

BH-

BH-

#4-5659

1974

Blustin P. H, Linnet J.W.,
J. Chem. Soc. Faraday Trans.,
I974., Part 2, 70, N5, 826-36.

M.H.; J;

(*crs.* Li_2^+ ; III)

BH -

* 4-8282

1975

Gripping Karen M.
Simons Jack.

(J, He, u.n.)

"J. Chem Phys" 1975, 62,
#2, 535-540 (univ)
(see BH; III)

1978

ВН-
АН-

8 Б21. Исследования эффектов электрон. корреляции методами ПНО—КВ и ПСЭП. VI. Сродство к электрону двухатомных гидридов второго и третьего периодов и спектроскопические постоянные их отрицательных ионов. Rosmus Pavel, Meyer Wilfried. PNO—CI and CEPA studies of electron correlation effects. VI. Electron affinities of the first-row and second-row diatomic hydrides and the spectroscopic constants of their negative ions. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 6, 2745—2751 (англ.)

В рамках приближений конфигурац. взаимодействия с разл. по псевдонатуральным орбиталям (ПНО—КВ) и связанных электронных пар (ПСЭП) проведены расчеты величин сродства к электрону двухатомных гидридов АН элементов 2-го и 3-го периодов и определены спектроскопич. постоянные для основных электронных состояний соотв-щих отриц. молек. ионов АН⁻. Используются базисные наборы, составленные из функций s-, p-, d- и f-типа, дополненные диффузными орбиталями. Отмечено, что результаты расчетов методом

(Ae, γ)

④ АН-
22/10/78
21/9/78

ССП базисными наборами близки к хартри-фоковому пределу. Сопоставление определенных в ПСЭП величин сродства к электрону с эксперим. данными показывает, что погрешность теор. расчета находится в пределах 0,15—0,35 эв. Спектроскопич. постоянные молек. ионов определены по энергиям, рассчитанным в 5—7 точках около положения равновесия. Отмечено, что погрешность ПСЭП для энергии диссоциации составляет 0,2 эв для атомов 2-го периода и 0,1 эв для атомов 3-го периода. Рассчитаны факторы Франка—Кондона для процессов $\text{AH}^- \rightarrow \text{AH}$. При сопоставлении эксперим. и теор. результатов сделано заключение о правильности отнесения эксперим. фотоэлектронных спектров. Однако, в большинстве случаев неправильно определены знаки изменений равновесных межъядерных расстояний при ионизации и присоединении электрона. Ожидается, что ранее не наблюдавшиеся молек. ионы BH^- и AlH^- являются стабильными со значениями P_t ионизации порядка 0,15 эв.

А. В. Немухин

BH₄⁻

1979

Silvi B.

Cher. m. J. chim. phys. et phys. chim. biol.,
1979, 76, n° 1, 21-25.



rem. CO₂;

III

)

BH

1980

Jug R, et al.

Theor. crim. acta, 1980,
57, N2, 131-44

кб. мех.
рас. 7;
м. св. 2



см. FH-17