

Li - S

1953

265

$\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (Yi)

Vassas-Dubuisson C.

J.Chim.et.phys.-chim.biol.,
1953, 50, N 9, C98-C-103

Le spectre ...

J



Bep 264 - X

1953

$\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (mol. const.)

Soutif M., Ayant Y.

J. chim. phys. et phys.-chim. biol.

1953, 50, N 9, C107-C109

Etude de la ...

ЕСТЬ Ф. К.

J

1954

263

mol.const. ($\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$)

Larson A.C., Helmholtz L.

J.Chem.Phys., 1954, 22, N 12,
2049-2050

Redetermination of the ...

1956

X-5328

$\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (Di, τ_{xy} , $\angle XYZ$)

Weill-Marchand A.,

C. r. Acad. sci., 1956, 242, 93-95

РЖХ, 1958, №3, 6953 10

Е. С. ... ф. н.

1965

X-6126

Li₂SO₄, K₂SO₄ (Di)

Walrafen G.E.,

J. Chem. Phys., 1965, 43, 479-482

PnEX, 1966, 146/69

10

A-940

1967

5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14 ввм

Галогениды Li , Na , K , Rb , Cs , Mo , V , Nb и др.
Окислы и сульфиды Li , B , Ga , In , N , Sb и др.
 LiNO_3 , NaNO_3 , Na_2CrO_4 , K_2CrO_4 , CsSO_4 , KReO_4
 KOH , CsOH (механ. расст.)

Вилков Л.В., Раибулдиги Н.Г., Смирidonov В.

М. структурн. химии, 1967, 8, 786-812

10

IX-483

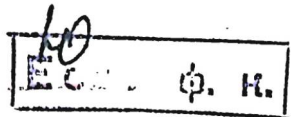
1968

$KCl \cdot 8SO_3$; $NaS_4O_{12}Cl$, $Ba(SO_3Cl)_2$,
 MSO_3Cl , vs $M = Li, Na, K, Rb, Cs, Ca^{2+}, Sr^{2+}, Ba^{2+}$
(Di)

Ciruna J.A., Robinson E.A.,

Canad. J. Chem., 1968, 46, N10, 1715-1718

CA, 1968, 69, N6, 24064z



1968

 $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Структура

3 Б79. Исследование дифракции нейтронов на моногидрате сульфата лития. Smith H. G., Peterson S. W., Levy H. A. Neutron-diffraction study of lithium sulfate monohydrate. «J. Chem. Phys.», 1968, 48. № 12, 5561—5565 (англ.)

Исследована дифракция нейтронов на монокристаллич. $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$. Показано, что молекула воды связана посредством слабой Н-связи с атомом кислорода (O_5) эквивалентной молекулы воды ($\text{O}_5-\text{O}_5'=2,95 \pm 0,01$ А) и с атомом кислорода (O_1) иона сульфата ($\text{O}_5-\text{O}_1=2,87 \pm 0,02$ А). Для углов $\text{O}_5-\text{H}_2 \dots \text{O}_5'$ и $\text{O}_5-\text{H}_1 \dots \text{O}_1$ найдены значения $151,0^\circ \pm 1,0^\circ$ и $152,6^\circ \pm 3,4^\circ$ соотв., а для структурных параметров воды с учетом поправок теплового движения — $\text{O}_5-\text{O}_1=0,99 \pm 0,03$ А, $\text{O}_5-\text{O}_2=1,00 \pm 0,05$ А, $\text{H}_1-\text{H}_2=1,64 \pm 0,05$ А и $\text{H}_1-\text{O}_5-\text{H}_2=110,6^\circ \pm 2,4^\circ$. Результаты согласуются с рентгенографич. данными. Резюме

x. 1969. 3

VI 7030 1969

v₁ ($\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$; $\text{LiClO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$,
 $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$; $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$)^{VO}₆

Jamnik J. M., Pytasz G., Stanek T.

Acta phys. polon., 1969, 35, 46, 997-1008/an

An infra-red study of crystallo-hydrates.

Pu Xun, 1970, 85226

W

G

$\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$

$\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{D}_2\text{O}$

ИК-спектр

ВФ-5042-X

1970

БЗ26. Торзионные колебания молекул H_2O в кристаллическом $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$. Janik J. M., Pytasz G., Janik J. A., Wasiutyński T. Torsional vibrations of H_2O — molecules in crystalline $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$. [Rept]. Inst. fiz. jąd. Krakowie», 1970, 728, ii, 17 pp., ill. (англ.; рез. польск., русск.)

Исследованы ИК-спектры ($4000-200 \text{ см}^{-1}$) $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ и $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{D}_2\text{O}$ при 20° и -196° , а также КР-спектры этих в-в, возбужденные лазером. В спектре выделены колебания H_2O : 850 см^{-1} (КР), 570 см^{-1} (ИК, КР); 320 см^{-1} (ИК, КР); для D_2O соотв. 660 и 400 см^{-1} . Эти полосы отнесены к крут. кол. H_2O . Проведено теоретич. рассмотрение крут. кол. H_2O в крист. решетках с симметрией C_2^2 , содержащих 2 молекулы H_2O в ячейке.
Ю. В. Киссин:

X. 1971. 6

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$
971

1970.
Стиригонов В.П., Лутощкин Б.И.,

Доросфеева
и.и.

МГУ.
Вестник Моск. ун-та. Сер. хим.,
1970, II, с.509.

5

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$

и.и.



LiSO₃Cl

(Vi)

layer -
Pos. - enantp.

C.A. 1971. 75. 12

(82070h) Infrared and Raman spectra of lithium, sodium, potassium, and ammonium chlorosulfates. Auger, Y.; Legrand, P.; Puskaric, E.; Wallart, F.; Noel, S. (Lab. Chim. Miner., U.E.R. Chim., Lille, Fr.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1971, 27(8), 1351-8 (Fr). The compds. MSO₃Cl (M = Li, Na, K, NH₄) have been synthesized and investigated by ir-absorption

and laser-Raman spectroscopy. A C_{3v} symmetry for SO₃Cl⁻ can be expected from the known cryst. structure of NOSO₃Cl. The present results show 6 characteristic frequency ranges: 320, 400, 550, 640, 1070, and 1250 cm⁻¹. The spectrum of 1 of these compds., which was obtained in the molten state, suggests an assignment of 3 polarized lines to A₁ species and the 3 others to E species, corresponding to doublets in the solid phase. The obsd. spectra of the different chlorosulfates are discussed and compared with previous results.

(+ 3) ☒

1971

-7

Bp-6410

KSO_3Cl
 $NaSO_3Cl$
 NH_4SO_3Cl (Vi)



$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$
90

Белаяева А.А., Дворкин М.И., 1971
Щерба Л.Д.,

Дорофеева
М.И.

Оптика и спектроскопия, 1971,
31, с.585.

11

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$

М.И.



$\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$

ВФ - 7737 - X

1971.

19 Б151. Исследование колебательного спектра водородной связи кристалла моногидрата сульфата лития. Габричидзе З., Джапаридзе И. «Кутансис сакхелмципо педагоგიური ინსტიტუტის შრომები, Тр. Кутанс. гос. пед ин-та», 1971, 34, 354—356.

(vi) Измерены при T -рах 360, 293 и 77° К спектры КР крист. $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ в области вал. кол. воды. При 360 и 293° в спектре наблюдается широкая полоса с максимумом $\sim 3450 \text{ см}^{-1}$ с тонкой структурой; при 77° спектр состоит из четкого триплета 3414, 3462 и 3502 см^{-1} и слабых полос 3310 и 3618 см^{-1} . С учетом низкотемпературного спектра предложена интерпретация сложной структуры полосы при $T=360^\circ$: 3132 см^{-1} $\nu_1-2\omega$, 3164 $\nu_2-2\omega$, 3223 $\nu_3-2\omega$, 3253 2ν (деф.), 3289 $\nu_1-\omega$, 3322 $\nu_2-\omega$, 3355 $\nu_3-\omega$, 3434 ν_1 , 3470 ν_2 , 3510 ν_3 , 3578 $\nu_1+\omega$, 3617 $\nu_2+\omega$, 3650 $\nu_3+\omega$, где ω есть колебание межмолек. связи $\text{O}\cdots\text{O}$ с частотой 146 см^{-1} .

Б. В. Рассадни

Х. 1973 N 19

$\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$; $\text{Li}_2\text{SeO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$; $\text{LiClO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$; (V)
 $\text{LiMnO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$; $\text{LiI} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$; $\text{Li}_2\text{CeO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; 1971
 $\text{Li}_2\text{Ce}_2\text{O}_7 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ $\bar{x}$ 6675 10

Ишкарёв С. А., Балмеева М. Г., Павлов Б.

Вестн. Ленингр. ун-та, 1971, №10, 5.

Инфракрасные спектры 83-91 (русск.)

поглощение некоторых кристал-
логидратов и безводных соли
лития в воде  сти 1250-400 см⁻¹

Ржс Хим, 1972, 25157 10 12

LiS

($\sim 60^\circ$)



+13

22 Б647. Стабильность газообразных двухатомных сульфидов. Hauge R. H., Margrave J. L. Stabilities of gaseous diatomic sulfides. «High Temp. Sci.», 1972, 4, № 2. 170—177 (англ.)

Компиляция известных данных по энергиям связи и силовым постоянным двухатомных окислов (MO) и сульфидов (MS) показала, что если для окислов проведены достаточно полные определения, то в случае сульфидов известны данные лишь для $\sim 30\%$, что связано с относительно легким разл. тугоплавких сульфидов при нагревании. Анализ соотношений $A = D_{MO}/D_{MS}$ (D — энергия связи) и $B = k_{MO}/k_{MS}$ (k — силовая постоянная, рассчитываемая из колебательных частот) показал относит. постоянство отношения A/B в пределах каждой подгруппы. Это позволило с учетом соотношений межъядерных расстояний MO и MS вычислить оценочные значения D_0^0 (ккал) двухатомных сульфидов Li 67 ± 15 , Be 77 ± 10 , Mg 67 ± 10 , Ca 70 ± 10 , Ga 54 ± 20 , In ≤ 63 , Tl ≤ 65 , As 86 ± 6 , Sb 73 ± 23 , Se 83 ± 20 , Te 66 ± 13 , —3, Cu 68 ± 20 , Zn ≤ 54 .
А. Гузей

1972

1972

1972

1972

X. 1972. 22

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$
345



1972
McGinnety J.A.,

Допосеба
и.н.

Acta crystallogr., 1972, B28, p.2845.

50

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$

и.н.



$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$
3675

Nord A.G.,

1973

Допроверба
и.н.

Acta chem. scand., 1973, 27, p.814.

54

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$

и.н.



30919.6134

Ch, TE, Ph

29862

1
23

(1145)

Price George H., Stuart William I.
Thermodynamic properties and infra-red
spectra of $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ and $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{D}_2\text{O}$.
"J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1973;
 Part I, 69, N 8, 1498-1502

(англ.)

0366 мик

Li₂SO₄·H₂O
См. I

949 950

950

ВИНИТИ

1974

Li₂S

(1 Д133) Расчеты Li₂S методом ССП. I. Геометрия.
Hinchliffe A., Dobson J. C. SCF calculations on
Li₂S. I. Geometry. «Mol. Phys.», 1974, 28, № 2, 543—549
(англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе
гауссовских ф-ций Li10s3pS11s8p2d1f, группированном в
Li4s3pS6s5p2d1f, исследовано электронное строение Li₂S
(I). Молекула найдена линейной с равновесной длиной
связи 3,96 ат. ед., однако потенц. поверхность как ф-ция
валентного угла очень пологая. Учет конфигурац. взаимо-
действия во 2-м порядке теории возмущений привел к
увеличению длины связи на 0,1 ат. ед. Частоты симмет-
ричного валентного и деформац. колебаний оценены в
817 и 37 см⁻¹, теплота образования — в 152 кдж/моль.
Анализ полной энергии по схеме разбиения на компо-
ненты показал, что, хотя I и является преимущественно
ионным соединением, его потенц. поверхность заметно
отличается от таковой для более ионных систем, как
Li₂O.

В. Л. Лебедев

геометрия

(ΔH_f)

аттмск 2604



Eisenby

ф. 1975 IV 1

Li_2S

1974

статья 2604

4 Б38. Расчеты Li_2S методом ССП. I. Геометрия.
Hinchliffe A., Dobson J. C. SCF calculations on
 Li_2S . I. Geometry. «Mol. Phys.», 1974, 28, № 2, 543—
549 (англ.)

геометрия

Расчеты Li_2S для 9 наборов межатомных расстояний R (ат. ед.) и углов θ (3,75, 120, 180; 3,97, 90—180; 4,5, 120—180°) осуществлены методом МО ЛКАО ССП в базисе гауссовых функций (11s, 7p), сгруппированных в набор [6s, 4p] с добавлением диффузных p -функций, двух наборов d - и одного f -функций для атома S и

73.

(H1) ΔH_f

х. 1975.

N4



базисе $(10s) \rightarrow [4s]$ и трех p -функций для атома Li. Поверхности потенциальной энергии, рассчитанные в малом и большом базисах, близки. Согласно вычисленного значения теплоты образования ~~Li_2S из элементов~~ (-153 Кдж/моль) со значением, полученным интерполяцией между эксперим. значениями для родственных молекул (-163 Кдж/моль) удалось достичь только при учете энергии корреляции (ЭК) для ионов; без учета ЭК получено значение $+184 \text{ Кдж/моль}$. Найдено, что энергия мало изменяется при варьировании θ (всего на $0,010$ ат. ед. при переходе от 180 к 90°), а частота деформационных колебаний составляет 37 см^{-1} . При увеличении R зависимость энергии от θ уменьшается, а для $R=4,5$ ат. ед. наблюдается очень пологий минимум при $\theta=131^\circ$. Это указывает на значит. отклонение от поведения, ожидаемого для чисто ионных соединений. Анализ вкладов в полную энергию молекулы также демонстрирует расхождение с ионной моделью.

А. Клягина

Li_2SO_4 (2)
3544

Montero S., Schmölz R., 1974
Haussühl S.,

Дорофеева
и.и.

J. Raman Spectrosc., 1974, 2,
p. 101.

28

Li_2SO_4 (2)

и.и.



$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$
3676

1974

Nord A.G.,

Дорогеева
и.и.

Acta crystallogr., 1974, B30, p.1640.

51

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$

и.и.



Оттиски 4116 1975

Li_2S

10 Д175. Расчеты Li_2S методом ССП. II. Анализ волновой функции. Dobson J. C., Hinchliffe A. S. C. F. calculations for Li_2S . II. Analysis of wavefunction. «Mol. Phys.», 1975, 29, № 5, 1315—1322 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в тех же базисах гауссовских ф-ций, что и в предыдущей работе (см. Ч. I. РЖФиз, 1975, 1Д133) исследовано электронное строение Li_2S . Варьировались геометрич. параметры. Приведены дипольные и квадрупольные моменты, энергетич. характеристики. Проведен анализ заселенностей и построены карты электронной плотности. Обнаружено, что изменения в ионности в зависимости от базиса и геометрии, оцененные по данным анализа заселенностей, существенно больше изменений в наблюдаемых, таких, как квадрупольные моменты, и для получения правильных закономерностей необходим учет поляризации атомных плотностей. Показано, что молекула становится менее ионной при увеличении валентного угла от равновесного значения до 180° , причем атом S является и σ - и π -донором. В. Л. Лебедев

Кв. мех.
расчет

ф. 1975
N 10

Оттиск 4116

1975

Li₂S

23 Б40. Расчет молекулы Li₂S методом ССП. II. Анализ волновых функций. Dobson J. C., Hinchliffe A. S. C. F. calculations for Li₂S. II. Analysis of wavefunction. «Mol. Phys.», 1975, 29, № 5, 1315—1322 (англ.)

расчет
массы

На основании выполненного авторами неэмпирич. расчета молекулы Li₂S (РЖХим, 1975, 4Б38) в гауссовом базисе с учетом и без учета поляризационных *d*- и *f*-функций на атоме S (базисы 1 и 2, соотв.), и с учетом 2*p*-АО функций атома Li проведен анализ распределения электронной плотности в рамках схемы Левдина—Доделя. Хотя расчетные заселенности поляризац. функций крайне невелики (~0,005), суммарные заселенности валентных функций и заселенностей перекрывания меняются довольно сильно. Вычисленные эффективные заряды по данным расчетов в базисах 1 и 2, равны +0,56 и +0,79 (Li), а заселенности перекрывания 0,62 и 0,38, соотв. При этом наиболее сильно меняется состав МО 3σ_u, состоящей в основном из 2*p*σ-AOLi, что приводит к уменьшению σ-компоненты засе-

X 1975 №23

ленности перекрывания более чем в два раза. Включение поляризац. функций оказывает менее сильное влияние на значения вычисленных одноэлектронных св-в (квадрупольный момент, градиент электрич. поля и др.). Компонента приведенного квадрупольного момента $g_{xx}/2R^2$ в базисах 1 и 2 соотв., равна 0,88 и 0,92. Ещё меньшие отличия в строении молекулы Li_2S обнаруживаются при сопоставлении разностных карт электронной плотности, полученных из расчетов в базисах 1 и 2. Сделан вывод, что расчеты с учетом и без учета поляризац. функций приводят к принципиально сходной картине электронного строения молекулы Li_2S , хотя расчетные характеристики связи могут довольно значительно отличаться. Показано, что заселенность перекрывания с увеличением межатомного расстояния проходит через максимум (при $R \cong 5,0$ ат. ед.), в то время как компонента квадрупольного момента $g_{xx}/2R^2$ монотонно падает. Изменения в значениях различных компонент дипольного момента в зависимости от валентного угла указывают на увеличение полярности связи $\text{Li}-\text{S}$ с ростом угла от 90° до 180° . С. Долин

50702.9201

Ph, Ch, TC

96200

Li₂S

1975

#4-9281

Hinchliffe A., Dobson J.C., Porter H.Q.

A comparison of the electronic structure of H_2S , Li_2S and Na_2S .

"Chem. Phys.", 1975, 8, N 1-2, 158-165

(англ.)

(*см. H_2S ; III*)

0392 пик

364 366

ВИНИТИ

Li_2S .

1975

Hinchliffe A;
Dobson J.C et. al.

спектр.
свойства J. Chem. Phys., 1975,
8, N 1-2, 166-170.



(ср Li_2O ; III)

Li_2SO_4

Жатин В. А.

1975

Отчет ЦУПХ за 1971-75гг.

Li
спектр в
матрицах

«Спектроскопические исследования
атомов и молекул
методом матричной изоляции»

Li_2SO_4

K_2SO_4

Rb_2SO_4

Cs_2SO_4

BeSO_4

MgSO_4

CaSO_4

(и.к.статус)

X 1976 N 7

X 15-10377

1975

7Б308. Инфракрасные спектры и колебания кристаллической решетки сульфатов щелочных и щелочноземельных металлов. Takahashi Hiroaki, Meshitsuka Shunsuke, Higasi Keniti. Infrared spectra and lattice vibrations of alkali and alkaline earth metal sulfates. «Spectrochim. acta», 1975, A 31, № 11, 1617—1622 (англ.).

Получены спектры ИК-поглощения (область 30—4000 cm^{-1}) Li_2SO_4 , K_2SO_4 , Rb_2SO_4 , Cs_2SO_4 , BeSO_4 , MgSO_4 и CaSO_4 . Проведен теоретико-групповой анализ и произведено отнесение к внутренним и либрац. колебаниям сульфат-иона. Показано, что симметрия положения сильнее проявляется на либрац. колебаниях, чем на внутренних колебаниях иона SO_4^{2-} . Изучено влияние массы и радиуса катионов на частоты внутренних и внешних колебаний иона SO_4^{2-} . А. Бобров



(+6)

(+15 см/с)

Li_2SO_4

K_2SO_4

Rb_2SO_4

Cs_2SO_4

(V_i)

(specimen) #45-10377

1475

84:10615c Infrared spectra and lattice vibrations of alkali and alkaline earth metal sulfates. Takahashi, Hiroaki; Meshitsuka, Shunsuke; Higasi, Keniti (Dep. Chem., Waseda Univ., Tokyo, Japan). *Spectrochim. Acta, Part A* 1975, 31A(11), 1617-22 (Eng). In the ir spectra of cryst. M_2SO_4 ($\text{M} = \text{Li, K, Rb, Cs}$) and M^1SO_4 ($\text{M}^1 = \text{Be, Mg, Ca}$) the bands $>400 \text{ cm}^{-1}$ were assigned to the ν_4 internal vibrations of SO_4^{2-} and those $<200 \text{ cm}^{-1}$ to librational modes. The translational lattice frequencies were related to the reduced masses of the ions and the force const. derived for K_2SO_4 , Rb_2SO_4 , Cs_2SO_4 , and CaSO_4 . The deviations obsd. for the remaining sulfates were due to the small ionic radii (r) of the metals. The librational frequencies were proportional to r for $r > 1 \text{ \AA}$ and independent of r for $r < 1 \text{ \AA}$. The 4-fold rotation barrier for SO_4^{2-} in CaSO_4 of 33 kcal/mole was calcd. from the librational frequency.

C.A. 1976 84 N2

✱
⊗ (+6)

BeSO_4 CaSO_4
 MgSO_4

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$
 Li_2

Белзєва А.А., Дворкин М.И., 1975
Шерба Л.Д.,

Доросєва
и.и.

Оптика и спектроскопия, 1975,
38, с.516.

10

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$

и.и.



$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$
91

Белая А.А., Дворкин М.И., 1975
Щерба Л.Д.,

Дорофеева
м.и.

Оптика и спектроскопия, 1975,
38, с.308.

9

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$

м.и.



$\text{Li}_2\text{SO}_4(?)$ 4573	Ugarov V.V., Ezhov Yu. S., Rambidi N. G., 1975
-------------------------------------	--

Дополнения и. н.	J. Mol. Struct., 1975, <u>25</u> , p. 357.
---------------------	--

8	$\text{Li}_2\text{SO}_4(?)$
---	-----------------------------

	и. н. 
--	---

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$
3677

Nord A.G.,

1976

Допроверба

и. н.

Acta chem. scand., 1976, A30, p.199.

49

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$

и. н.



$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$
3678

Nord A.G.,

1976

Дорогеева

и.и.

Acta crystallogr., 1976, B32, p.982.

52

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$

и.и.



$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$
43

1977
Белыева А.А., Дворкин М.И.,
Церба Л.Д.,

Дорофеева
и.и.

Оптика и спектроскопия, 1977,
43, с.198.

16

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$

и.и.



Li 2 304

1977

Воржикова М.И.

Струн.
молитву
святр
в матрице
поиски.
поверши.

Давидовича на
свободном воздухе
стелется К. Грозд-мат.
неуж. (Минх)

$\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$
(крист.)

сильн. пог.

группа св-в
 $\text{Li}-\text{O}$

и.к., Раман
спектр

номер 5429 | 1977

Jungermann A

Spectrochim. acta

1977, A33, 725-32

Vibrational spectra

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$
1356

1978
Atkins R.M., Gingerich K.A.,

Дополнения
и.н.

Chem. Phys. Lett., 1978, 53, p.347.

41

$\text{Li}_2\text{SO}_4(2)$

и.н.



$\text{Li}^+ \text{S}_2^-$

1978.

Wright C. A., et al.

(u.n.)

J. Mol. Spectrosc.,
1978, 72 (3), 332-41

(see. $\text{Na}^+ \text{S}_2^-$, (u))

LiSH

common 7042

1978

LiSH⁺

Li(SH)₂

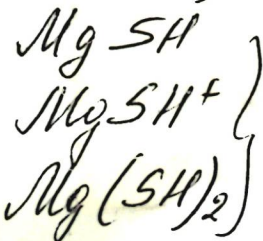
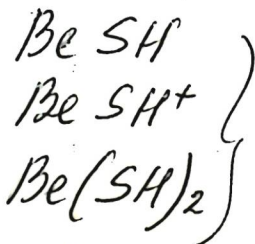
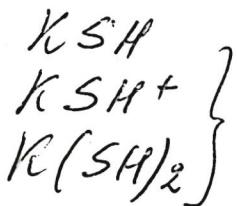
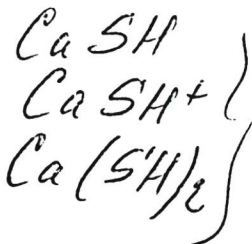
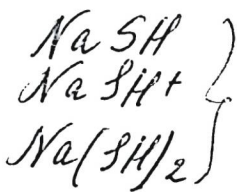
nb. ex.
factor

89: 169423p Theoretical studies of the binding of thiols to the alkali and alkaline earth metals. Pappas, Jan A. (Inst. Phys., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *J. Am. Chem. Soc.* 1978, 100(19), 6023-7 (Eng). Ab initio model studies of the binding and reactions of alkali and alk. earth metals with thiols are reported. The model systems considered are MSH, MSH⁺, and M(SH)₂ with M = Li, Na, K, Be, Mg, and Ca. The alkali metal sulfur bond is typically ionic with almost no charge transfer and no covalent character, although the superposition error in the basis set causes the population anal. erroneously to indicate so. The Mg-S and esp. the Be-S bonds show considerable charge transfer toward the metal and the presence of covalent character in this bond may not be negligible. All M(SH)₂ were found to be linear as opposed to MCl₂. Furthermore, the correlation diagrams of ML₂ were found to be essentially dependent on the ligand even in isoelectronic systems, thus strongly restricting the use of Walsh diagrams in predicting the geometries of such systems.

C.A., 1978, 89, N20

⊗ (+5)

cm. na avopse



Li₂S

Li₂S₂

kb. acc.
fraction

omniucc 8533

1979

91: 199250p Lithium disulfide and lithium sulfide: an ab initio study. Kao, James (Res. Sch. Chem., Aust. Natl. Univ., Canberra, 2600 Australia). *J. Mol. Struct.* 1979, 56(1), 147-52 (Eng). The mol. structure, total energy, and electron populations of Li₂S and Li₂S₂ were obtained in ab-initio MO calcs. with both minimal (STO-3G) and extended (44-31G for S, and 5-21G for Li) basis sets by using the Gaussian-70 programs. The most stable structures found were (a) linear (*D_{∞h}* symmetry) for Li₂S and (b) nonplanar puckered (*C_{2v}* symmetry) for Li₂S₂. Comparisons are made with corresponding results for Li₂O and Li₂O₂. The heats of reaction calcd. for Li₂X₂ + H₂X → H₂X₂ + Li₂X (X = O or S) showed that these reactions are highly endothermic.

I -10297

C.A. 1979, 91, N24

Li_2S_2
 Li_2S

молекула
гексагональная

оптимизация 8533

1979

1) 3 Б17. Неэмпирическое исследование Li_2S_2 и Li_2S .
Ka o James. Li_2S_2 and Li_2S : an ab initio study. «J.
Mol. Struct.», 1979, 56, № 1, 147—152 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП проведена оптимизация геометрии Li_2S (I) и ряда конформаций Li_2S_2 : плоской син-(IIa), гош-(IIб, двугранный угол принят равным 90°), плоской анти-(IIв), плоской ромбич. (IIг), и циклич. неплоской (IIд). Расчеты I, IIa—д проведены в миним. (ОСТ-3 ГФ) и расширенном (44—31 ГФ для S и 5—21 ГФ для Li) гауссовых базисах. Для I наиболее стабильной найдена линейная структура. Для относит. энергий IIa—д получены след. результаты (в ккал/моль): в миним. базисе IIд (0,0 < IIб (7,35) < IIг (8,76) < IIa (78,6), в расширенном базисе IIд (0,0) < IIг (1,70) < IIб (6,15) < IIa (44,45). Оптимизация геометрии IIв приводит к структуре IIг. Сделан вывод, что в наиболее стабильной структуре IIд угол θ лежит между 53 и 62° . Обсуждены отличия в конформац. поведении II и Li_2O_2 . А. Устенко

X-10297

2.1080.13

Оттиски 8533

1979

Li₂S₂
Li₂S

2 Д120. Li₂S₂ и Li₂S: неэмпирическое изучение. Li₂S₂ and Li₂S: an ab initio study. Као James. «J. Mol. Struct.», 1979, 56, № 11, 147—152 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП рассчитана электронная структура сульфида и дисульфида лития. Расчеты проводились в минимальном СТО—3ГФ и расширенном (44—31 ГФ для S и 5—21 ГФ для Li) базисах гауссовых ф-ций. Выполнена оптимизация геометрии этих молекул, найдено, что Li₂S имеет линейную, а Li₂S₂ — неплоскую циклич. структуру. Результаты сопоставлены с данными расчетов аналогичных оксидов лития. На ос-

исв. мех.
расчет
э.и. структура

новании результатов расчетов, а также литературных данных определены теплоты реакции Li₂X₂ + H₂X → H₂X₂ + Li₂X (X=O, S). О. В. Спзова

V-10297

ф. 1980 №2

$H_2S_2Li^+$

ommuch 7775 1979

Pappas J. A.

E. geometris

J. Amer. Chem. Soc.
1979, 101 (3), 561-67

LiS(2) Common 10904 | 1980

Li₂S(?) Kimura H., Abano H.
Kubo K.

(20) Bull. Inst. Atom Energy
Kyoto Univ., 1980, 58,
p.54, ●

$\text{Li}_2\text{SO}_4(\text{K})$

1981

(vi)

(76) ~~12~~

C.A. 1982, 96, N12

96: 94181s Raman spectroscopy of oxyanions in molten salts. Part 2. Correlation of the symmetric stretching frequency with polarizing power and polarizability of the cation. Child, William C., Jr.; Begun, George M.; Smith, Duane H. (Chem. Div., Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, TN 37830 USA). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1981, 77(12), 2237-47 (Eng). Frequencies of the sym. stretching vibration, ν_1 , of the anion in various molten salts were measured by Raman spectroscopy as a function of temp. and compn. Results were obtained for Li_2SO_4 , Na_2SO_4 , Ag_2SO_4 , $\text{Li}_2\text{SO}_4\text{-K}_2\text{SO}_4$, K_2CO_3 , Na_2CO_3 , $\text{Li}_2\text{CO}_3\text{-K}_2\text{CO}_3$, NaClO_3 , AgClO_3 , and $\text{NaClO}_3\text{-AgClO}_3$ melts. These frequencies were combined with literature values for these and other oxyanions and correlated with the logarithm of the product of the cation polarizing power and polarizability, $P\alpha$, as proposed by M. H. Brooker and M. A. Bredig (1973). Good correlation was found for the NO_3^- , SO_4^{2-} , and CO_3^{2-} ions. Deviations from linearity were found for the ClO_3^- and IO_3^- ions.

$\text{Li}_2\text{SO}_4(\text{aq})$ *ommuck* 12611 1981

(CKP)

1 95:177946a Raman spectroscopy of oxyanions in molten salts. Part 1. Analysis of the asymmetric stretching band in molten lithium sulfate and lithium sulfate-potassium sulfate mixtures. Smith, Duane H.; Begun, G. M.; Child, W. C., Jr. (Chem. Div., Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, TN 37830 USA). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1981, 77(S), 1399-409 (Eng). Raman spectra were detd. for molten Li_2SO_4 and 7 molten $\text{Li}_2\text{SO}_4\text{-K}_2\text{SO}_4$ mixts. up to 1240 K. The broad band at $1100\text{-}1190\text{ cm}^{-1}$, assigned to ν_3 of SO_4^{2-} in T_d symmetry, splits in these melts, indicating the presence of structures with C_{3v} and C_s symmetry. These findings agree with models proposed from x-ray diffraction studies.

C. A. 1981, 95, v20

Li₂SO₄

1981

Vi

1 Б254. Инфракрасные спектры матрично-изолированных газообразных трехкомпонентных окислов. Часть VI. Инфракрасные спектры сульфатов лития, цезия и таллия и молибдатов индия и таллия. Spoliti M., Bencivenni L., Hunziante Cesare S., Teghil R., Maltese M. Infrared spectra of matrix-isolated gaseous ternary oxides. Part IV. The infrared spectra of lithium, cesium and thallium sulfates and indium and thallium molybdates. «J. Mol. Struct.», 1981, 74, № 2, 297—299 (англ.)

IX

(4)

В области $4000-400\text{ см}^{-1}$ измерены ИК-спектры молекул Li_2SO_4 , Cs_2SO_4 , Tl_2SO_4 , In_2MoO_4 и Tl_2MoO_4 , изолированных в матрицах из азота при 12 К. Исследуемые молекулы получали в газовой фазе непосредственным испарением соотв-щих солей при 1000—1250 К. В спектрах наблюдаются по две полосы поглощения в области трижды вырожденного колебания $\nu_3(F_2)$ тетраэдрич. иона. Обнаруженное расщепление связано с

X. 1982, 19AB, N1.

переходом к симметрии D_{2d} и обуславливает появление в спектре двух колебаний — симметрии B_2 и E . К этим колебаниям отнесены след. наблюдаемые частоты (см^{-1}): Li_2SO_4 — 1140 и 1101, Cs_2SO_4 — 1116 и 1099,5, Tl_2SO_4 — 1111 и 1100, In_2MoO_4 — 839 и 829,5, Tl_2MoO_4 — 839,5 и 830,5. Сравнены частоты колебаний B_2 и E в молекулах M_2XO_4 (где $\text{M}=\text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Cs}, \text{In}, \text{Tl}$; $\text{X}=\text{SO}_4^{2-}, \text{CrO}_4^{2-}, \text{MoO}_4^{2-}, \text{WO}_4^{2-}$) и указано, что величина расщепления увеличивается с уменьшением массы центрального атома и массы катиона. Эти особенности могут быть объяснены с точки зрения искажения валентно-силового поля отриц. иона за счет координации с катионом.

С. Б. Осин

Li_2SO_4

198)

95: 158969u Infrared spectra of matrix-isolated gaseous ternary oxides. Part VI. The infrared spectra of lithium, cesium and thallium sulfates and indium and thallium molybdates. Spoliti, M.; Bencivenni, L.; Cesaro, S. Nunziante; Teghil, R.; Maltese, M. (Ist. Chim. Fis., Univ. Roma, 00185 Rome, Italy). *J. Mol. Struct.* 1981, 74(2), 297-9 (Eng). IR spectra of Li_2SO_4 , Cs_2SO_4 , Tl_2SO_4 , In_2MoO_4 , and Tl_2MoO_4 mols. isolated in N matrixes at 12 K were obtained. D_{2d} Symmetry of these species is proposed. The splitting of the $\nu_3(\text{F}_2)$ mode on passing from T_d to D_{2d} symmetry is briefly discussed.

лек спектры

в матрице

18
(+4)

C.A. 1981, 95, N 18.

Li_2SO_4

1981

2 Д640. ИК-спектры изолированных в матрице газообразных тройных оксидов. Ч. VI. ИК-спектры сульфатов лития, цезия, таллия и молибдатов индия и таллия. Infrared spectra of matrix-isolated gaseous ternary oxides. Part VI. The infrared spectra of lithium, cesium

and thallium sulfates and indium and thallium molybdates. Spoliti M., Bencivenni L., Nunziante Cesaro S., Teghil R., Maltese M. «J. Mol. Struct.», 1981, 74, № 2, 297—299 (англ.)

Исследованы в области $400-4000\text{ см}^{-1}$ ИК-спектры поглощения молекул Li_2SO_4 , Cs_2SO_4 , Tl_2SO_4 , In_2MoO_4 и Tl_2MoO_4 , изолированных в азотных матрицах при $T \approx 12\text{ К}$. Дано отношение колебаний при предположении симметрии молекул D_{2d} . Рассмотрено расщепление колебания $\nu_3(\text{F}_2)$ при переходе от симметрии T_d к симметрии D_2 . Библ. 12.



(7/3)



ф. 1982, 18, №2.

Liz S

(DMMUCL 15770)

1982

меопет.
паерет.

Gutsev G. L., Boldyrev
A. I.
Chem. Phys. Lett., 1982,
92, n 3, 262-266.

H₂Si

(Ommuck 15849)

1982

Smith S., Chandrasekhar
et al., J.,

meopem-
traces
CTPKS.

J. Phys. Chem., 1982, 86,
N17, 3308-3318.



Li_2SO_4

[Ommuck #3969]

1982

Spoliti M., Benicewicz L.,
et al.

UK nextp J. Mol. Struct., 1982, 80,
vi 141-146.

Invited Papers from the 15
European Congress on Mol.
Spectrosc., Norwich, Sept., 1981.

Li₂SO₄

10m: 18018

1983

Cazzanelli E, Frech R.,

Раман.
спектр

J. Chem. Phys., 1983,
79, N 6, 2615-2620.

Liz S

(DM. 20928), 17365 1983

Гуцев Г. Л., Богданов А. У.,

расчет
электрон.
структур

Журн. Морган. жжжж.
1983, 28, N 9, 2179 -
- 2182.

H_2S-Li^+

1983

5 Б1088. Сравнительное исследование комплекса H_2S-Li^+ неэмпирическим методом ССП в базисах OCT-3ГФ и OCT-4/31ГФ. H_2S-Li^+ complex: an ab initio STO-3G and STO-4/31G comparative study. Nowek Andrzej, Leszczyński Jerzy, Wojciechowski Walter. «Mater. Sci.» (PRL), 1983, 9, № 1, 71—74 (англ.; рез. пол., рус.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах OCT-3ГФ (Б1) и 4—31 ГФ (Б2) рассчитан комплекс H_2S-Li^+ (1). Проведено сопоставление полученных данных с результатами для исследованных ранее комплексов H_2O-M^+ ($M=Li, Na, K$). По сравнению с базисом Б2, минимальный базис Б1 недооценивает расстояние $S-Li$ (2,20 А, вместе 2,40 А) и переоценивает энергию комплексообразования (44,0 ккал/моль, вместо 22,0 ккал/моль, даваемых базисом Б2). Перенос заряда с H_2S на Li^+ составляет 0,076 ат. ед., по сравнению с 0,018; 0,013 и 0,004 ат. ед. в комплексах H_2O с Li^+ , Na^+ и K^+ . Сделан вывод, что базис Б1 пригоден только для грубых качеств. оценок характеристик подобных комплексов.

В. Фаустов

расчет м.п.,
структуры

х. 1985, 19, № 5

H_2S-Li^+

1983

3 Д115. Комплекс H_2S-Li^+ . Неэмпирическое сравнительное исследование методами ОСТ-3ГФ и ОСТ-4/31ГФ. H_2S-Li^+ complex: an ab initio STO-3G and STO-4/31G. comparative study. Nowek Andrzej, Leszczyński Jerzy, Wojciechowski Walter, «Mater. Sci.» (PRL), 1983, 9, № 1, 71—74 (англ.; рез. пол., рус.)

Методом ССП с использованием базисных наборов типа ОСТ-3ГФ и ОСТ-4/31ГФ изучены равновесная структура и энергия связи комплекса H_2S-Li^+ . Анализ полученных результатов и их сравнение с соответствующими эксперим. данными для систем H_2O — катион показывает, что расчеты в ОСТ-4/31ГФ-базисе хорошо согласуются с точными расчетами, а ОСТ-3ГФ-базис можно использовать только для грубой оценки равновесных расстояний и энергий связи. А. И. Воронин

Жерни
свифи

ср. 1985, 18, N3

$\text{H}_2\text{S} \cdot \text{Li}^+$

1983

[102: 32670] Hydrogen sulfide-lithium(1+) ion complex: an ab initio STO-3G and STO-4/31G comparative study. Nowek, Andrzej; Leszczynski, Jerzy; Wojciechowski, Walter (Dep. Chem., Inst. Educ., 42-200 Czestochowa, Pol.). *Mater. Sci.* 1983, 9(1), 71-4 (Eng). An STO-3G and STO-4/31G study was made of the equil. geometry and binding energy of the $\text{H}_2\text{S} \cdot \text{Li}^+$ complex. The anal. of the obtained results and comparison with the calcd. and exptl. data for water-cation systems indicated that STO-3G basic calcs. give only crude ests. of the binding energy and equil. distance.

спроектура,
теоретич
свєстє, теоретич-
расчет

C. A. 1985, 102, N4.

Смесь Li_2SO_4 1984

Li_2SO_4

Rambidi N. G.,

Stepanov N. F., et al.

(обзор)

Khim. Svyaz. Str. Mol.

1984, 5-20.

(сер. Смесь MNO_2 ; III)

LiS

Langhoff S. R.,
Bauschlicher Ch. W., et al.

1985

Comp. Ab Initio Quant.

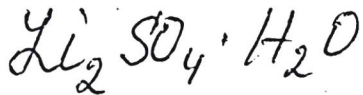
Chem. Exp. Small Mol. State

et. n.

Art. Proc. Symp., Philadelphia,
Pa, 27-29 Aug., 1984. Dor-

recht et. al., 1985, 357-

-407. (cur. LiF; III)



1985

Petrusevski V.,
Soptrajanov B.

UK
crkmp

17th Eur. Congr. Mol.
Spectrosc., Madrid, 8-13
Sept., 1985; EUCMOŠ XVII.
Abstr. S. I, s. a., P-23.
(crk. $\text{Li}_2\text{SeO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$; III)

Li_2SO_4 (?)

1986

105: 179395u Thermodynamic functions of gaseous lithium, sodium, potassium, rubidium and cesium sulfates. Bencivenni, L.; Sacconi, L. Vitalini; Pelino, M. (Dip. Chim., Univ. Roma, 00185 Rome, Italy). *Thermochim. Acta* 1986, 106, 51-5 (Eng). The free energy functions and entropies of alkali metal sulfates were calcd. The IR and Raman spectra of Li_2SO_4 were explored in the range 30-1200 cm^{-1} while the IR ($<600 \text{ cm}^{-1}$) was investigated for all the other mols. A theor. model was employed to est. the mol. parameters needed in the calcn. of the thermodyn. functions.

UK, CKP, ΔG

(+4)
⊗

C.A. 1986, 105, N20

Na_2SO_4

K_2SO_4

● Rb_2SO_4

Cs_2SO_4

Li₂SO₄

(DM. 27136)

1986

Комовалов С.П., Колодю-
мик В.П.,

Структура,
теорет.
исследов.

Координатиз. химия,
1986, 12, № 463-469.

Li₂SO₄

10m. 23337

1986

Комованов С. П.,
Соловьев В. Г.

структур-
ная,
теорет.
расчет

Координатная химия,
1986, 12, N 4, 463-
469.

Li_2SO_4

1986

7 23Б1261. Конфигурация иона SO_4^{2-} в кубической фазе Li_2SO_4 по данным изучения контура полосы колебания ν_3 . Configuration of the SO_4 - ion in the cubic phase of Li_2SO_4 from band shape studies of the ν_3 mode. Cazzanelli E., Frech R. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 2, 626—630 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

В интервале т-р 25—775° С. изучены полиризац. спектры КР крист. Li_2SO_4 (I) в обл. полосы вал. кол. ν_1 и ν_3 сульфат-иона. Основное внимание уделено пластич. крист. фазе I, устойчивой при т-рах около 600° С. В спектре КР пластич. фазы обнаружено расщепление полосы ν_3 на деполаризованную ($\rho=0,75$) и поляризованную ($\rho=0,6$) компоненты ~ 1110 и $\sim 1185 \text{ см}^{-1}$ соотв. На основании фактор-группового анализа сделан вывод, что в этой фазе 4 тетраэдрич. сульфат-иона в элементарной ячейке имеют конфигурацию C_{3v} и частично D_{2d} . Анализ контура и деполаризации полосы ν_1 в спектрах КР I в обл. фазового перехода из моноклинной в гранецентрир. куб. структуру при 573° С и полосы ν_3 расплава I подтвердил вывод об ориентац. разупорядоченности сульфат-ионов в пластич. фазе I.

А. Н. Курский

спектр

х. 1986, 19, № 23

Lia S

[OM 27201]

1987

Lia S

Соломонов В. Г., Погреб-
ная П. И.,

равновесн.
геометр.,
инверсион.
барьеры,
частоты
Норм.
колебан.

ис. физ. химии, 1987,
61, № 7, 1928-1931.

Li_2S

[ст. 27201]

1987

Li_2S_2

Соломонок В. Г., Погреб-
ная Г. И.,

равновесн.
геометр.,
инверсион.
барьеры,
частоты
иорн.
колебан.

ж. орг. химии, 1987,

61, № 7, 1928-1931.

(сер. Li_2O_2 ; II)

hiShi

|от. 27553|

1987

Зюбина Т.С., Чаркин О.П.,
Зюбин А.С.,

струк-
тура
и
стабильн.

жс. Меотам. жермш,
1987, 32, N11, 2616-

● -2624.

[дв. 29508]

1988

Sliz

Sliz⁺

Куликов Н. М.,
Метель А. М.

Чаркин О. П.

теория.

расчёт,
характер.

хим.

связь.

Исследования химии,

1988, ● 29, № 22-27.

LiS

Om

29928

1988

109: 82201x Theoretical study of the alkali and alkaline earth monosulfides. Partridge, Harry; Langhoff, Stephen R.; Bauschlicher, Charles W., Jr. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(10), 6431-7 (Eng). Ab initio calcs. are used to det. accurate spectroscopic consts. (r_e , ω_e , D_e) for the $X^2\Pi$ and $A^2\Sigma^+$ states of the alkali sulfides (LiS-RbS) and the $X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi$, and $A^1\Pi$ states of the alk.-earth sulfides (BeS-SrS). In contrast to the alkali oxides, all of the alkali sulfides have $X^3\Pi$ ground states owing to the larger electrostatic interaction. For the $X^1\Sigma^+$ states of the alk.-earth sulfides, the recommended dissocn. energies (D_0 in eV) are BeS(3.27), MgS(2.32), CaS(3.29), and SrS(3.41), in overall good agreement with the (uncertain) exptl. values. The computed $T_e(a^3\Pi)$ and $T_e(A^1\Pi)$ values for BeS of 7269 and 8244 cm^{-1} are in excellent agreement with expt. For the heavier alk.-earth sulfides, the calcd. $T_e(a^3\Pi)$ values (cm^{-1}) are MgS(4218), CaS(6528), and SrS(6870), and the calcd. $T_e(A^1\Pi)$ values are MgS(5068), CaS(6901), and SrS(7179). Core correlation increases the T_e values for the $a^3\Pi$ and $A^1\Pi$ states of MgS, CaS, and SrS.

meopem. packet
OCH-4 Ref. COCM

(+7) ☒



C. A. 1988, 109, N 10

LiS

Am 29928

1988

11 Д129. Теоретическое исследование щелочных и щелочноземельных моносulfидов. Theoretical study of the alkali and alkaline-earth monosulfides. Partridge Harry, Langhoff Stephen R., Bauschlicher Charles W., Jr. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 10, 6431—6437 (англ.)

Неэмпирические расчеты проведены для определения точных спектроскопич. постоянных (r_e , ω_e , D_e) состояний $X^2\Pi$ и $A^2\Sigma^+$ щелочных сульфидов, I (LiS—RbS) и состояний $X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi$ и $A^1\Pi$ щелочноземельных сульфидов, II (BeS—SrS). В отличие от щелочных оксидов, I всегда имеют основное состояние $X^2\Pi$, обусловленное большим электростатич. взаимодействием. Для II по-

М.П.

(75)

✱

RbS,

BeS, HfS, MgS, CaS



Ф. 1988, 18, N 11

лучены рекомендованные энергии диссоциации (D_0 в эВ): BeS (3,27), MgS (2,32), CaS (3,29), SrS (3,41), что согласуется с экспериментом. Для BeS рассчитаны значения $T_e(a^3\Pi) = 7269$ и $T_e(A^1\Pi) = 8244$ см⁻¹ в согласии с экспериментом. Для более тяжелых II рассчитанные значения $T_e(a^3\Pi)$ в см⁻¹ равны MgS (4218), CaS (6528), SrS (6870) и рассчитанные значения $T_e(A^1\Pi)$ равны MgS (5068), CaS (6901), SrS (7179). Показано, что основная корреляция увеличивает значения T_e для состояний $a^3\Pi$ и $A^1\Pi$ в MgS, CaS и SrS.

Н. В. В.

Лид

1988

Почтовая Т. П.,
Соломонов В. Г.

Собрание и св-ва лее-
куч. Менсвузовский
Сборник научных
трудов. ● Иварово, 1988,
Стр. 32-41.

$Li_2 S_2$

1988

Потребность М. П.,
Солонотек В. Т.

Строение и свойства
молекулы. Иваново,
1988, с. 32-47.

и.п.

(см. $Li_2 O$; III)

Li_2SO_4

1988

109: 200265w FTIR spectra of matrix isolated Group IA metal sulfates. Ramondo, F.; Bencivenni, L.; Rossi, V.; Nagarathna-Naik, H. M. (Dip. Chim., Univ. Roma, 00185 Rome, Italy). *Mol. Phys.* 1988, 64(6), 1145-51. (Eng). The FTIR spectra of M_2SO_4 (M = Group IA metal) were measured in Ar, Kr, and Xe matrixes at 10 ± 1 K. Measurements were carried out in the mid- and far-IR regions in order to assign the mol. vibrations and particularly those due to the modes of the coordinated metals. The vibrational assignment was supported by theor. calcns. providing the binding energy of the stable equil. configurations and the resp. vibrational frequencies. The stability of the 2 stable forms of D_{2d} and C_{2v} symmetry is discussed. The FTIR spectra exclude, on the ground of the exptl. and theor. results, the presence of matrix isolated C_{2v} type M_2SO_4 mola.

uk cnekmp,
cmprkmpa

(44) ☒ 
c.A. 1988, 109, N 2.2

Na_2SO_4 , K_2SO_4 ,
 Rb_2SO_4 , Cs_2SO_4

$\text{Li}^+ \cdots \text{SH}_2$ (Om. 32811) 1989

$\text{Li}^+ \cdots \text{H}_2\text{S}_2$ Cimisaglia R., Tomasi F.,
Cammi R., Hörmann H.-J.,

ab initio
pacem

Chem. Phys. 1989, 136,
N 3, 399-404.

Proton and
interactions

● lithium cation
with hydrogen

sulfide and hydrogen persulfide.

$S\dot{L}i_6$
 $S\dot{L}i_4$

1989

Marsden C. J.

J. Chem. Soc. Chem.

comm. 1989. N 18.

C. 1356 - 1358.

($\bullet$ $P\dot{L}i_5$; III)

LiSH^+

[от. 31585]

1989

Текляймен А.А., Зюбик
А.С., Царкин О.П.,

Мезитир.
расчетн.
потенц.
поверхн.

Ис. Меорган. Желен, 1989,
34, №5, 1091-1095.

ЛиСН

[ОМ. 31585]

1989

Независ.
расчет.
потенц.
поверхн.

Теклясмен А.А., Зю-
бен А.С., Царкин О.Б.,

Ж. Медведов. Желтый,
1989, 34, №5, 1091-1095.

SF_2Li^+ (OM. 33182) 1989

Яковсом В.В., Чаркин О.П.,

Ж. структур. химии, 1989,
30, № 6, 19-22.

Мезоэлектрические расчеты потенциалов
поверхностей, структуры и

стабильности ионов OF_2Li^+ ,
 SF_2Li^+ , F_2Li^+ и ClFLi^+ .

Liz 804

[DM 35544] 1991

Ramondo F., Benciven-
nich, et al.,

M.N.

Chem. Phys. 1991, 151,
N2, 179 — 186.

Li 103

1991

2 24 Б1089. Неэмпирическое исследование радикал-анионов SO_3^- и CO_2^- и комплексов с переносом заряда MSO_3 и MCO_2 ($\text{M}=\text{Li}, \text{Na}$). Ab initio study on the radical anions SO_3^- and CO_2^- and on the charge-transfer complexes MSO_3 and MCO_2 ($\text{M}=\text{Li}, \text{Na}$) / Ramondo F., Sanna N., Bencivenni L., Grandinetti F. // Chem. Phys. Lett.— 1991.— 180, № 4.— С. 369—380.— Англ.

Проведены неэмпирич. расчеты комплексов MSO_3 и MCO_2 ($\text{M}=\text{Li}, \text{Na}$). Геометрич. параметры и колебат. частоты различных структур определены при расчете неограниченным методом ССП в базисе 6-31ГФ*. Энергии стац. точек рассчитаны с помощью теории возмущений Меллера—Плессета 4-го порядка. Показано, что стабильными изомерами являются бидентатные и тридентатные структуры MSO_3 и бидентатные и монодентатные структуры MCO_2 ; бидентатные структуры наиболее стабильны как для MSO_3 , так и для MCO_2 . Рассмотрены сдвиги колебат. частот SO_3^- и CO_2^- при образовании комплексов с Li^+ и Na^+ . А. А. Сафонов.

(43) X

X. 1991, N 24

LiCO_2 , NaSO_3 , NaCO_2

LiSO_3

1991

12 Д134. Неэмпирическое изучение анион-радикалов SO_3^- и CO_2^- и комплексов с переносом заряда MSO_3 и MCO_2 ($\text{M}=\text{Li}, \text{Na}$). Ab initio study on the radical anions SO_3^- and CO_2^- and on the charge-transfer complexes MSO_3 and MCO_2 ($\text{M}=\text{Li}, \text{Na}$) / Ramondo F., Sanna N., Bencivenni L., Grandinetti F. // Chem. Phys. Lett.— 1991.— 180, № 4.— С. 369—380.— Англ.

Неэмпирическими МО методами исследованы ионные пары MSO_3 ($\text{M}=\text{Li}, \text{Na}$) и влияние координации на колебательные моды анион-радикала SO_3^- . Показано, что как бидентатная, так и тридентатная структуры этих ионных пар стабильны, причем более предпочтительной является бидентатная структура. С использованием неограниченного метода Хартри—Фока и теории возмущений в варианте Меллера—Плессета 2-, 3- и 4-го порядков исследована стабильность структур с низшей энергией. Рассчитаны частоты гармонич. коле-

М.А.

⊕

(13)

ф. 1991, № 12

$\text{NaSO}_3, \text{LiCO}_2, \text{NaCO}_2$

баний ионных пар в обеих структурных формах, а также частотные сдвиги, обусловленные ^{34}S и ^{18}O , для двух стабильных структур NaSO_3 . Проведено аналогичное исследование анион-радикала CO_2^- и монодентатных и бидентатных изомеров MCO_2 ($\text{M}=\text{Li}, \text{Na}$). Обсуждаются геометрии, стабильности и колебательные спектры этих изомеров.



LiSF

1992

Мусаев Д. Г.,
Чаркин О. Г.

и. п.

Ж. структур. химии.
1992. 33, № 1. С. 3-9.

(см. ● LiOF ; III)

LiSCl

Musaev A. G.;
Charkin O. P.

1992

теор.
расчет
потенц.
поверхм.
структ. и
стабиль-
ности

Zh. Struct. Khim.
1992, 33 (1), 3-9.

(см. ● LiOF ; III)

LiNO_2

1992

Ramondo F., Benicivelli L.,
et al.,

структура,
теор. расчет

TEOCHEM. 1992, 85, 121-47

(см. ● LiAsO_3 ; III)

Li, сурьфат

1992

сюрфат,
Vi, мор.
расчет

Ramondo F.,
Bencivenni L. et al.
Chem. Phys. 1992,
164 (1), 153.

(с. L. перхлорат, III)

LiSO_3

1992

Ramondo F.,
Sanna N. et al.

meop.
paerem

Chem. Phys. Lett.
1992, 193(6), 594.

(cell. SO_3^- ; III)

Li_2S
 Li_2S^+

Li_3S
теор. расчет
структ.
параметр.,
д. измерения
связи, $\text{\AA}$.

1992
Rehm Eva,
Boldyrev A.I. et al.

Inorg. Chem. 1992,
31 (23), 4834-42.

(см.  Li_2F ; III)

Liz I, Liz I

1992

Zakrzhevskii V. F.,
Von Niessen W. et al.,

(9) parum
(Ae)

Chem. Phys. Lett.
1992, 197 (1-2), 195-9.

(all. Liz O;  III)

LiS
 LiS^+

1993

Boldyrev A.I.,
Simons J. et al.

ab initio
calculations
on the structure,

J. Chem. Phys. 1993,
99(11), 8793-504.

et al.

● (cell, Li_2 ; III)

Li3 S

1993

7

Li4 S

J. Mass Spectrom. Soc. Jpn.

масс - 1993, 41(6)

спектр

Кнущек.

исслед.

до, дам;

у (all. Li⁶; I)

$S\dot{Li}_5$

1993

$S\dot{Li}_6$

Ivanic Joseph,
Marsden Colin J., et al.

термоген.
связывен.,
сир-ра,
теор.
расчет

J. Chem. Soc., Chem.
Commun. 1993, (10),
822-5.

(см. $\bullet Li_3 F, F\dot{Li}_5$; III)

Li₃S

1993

Szaniszló J., Tamássy -
Lentéi J.

össeszer.
szerkeszt.

Acta phys. et chim.
debrec. 1993. 28. c. 49-54.

(szer. Li₂F; III)

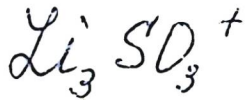
S. Li

(PA 37 773)

1994

D, Boldyrev A.I., Gonzalez N.,
Simons J.,
Журнал
теорет- J. Phys. Chem., 1994,
ическ- 9931-9944
прегм 98, N 40,

1994



Чаркеев О. П.,
Клименко Н. М. и др.

д. н. Ж. морзав. химия.
1994. 39, № 9. С. 1545-
1553.

(сер. Li_3NO_3 ; III)

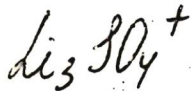
Li₃S
Li₄S

1994

121: 213520y The stability and structure of the hyperlithiated molecules Li₃S and Li₄S: an experimental and ab initio study. Kudo, Hiroshi; Yokoyama, Keiichi; Wu, C. H. (Advanced Sci. Res. Center, Japan Atomic Energy Res. Inst., Tokai, Japan 319-11). *J. Chem. Phys.* 1994, 101(5), 4190-7 (Eng). The thermodyn. properties of the hyperlithiated mols. Li₃S and Li₄S were investigated by means of Knudsen effusion mass spectrometry and their stability and structure were studied through ab initio MO calcns. The Li₃S and Li₄S mols. were found to be stable toward loss of one or two lithium atoms, resp., to form the octet mol. Li₂S. The exptl. dissocn. energies were $D_0^0(\text{Li}_2\text{S}-\text{Li}) = 33.1 \pm 1.6$ and $D_0^0(\text{Li}_2\text{S}-2\text{Li}) = 83.9 \pm 2.7$ kcal/mol. The atomization energies were detd. as $D_0^0(\text{Li}_3\text{S}) = 161.3 \pm 3.8$ and $D_0^0(\text{Li}_4\text{S}) = 211.9 \pm 4.2$ kcal/mol. The ionization potential obsd. for Li₃S was 4.4 ± 0.2 eV. From the theor. calcns., the occupancies of nine valence electrons in Li₃S (C_{3v}) and ten valence electrons in Li₄S (C_{2v}) were seen as $(5a_1)^2(3e)^4(6a_1)^2(7a_1)^1$ and $(6a_1)^2(3b_1)^2(7a_1)^2(3b_2)^2(8a_1)^2$, resp. The singly occupied $7a_1$ orbital of Li₃S and the highest occupied $8a_1$ orbital of Li₄S were found to be involved in the formation of a lithium cage, which should contribute to the thermodyn. stability of these mols.

(До 9, ста-
бильность и
структура,
теор. и эксп.
исслед.

С.А. 1994, 121, ~18



1995

Charkin D.P., Klinenko N.M.,
et al.,

мерем.
расчет.
сп-м
стабильн.

Zh. Neorg. Khim., 1995,
40 (6), 1005 - 18.

(all: $\bullet \text{Li}_3\text{NO}_4$; III)

Liz S Kudo, Hiroshi,

1995

Ben-shikaku Kenkyu 1995,
etsugaku, 40 (5), 127-36

Do, J.
mass spect,
m.x.

(see. (Liz); III)

(10/10/1)

1996

Li3S

Li4S

Kudo, Hiroshi,
Yokoyama Keiichi,

существов.,
структура,
стабильность,
теорет.
расчет

Bull. Chem. Soc. Jpn.
1996, 69(6), 1459-69

(all. ● C Li6; III)

Li₂SO₄

1996

структура,
колебатель-
спектр,
мол. параметры

125:341514u The structure and vibrational spectra of M_2SO_4 ($M = Li, Na, K$) molecules: Ab initio SCF MO LCAO calculations with effective core potentials and with account taken of all electrons. Sliznev, V. V.; Solomonik, V. G. (Ivanovo State Academy Chem. Technol., Ivanovo, Russia). *Russ. J. Coord. Chem. (Transl. of Koord. Khim.)* 1996, 22(9), 655-660 (Eng). Ab initio SCF MO LCAO method is used to calc. the geometric parameters, force fields, vibrational frequencies, and IR intensities for the M_2SO_4 ($M = Li, Na, and K$) mols. and isolated SO_4^{2-} ion. The calcns. are carried out both with account taken of all electrons and with introducing the semilocal effective potentials suggested by Durand et al. to describe the core electrons. The errors assocd. using the effective core potentials are analyzed. The calcns. with inclusion of all electrons gave the following mol. parameters: Li_2SO_4 — $R_e(LiO) = 1.855 \text{ \AA}$, $R_e(SO) = 1.475 \text{ \AA}$, $\alpha_e(OSO) = 103.9^\circ$, $\omega_i = 1060, 668, 499, 1276, 758, 612, 418, 1207, 668, 410, 159 \text{ cm}^{-1}$; Na_2SO_4 — $R_e(NaO) = 2.199 \text{ \AA}$, $R_e(SO) = 1.476 \text{ \AA}$, $\alpha_e = 106.2^\circ$, $\omega_i = 1054, 575, 281, 1250, 729, 360, 439, 1205, 666, 270, 69 \text{ cm}^{-1}$; K_2SO_4 — $R_e(KO) = 2.523 \text{ \AA}$, $R_e(SO) = 1.476 \text{ \AA}$, $\alpha_e(OSO) = 107.2^\circ$, $\omega_i = 1057, 544, 201, 1241, 706, 279, 450, 1207, 669, 213, 42 \text{ cm}^{-1}$ (for the $3A_1 + 3B_2 + B_1 + 4E$ vibration representation). The regularities of the variation in the mol. parameters are revealed for these compds. The computational results are compared with available exptl. data.

C.A. 1996, 125, N 26

1996

F: Li₂SO₄

P: 3

9Б134. Строение и колебательные спектры молекул M[2]SO[4] (M=Li, Na, K) по данным неэмпирических расчетов методом ССП МО ЛКАО с применением эффективных остовных потенциалов и с непосредственным учетом всех электронов / Слизнев В. В., Соломоник В. Г. // Координац. химия. - 1996. - 22, N 9. - С. 699-705. - Рус.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО рассчитаны геометрические параметры, силовые поля, частоты колебаний и интенсивности ИК-спектров молекул M[2]SO[4] (M=Li, Na, K) и способного иона SO[4]{2-}. Расчеты проведены как с непосредственным учетом всех электронов, так и с использованием для описания остовных электронов полулокальных эффективных потенциалов Дюрана и др. Проведен анализ погрешностей, связанных с использованием эффективных

Р.мех 1997

остовных потенциалов. Расчеты с непосредственным учетом всех электронов привели к следующим величинам молек. параметров:
 $\text{Li}[2]\text{SO}[4]\text{-R}[\text{e}](\text{LiO})=1.855 \text{ \AA}$, $\text{R}[\text{e}](\text{SO})=1.475 \text{ \AA}$,
 $'\alpha'[\text{e}](\text{OSO})=103.9^\circ$, $'\omega'[\text{i}]=1060, 668, 499, 1276, 758, 612, 418,$
 $1207, 668, 410, 159 \text{ см}^{-1}$; $\text{Na}[2]\text{SO}[4]\text{-R}[\text{e}](\text{NaO})=2.199 \text{ \AA}$,
 $\text{R}[\text{e}](\text{SO})=1.476 \text{ \AA}$, $'\alpha'[\text{e}]=106.2^\circ$, $'\omega'[\text{i}]=1054, 575, 281, 1250,$
 $729, 360, 439, 1205, 666, 270, 69 \text{ см}^{-1}$; $\text{K}[2]\text{SO}[4]\text{-R}[\text{e}](\text{KO})=2.523 \text{ \AA}$,
 $\text{R}[\text{e}](\text{SO})=1.476 \text{ \AA}$, $'\alpha'[\text{e}](\text{OSO})=107.2^\circ$, $'\omega'[\text{i}]=1057, 544, 201,$
 $1241, 706, 279, 450, 1207, 669, 213, 42 \text{ см}^{-1} \text{ см}^{-1}$; $\text{K}[2]\text{SO}[4]\text{-}$
 $\text{R}[\text{e}](\text{KO})=2.523 \text{ \AA}$, $\text{R}[\text{e}](\text{SO})=1.476 \text{ \AA}$, $'\alpha'[\text{e}](\text{OSO})=107.2^\circ$,
 $'\omega'[\text{i}]=1057, 544, 201, 1241, 706, 279, 450, 1207, 669, 213, 42 \text{ см}^{-1}$
 (колебательное представление - $3\text{A}[1]+3\text{B}[2]+\text{B}[1]+4\text{E}$). Выявлены
 закономерности изменения молек. параметров в рассмотренном ряду
 соединений. Результаты расчетов сопоставлены с имеющимися
 эксперим. данными. Библ. 33.

Li_2SO_4

1996

9Б134. Строение и колебательные спектры молекул M_2SO_4 ($\text{M}=\text{Li}, \text{Na}, \text{K}$) по данным неэмпирических расчетов методом ССП МО ЛКАО с применением эффективных остоновых потенциалов и с непосредственным учетом всех электронов / Слизнев В. В., Соломоник В. Г. // Координац. химия. — 1996. — 22, № 9. — С. 699—705. — Рус.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО рассчитаны геометрические параметры, силовые поля, частоты колебаний и интенсивности ИК-спектров молекул M_2SO_4 ($\text{M}=\text{Li}, \text{Na}, \text{K}$) и способного иона SO_4^{2-} . Расчеты проведены как с непосредственным учетом всех электронов, так и с использованием для описания остоновых электронов полулокальных эффективных потенциалов Дюрана и др. Проведен анализ погрешностей, связанных с использованием эффективных остоновых потенциалов. Расчеты с непосредственным учетом всех электронов привели к следующим величинам молек. параметров: $\text{Li}_2\text{SO}_4 - R_e(\text{LiO})=1.855 \text{ \AA}$, $R_e(\text{SO})=1.475 \text{ \AA}$.

М.П. ☒

(3)

X. 1997, № 9

Na_2SO_4 , K_2SO_4 , SO_4^{2-}

$\alpha_e(\text{OSO})=103.9^\circ$, $\omega_i=1060, 668, 499, 1276, 758, 612, 418,$
 $1207, 668, 410, 159 \text{ см}^{-1}$; $\text{Na}_2\text{SO}_4\text{—Re}(\text{NaO})=2.199 \text{ \AA}$,
 $\text{Re}(\text{SO})=1.476 \text{ \AA}$, $\alpha_e=106.2^\circ$, $\omega_i=1054, 575, 281, 1250, 729,$
 $360, 439, 1205, 666, 270, 69 \text{ см}^{-1}$; $\text{K}_2\text{SO}_4\text{—Re}(\text{KO})=2.523$
 $\text{ \AA}$, $\text{Re}(\text{SO})=1.476 \text{ \AA}$, $\alpha_e(\text{OSO})=107.2^\circ$, $\omega_i=1057, 544, 201,$
 $1241, 706, 279, 450, 1207, 669, 213, 42 \text{ см}^{-1}$ (колебатель-
ное представление — $3A_1+3B_2+B_1+4E$). Выявлены зако-
номерности изменения молек. параметров в рассмотре-
ном ряду соединений. Результаты расчетов сопоставлены
с имеющимися эксперим. данными. Библ. 33.

Si'SLi⁺

1996

Su Yu-Nung,
Tsai Ming-Sung et al.

сверхм.
изотопная,
теор.
расчет

Int. J. Quantum Chem.
1996, 59(6), 487-493.

(сер.  H⁺P₂⁺; III)

Lia SCL⁺

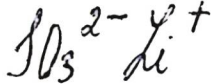
1997

Charkin O.P. et al.,

мисрм.
р а е м
стр-м, Ул (II), 1896-1904
статья.

Di

(all. Lia • DF⁺, III)



1997

127: 351500s Structure, interaction potentials, and vibrational spectra of the sulfite ion coordinated to alkaline element ions. Perelygin, I. S.; Shatokhin, S. A.; Tuchkov, S. V. (Ufa State Aircraft Technical University, Russia). *J. Struct. Chem. (Transl. of Zh. Strukt. Khim.)* 1997, 38(2), 227-230 (Eng), Consultants Bureau. Potential surface sections in the complexes of SO_3^{2-} with Li^+ and Na^+ are calcd. by the CNDO method with a modified potential of interaction between the cores. The equil. geometry of the coordinated sulfite ion corresponds to the bidentate coordination of the anion to the Li^+ and Na^+ cations. Frequencies of normal vibrations are detd. for four types of anion coordination to cations and compared with the exptl. frequencies in aq. sodium sulfite. The bidentate coordination gives the best correspondence with the exptl. spectrum.

структура,
координ.
спектр,



C. A. 1997, 127, N 25

F: Li₂SO₂

P: 3

22Б160. Неэмпирическое исследование изомерии в молекулах солей Li₂AB₂ и ионов Li₂AB₂{+} с 18 и 20 валентными электронами / Чаркин О. П., Клименко Н. М., МакКи М. Л. // Ж. неорганической химии. - 1998. - 43, 4. - С. 605-618. - 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 литиевых солей типа Li₂AB₂ (Li₂CO₂, Li₂SiO₂, Li₂CS₂, Li₂SiS₂ (I), Li₂O₃ и Li₂SO₂) и ионов типа Li₂AB₂{+} (Li₂NO₂{+}, Li₂PO₂{+} (II), Li₂NS₂{+} (III), Li₂PS₂{+} (IV) и Li₂ClO₂{+}) с 18 и 20 валентными электронами. Для большинства систем с N[вал]=18 наиболее выгодна плоская структура (C[s]) со смежными трех- и четырехчленными циклами, в которой один катион бидентатно координирован к обоим атомам халькогена В, а второй катион координирован

1998

ЖХХ, 1998, №22

к связи А-В. Исключение составляют II и I, у которых глобальный минимум отвечает структурам $C[2v]$ с монодентатной и бидентатной координацией обоих катионов соответственно. Структура $C[2v]$ ионов $Li[2]AB[2]\{+\}$, где один из катионов связан с центральным атомом аниона А, в большинстве случаев соответствует вершине потенциального барьера, который значительно ниже, чем у исходных молекул $LiAB[2]$, а у IV и III барьер составляет лишь 7,5 и 1,5 ккал/моль. У молекул с $N[вал]=20$ наиболее выгодна бидентатная структура $C[2v]$. Определены равновесные геометрические параметры и относительные энергии изомеров, частоты и ИК-интенсивности нормальных колебаний, с помощью которых изомеры могут быть идентифицированы методами матричной ИК-спектроскопии. Проанализированы тенденции поведения этих свойств в различных рядах молекул $Li[2]AB[2]$, определены соединения с необычными координациями анионов. Обсуждены деформация и поляризация анионов $AB[2]\{-\}$ и $AB[2]\{2-\}$ и сдвиги их колебательных частот под влиянием одного и двух катионов при различных способах их взаимной ориентации.

LiPF_6^+
 LiPF_6^+

1998

Charkin O.P. et al.

номер
номер
до
параметры
вместе
расчет

Zh. Neorg. Khim. 1998,
43(9), 1520-33

(all. LiPF_6 ; III)

1998

F: LiSO2[+]

P: 3

20B127. Неэмпирическое исследование изомерии в молекулах солей LAV[2] 18 и 20 валентными электронами / Чаркин О. П., Макки М. Л., Клименко Н. М., Шлойер П. ф. Р. // Ж. неорганической химии. - 1998. - 43, 2. - С. 294-302. - 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 LAV[2] с 18 валентными электронами - литиевых и натриевых солей LNO[2], LPO[2], LNS[2], LPS[2], LC1O[2] и ионов LiS[3]{+}, LiSO[2]{+}. Для молекул солей наиболее выгодной найдена структура C[2v] с бидентатной координацией катиона L{+} к атомам халькогена В. Для ионов LSO[2]{+} глобальный минимум отвечает монодентатной координации L{+} к одному атому кислорода.

РЖХ, 1998, №20

Инвертированная структура $C[2v]$, в которой Li^{+} связан с центральным атомом аниона A , везде соответствует вершине значительного потенциального барьера. У нитритов, тионитритов, тиофосфитов и ионов $LiS[3]^{+}$ локализован второй плоский изомер, в котором катион координирован к связи $A-B$. У нитритов он менее предпочтителен энергетически, но стабилизирован кинетически, а у тионитритов координация к связи и бидентатная координация близки по энергии. У иона $LiS[3]^{+}$ в числе низкоэнергетических структур оказывается пирамидальный изомер $C[3v]$ с тригапто-координацией Li^{+} к циклической форме $S[3]$. Определены равновесные геометрические параметры и относительные энергии изомеров, частоты и интенсивности нормальных колебаний. Проанализированы их тенденции в различных рядах молекул $LiAB[2]$, прогнозируются соединения с необычными координациями анионов. Обсуждены деформация и поляризация анионов $AB[2]^{-}$ под влиянием катиона при различных способах из взаимной ориентации.

F: LiS3[+]

P: 3

20B127. Неэмпирическое исследование изомерии в молекулах солей LAB[2] 18 и 20 валентными электронами / Чаркин О. П., Макки М. Л., Клименко Н. М., Шлойер П. ф. Р. // Ж. неорганической химии. - 1998. - 43, 2. - С. 294-302. - 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 LAB[2] с 18 валентными электронами - литиевых и натриевых солей LNO[2], LPO[2], LNS[2], LPS[2], LClO[2] и ионов LiS[3]{+}, LiSO[2]{+}. Для молекул солей наиболее выгодной найдена структура C[2v] с бидентатной координацией

1998

РЖХ, 1998, №20

катиона $L\{+ \}$ к атомам халькогена В. Для ионов $LSO[2]\{+ \}$ глобальный минимум отвечает монодентатной координации $L\{+ \}$ к одному атому кислорода. Инвертированная структура $C[2v]$, в которой $L\{+ \}$ связан с центральным атомом аниона А, везде соответствует вершине значительного потенциального барьера. У нитритов, тионитритов, тиофосфитов и ионов $LS[3]\{+ \}$ локализован второй плоский изомер, в котором катион координирован к связи А-В. У

нитритов он менее предпочтителен энергетически, но стабилизирован кинетически, а у тионитритов координация к связи и бидентатная координация близки по энергии. У иона $LiS[3]\{+ \}$ в числе низкоэнергетических структур оказывается пирамидальный изомер $C[3v]$ с триганто-координацией $Li\{+ \}$ к циклической форме $S[3]$. Определены равновесные геометрические параметры и относительные энергии изомеров, частоты и интенсивности нормальных колебаний. Проанализированы их тенденции в различных рядах молекул $LiAB[2]$, прогнозируются соединения с необычными координациями анионов. Обсуждены деформация и поляризация анионов $AB[2]\{- \}$ под влиянием катиона при различных способах из взаимной ориентации.

F: LiSO₃[+]

P: 3

22B159. Неэмпирическое исследование структуры молекул оксо- и тиосолей LAB[3] (L=Li, Na, A=N, P, S{+}, B=O, S) / Чаркин О. П., МакКи М. Л. // Ж. неорганич. химии. - 1998. - 43, 4. - С. 619-630. - 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 литиевых и натриевых оксо- и тиосолей типа LAB[3] с 24 валентными электронами, а также изoeлектронных ионов LAB[3]{-} и LAB[3]{+} (L=Li, Na, A=N, P, C{-}, Si{-}, S{+}, B=O, S) с бидентатно-координированной структурой (C[2v]) и структурой плоского пятичленного

1998

ФХХ, 1998, №22.

цикла (C[s]), содержащей диоксидный или дисульфидный мостики O-O и S-S. Определены равновесные геометрические параметры и относительные энергии изомеров, частоты и ИК-интенсивности нормальных колебаний, обсуждено влияние электронной корреляции на результаты расчетов. Проанализированы тенденции свойств в различных рядах молекул и ионов LiAB[3], определены соединения с необычными координациями анионов. Обсуждены деформация и поляризация анионов AB[3]{-} под влиянием катиона при различных способах их взаимной ориентации. Результаты сопоставлены с данными аналогичных расчетов изоэлектронных галогенидных солей LAHal[3], выполненных в предыдущей работе авторов.

Li_2CO_3

1998

потенц.
поверхн.
структур.
парам.
vi

Chen D.O., et al.

Zh. Neorg. Khim. 1998, 43(10),
1694-1709

(см. Li_2CO_3 , III)

Li_2SO_3

1998

cmp - pa,
all - norm,
Di, ab initio
norm

(+8) Δ

Li_2SeO_3 ,

Na_2SO_3 , Na_2SeO_3 ,

C. A. 1998, 129, N 17 K_2SO_3 , K_2SeO_3

129: 222610v Ab initio studies on the structure and vibrational spectra of alkali-metal sulfites and selenites. Solomonik, V. G.; Marenich, A. V.; Sliznev, V. V. (Ivanovo State Academy of Chemical Technology, Ivanovo, Russia). *Russ. J. Coord. Chem.* 1998, 24(7), 457-466 (Eng), MAIK Nauka/Interperiodica Publishing. Equil. geometry, force consts., vibrational frequencies, and IR intensities of the M_2XO_3 ($\text{M} = \text{Li}, \text{Na}, \text{or K}$ and $\text{X} = \text{S}$ or Se) mols. are calcd. by the ab initio Hartree-Fock method using double-zeta valence triple-zeta basis sets augmented by the polarization and diffuse functions. The relative energies of different mol. configurations and the dissociation energies for $\text{M}_2\text{XO}_3 \rightarrow \text{M}_2\text{O} + \text{XO}_2$ are refined at the 2nd-order Moller-Plesset perturbation theory level. The chem. bonding in these mols. can be approx. formulated as $(\text{M}^+)_2[\text{XO}_3]^{2-}$. The equil. nuclear configuration has sym-

metry C_3 and corresponds to the bisbidentate coordination of the M^+ cations by the pyramidal XO_3^{2-} anion. The monodentate-bidentate structures of symmetry C_s correspond to the saddle points in the potential energy surfaces of the mols. The results of IR calcns. satisfactorily agree with the exptl. IR spectra of the matrix-isolated Na_2SeO_3 and K_2SeO_3 mols. The trends in changing the mol. parameters are revealed for the $Li_2XO_3 \rightarrow Na_2XO_3 \rightarrow K_2XO_3$ sequence and for the $M_2SO_3 \rightarrow M_2SeO_3$ transition.

$\text{Li}^+ - \text{SH}_2$

(DM. 40603)

2010

Ahmed M. El-Nahas[†]
and Kimitiko Hirao,

J. Phys. Chem. 2000, A104,
N1, 138-144.

Complexation of Li^+ and Cu^+
with HX ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{OH}, \text{SH}, \text{NH}_2$)

and PH_2)
B3LYP and

Molecules by
CCSD(T) Methods

LiS

Vol. 41205

2007

mm/cmm
cmm

Brewster M.A.,
Liang L.M.,

to 27000. Chem. Phys. Lett.,
vol. 2007, 349, 249-256

The millimeter ● / sub-millimeter