

20B121. Неэмпирическое исследование изомерии в молекулах солей LiAB[2] с 16 валентными электронами / Чаркин О. П., МакКи М. Л., Шлойер П. ф. Р. // Ж. неорганической химии. - 1998. - 43, 2. - С. 280-293. - Рус.

В рамках приближений МП2/6-31ГФ{*}//ХФ/6-31ГФ{*}+ZPE(ХФ/6-31ГФ{*}) и МП4SDTQ/6-31ГФ{*}//МП2/6-31ГФ{*}+ZPE(МП2/6-31ГФ{*}) выполнены неэмпирические расчеты поверхностей потенциальной энергии молекул солей LiAB[2] с анионами BO[2]{-}, BS[2]{-}, AlO[2]{-}, AlS[2]{-}, N[3]{-}, PN[2]{-}, NP[2]{-} и P[3]{-}, а также ионмолек. комплексов LiOP[2]{+} и LiSP[2]{+}. Найдены следующие наиболее выгодные структуры: линейная и квазилинейная для нитридов LiN[3], LiPN[2] и оксидов LiBO[2], LiAlO[2], бидентатная C[2v] (типа 'пи'-комплекса)

РЖХ, 1998, №20

для тиосолей $\text{LiBS}[2]$ и $\text{LiAlS}[2]$, одноконцевая изогнутая $\text{C}[s]$ для иона $\text{LiSSiS}\{+\}$, плоская циклическая $\text{C}[2v]$ для $\text{LiOP}[2]\{+\}$ и неплоская циклическая $\text{C}[s]$ для $\text{LiSP}[2]\{+\}$. У молекулы $\text{LiP}[3]$ локализованы три низколежащих и близких по энергии изомера: полусэндвичевый триплет $\text{C}[3v](T)$, синглетный 'пи'-комплекс $\text{C}[2v]$ и синглет $\text{C}[s]$ со структурой "полураскрытой бабочки". Определены равновесные геометрические параметры и относительные энергии изомеров, ИК-частоты и интенсивности их нормальных колебаний. Проанализированы тенденции молек. свойств солей $\text{LAB}[2]$ и изoeлектронных ионов $\text{LAB}[2]\{+\}$ при замещении легких атомов L, A и B их аналогами по подгруппам и в других родственных рядах, прогнозируются соединения с необычными координациями анионов. Обсуждены деформация и поляризация анионов $\text{AB}[2]\{-\}$ под влиянием катиона при различных способах их взаимной ориентации. Библ. 33.

F: LiAlS2

P: 3

1998

20B121. Неэмпирическое исследование изомерии в молекулах солей LiAB[2] с 16 валентными электронами / Чаркин О. П., МакКи М. Л., Шлойер П. ф. Р. // Ж. неорган. химии. - 1998. - 43, 2. - С. 280-293. - Рус.

В рамках приближений МП2/6-31ГФ{*}//ХФ/6-31ГФ{*}+ZPE(ХФ/6-31ГФ{*}) и МП4SDTQ/6-31ГФ{*}//МП2/6-31ГФ{*}+ZPE(МП2/6-31ГФ{*}) выполнены неэмпирические расчеты поверхностей потенциальной энергии молекул солей LiAB[2] с анионами BO[2]{-}, BS[2]{-}, AlO[2]{-}, AlS[2]{-}, N[3]{-}, PN[2]{-}, NP[2]{-} и P[3]{-}, а также ионмолек. комплексов LiOP[2]{+} и LiSP[2]{+}. Найдены следующие наиболее выгодные структуры: линейная ил квазилинейная для нитридов LiN[3], LiPN[2] и оксидов LiBO[2], LiAlO[2], бидентатная C[2v] (типа 'пи'-комплекса)

РЖХ, 1998, 120

для тиосолей $\text{LiBS}[2]$ и $\text{LiAlS}[2]$, одноконцевая изогнутая $\text{C}[s]$ для иона $\text{LiSSiS}\{+\}$, плоская циклическая $\text{C}[2v]$ для $\text{LiOP}[2]\{+\}$ и неплоская циклическая $\text{C}[s]$ для $\text{LiSP}[2]\{+\}$. У молекулы $\text{LiP}[3]$ локализованы три низколежащих и близких по энергии изомера: полусэндвичевый триплет $\text{C}[3v](T)$, синглетный 'пи'-комплекс $\text{C}[2v]$ и синглет $\text{C}[s]$ со структурой "полураскрытой бабочки". Определены равновесные геометрические параметры и относительные энергии изомеров, ИК-частоты и интенсивности их нормальных колебаний. Проанализированы тенденции молек. свойств солей

$\text{LAB}[2]$ и изoeлектронных ионов $\text{LAB}[2]\{+\}$ при замещении легких атомов L, A и B их аналогами по подгруппам и в других родственных рядах, прогнозируются соединения с необычными координациями анионов. Обсуждены деформация и поляризация анионов $\text{AB}[2]\{-}$ под влиянием катиона при различных способах их взаимной ориентации. Библ. 33.

Li AlO₂
Li AlF₂

1998

Charkin O.P. et al.,

Zh. Neorg. Khim. 1998,
43 (2), 280-293

ab initio
racem
cmp- μ ,
Li, cma-
8 rep μ .

[coll. Li AlO₂ ; III)

LiAlF₄, LiAlCl₄, LiAlH₄

1998

сmp-ра,

темпер.

и ссод.

ди, меорем.

рацем

Charin O.P. et al.,

Zh. Neorg. Khim. 1998,

43(3), 474-487

(all. Li beF;



III)

$\text{Li}_2\text{AlX}_4^+$

1998

$X = \text{R}, \text{F}$

Charkin O.P. et al.,

ab initio
param

Zh. Neorg. Khim. 1998,
43(3), 488-500.

СМР- μ ,
 Pc , FMR -
и NMR -
сис.

(all.  LiBeH_4 ; III)

LiAlH₄

1998

Charkin O.P. et al.,

ab initio
расчет
сmp-м
и стабильн.

Zh. Neorg. Khim. 1998,

43 (7), 1184-1201.

(coll. LiBH₄ ; III)

LiAlCl₄

1998

Charkin O.P. et al.,

ab initio
pacem
cmp-pr
u

Zh. Neorg. Khim.
1998, 43 (7), 1184-1201

cm af uabH.

(cm. ● LiBF₄; III)

LiAlF₄

1998

Charkin O.P. et al.,

ab initio
расчет
сmp-м
и сmp.

Zh. Neorg. Khim. 1998,
43 (7), 1184-1201

(all. LiBF₄; III)

LiAlCl₄

1998

Charkin D.P. et al.,

ab initio
pacem

cmp-pr
u

смагунтн.

Zh. Neorg. Khim. 1998,

43 (7), 1184-1201

(see. LiBH₄; III)

$\text{Li}_2\text{AlO}_3^-$

1998

Charkin D.O. et al.,

потери.
потери,
структур.
параметры,
Di

Zh. Neorg. Khim.
1998, 43 (10), 1694-1703

(all. Li_2CO_3 ; III)

Li₂AlF₃

1998

Charkin D.O. et al.,

по методу
поверхн.
структур-
парам.,
Рi, теор.
расчет

Zh. Neorg. Khim. 1998,
43(12), 2033-49

(м. LiF₃; III)

1998

HALiF
HALiClСтр-ра и
измерения
стабильности
теорет.
расчет

129: 1803/1K Quantum chemistry study on the geometries and isomerizations for HALiX (X = F, Cl) fragment. Lu, Xiuhui; Wang, Yixuan; Deng, Conghao (Chemistry Department, Jinan University, Jinan, Peop. Rep. China 250002). *Huaxue Wuli Xuebao* 1998, 11(3), 233-239 (Ch), Zhongguo Kexue Jishu Daxue Chubanshe. Structures of the fragments HALiF and HALiCl have been investigated by the ab initio method at the RHF/6-31G* level, generating four equil. geometries for each fragment and three transition states regarding isomerization reactions between the four geometries. The kinetic anal. indicates that both HALiF and HALiCl exist and take part in chem. reactions in the two basic geometries. The characteristics and stability of the involved equil. geometries are analyzed. The Mulliken populations of the involved geometries and the frontier MOs of the two basic geometries are given. Moreover, the chem. activities of the basic geometries, and effects of the halogen atoms (F, Cl) on the stability and the chem. activities of the basic geometries are discussed.

CA 1998, 129, J14

1999

F: (LiAlS)₂

P: 3

131:233791 Ab initio study of isomerism of
nonrigid dimeric (LiAB)₂ salt molecules with 20
valence electrons (AB- = BO-, AlO-, BS-, AlS-, CN-,

CP- SiP-). Charkin, O. P.; Klimenko, N. M.; McKee,
M. L.; Schleyer, P. v. R. Inst. Novykh Khim. Probl.,
RAN Chernogolovka, Russia Zh. Neorg. Khim., 44(5),
802-814 (Russian) 1999 The authors studied the
title dimers in the framework of the MP2/6- 31*//HF/6-
31-G* + ZPE(HF/6-31G*) and MP4SDTQ/6-31G*//MP2/6-31-G* +
ZPE(MP 31G*). Data are presented on: potential energy
surfaces, geometries, rel energies, and decompn.
energies of low-energy isomers, their interconverts with
corresponding potential barriers, IR frequencies and
intensities.

F: Li3AlO3

P: 3

1999

132:142223 Ab initio study of the structure and stability of molecules an of oxo- and thio-salts with 24 valence electrons Li3AB3 (A = B, Al, C+, S O, S). Charkin, D. O.; MacKee, M. L.; Charkin, O. P. Mosk. Gos. Univ. im. M. V. Lomonosova

Moscow, Russia Zh. Neorg. Khim., 44(10), 1707-1716 (Russian) 1999 The authors calcd. potential energy surfaces, lithium oxo- and thio-salts of borates, aluminates, silicates, carbonates of Li3AB3 type using MP2/6- 31G*//HF/6-31G* + ZPE(HF/6-31G*) and MP4SDTQ/6-31G*//MP2/6-31G* + ZPE(MP2 31G*) methods. Data are presented on isomer geometry, inversion barriers decompn. energies, electron d., and IR intensity and frequencies.

C.A. 2000, 132

AlLi
AlLi-

(OM-39964)

1999

Gutsev F.L. et al.,

cmp-pa g. Chem. Phys., 1999,
u
cmadwith. 110, N 6, 2928-35

F: LiAlF₄

P: 3

1999

132:142110 Ab initio study of the molecular structure, isomerism, and vibrational spectra of MAF₄ (M = Li, Na, K; A = Al, Ga). Solomonik, V. G. Sliznev, V. V. Ivanovo State Chemical Engineering Academy

Russia J. Struct. Chem., 40(3), 368-379 (English) 1999 The equil. geometrical parameters, force consts., vibration frequencies, IR intensities, and isomerization and dissocn. energies of MAF₄ mols. are by Hartree-Fock and 2nd-order Moller-Plessett perturbation theory methods Li(9s3p1d/4s3p1d), Na, Al(12s8p1d/6s4p1d), K(14s11p3d/9s8p3d), F(9s5p1d/4s and Ga(13s10p5d/6s5p2d) bases of grouped Gaussian functions. The calcns. that the structures corresponding to the bi- (b) and tridentate (t) coordinations of the M⁺ cation by the AF₄⁻ anion are isomers. The b configuration is energetically most favorable for LiAF₄ mols. The b and structures of NaAF₄

C.A. 2000, 132

have close energies, and the t configuration is basic KAF4 mols. Simple empirical relations between the mol. consts. in the se LiAF4.fwdarw.NaAF4.fwdarw.KAF4 are found and the mol. parameters of RbAF4 CsAF4 are estd. A combined anal. of the ab initio and exptl. data availa the literature for MAF4 mols. is carried out. A no. of bands obsd. in th spectrum of the matrix-isolated MA1F4 mols. are assigned to their trident isomer.

F: Al₇CLi

P: 3

134:257095 Al₇CX (X=Li-Cs) clusters: Stability and the prospect for cluster materials. Ashman, C.; Khanna, S. N.; Pederson, M. R.; Kortus, J. Department of Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, VA, USA. Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys. (2000), 62(24), 16956-16961. in English.

Al₇C clusters, recently found to have a high-electron affinity and exceptional stability, are shown to form ionic mols. when combined with alkali-metal atoms. Our studies, based on an ab initio gradient-cor. d.-functional scheme, show that Al₇CX (X=Li-Cs) clusters have a very low electron affinity and a high ionization potential. When combined, the two- and four-atom composite clusters of Al₇CLi units leave the Al₇C clusters almost intact. Preliminary studies indicate that Al₇CLi may be suitable to form cluster-based materials.

2000

$\text{Li}_2\text{AlO}_2 +$

$\text{Li}_2\text{Al}_2\text{O}_3 +$

[OM · 40 577]

2000

Чаркин О.П., Клементко Н.М.
и др.

потерян.

потери. Ал. неорган. химии, 2000,
журнал, 45, N11, 1859 - 1870.

Негиллирическое исследование
процессов в молекулах солей

Li_2AB_2 и ионах Li_2AB_2^+ с 16 валентными электронами. Электроны.

$Al_{n-1}Li$

2000

смыкнута
и
жесткая,
неоп. жест

(72)

D

C.A. 2000, 133, N12

133: 168674m Comparative study of $Al_{n-1}X$ ($n = 1-9$ and 13, $X = Li, Al$ and Sb) clusters: density functional theory based molecular dynamics simulation study. Majumder, C.; Kulshreshtha, S. K. (Novel Materials and Structural Chemistry Division, Bhabha Atomic Research Center, Trombay, Mumbai, 400 085 India). *Chem. Phys. Lett.* 2000, 323(5,6), 393-399 (Eng), Elsevier Science B.V. Equil. geometries and energetics of $Al_{n-1}Sb$ ($n = 1-9$ and 13) clusters have been calcd. and the results are compared with those obtained for $Al_{n-1}Li$ and Al_n clusters. Addn. of the Li atom to the Al_{n-1} cluster does not affect its geometry and it caps one of its triangular faces. The geometries of $Al_{n-1}Sb$ clusters are similar to those of Al_n clusters. Both $Al_{12}Sb$ and $Al_{12}Li$ have icosahedral geometry with Li and Sb atoms placed at the vertex and central positions, resp. The av. binding energy for $Al_{n-1}Sb$ clusters is more than that of $Al_{n-1}Li$ and Al_n clusters. The dissochn. energy for Sb in $Al_{n-1}Sb$ is more than that of the Al and Li atom in Al_n and $Al_{n-1}Li$ clusters, resp.

Al_nX $n = 12, 13, 14$ Al_nLi

2000

cmp - na,
meop. paces

134: 136884j Alkalization of aluminum clusters: Every electron counts. Rao, B. K.; Khanna, S. N.; Jena, P. (Department of Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, VA 23284-2000 USA). *Clusters Nanostruct. Interfaces, [Proc. Int. Symp.]* 1999 (Pub. 2000), 317-326 (Eng). Edited by Jena, Puru; Khanna, Shiv N.; Rao, Bijan K. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.: Singapore, Singapore. The electronic structure of aluminum clusters interacting with alkali atoms has been systematically studied by using the MO theory within the framework of the d. functional formalism and generalized gradient approxn. The calcns. were carried out using both all-electron and frozen-core approxn. Geometry of Al_nX ($n = 12-14$ and $X = Li, Na, \text{ and } K$) clusters were obtained by a global optimization procedure. Two nearly degenerate isomers of $Al_{13}X$ belonging to capped icosahedron and decahedron

(+2)



Na,

 Al_nK C-A-2001, 134, N10. Al_n

structures were identified. The studies reveal a special chem. of the Al_{13}X species, namely the Al_{13} cluster and the alkali(X) atoms are bound ionically. The transfer of the electron from the alkali atom to Al_{13} makes Al_{13} an electronically closed shell system with an anomalously small electron affinity compared to Al_{12}X and Al_{14}X species. The ionic bond between two metallic elements not only illustrates the special chem. of the clusters, but also may be useful in the designing of clusters suitable for the synthesis of cluster assembled materials. The relative stability of these clusters and their ionization potentials are compared with available exptl. data.