

1978

LiH.

BH

HF

kb. accx.
factef

(42) ☒

1978

89: 153067. Perturbation calculation of molecular correlation energy using Gaussian-type geminals. Second-order pair energies of the first-row diatomic hydrides from minimal Gaussian geminal basis sets. Adamowicz, L.; Sadlej, A. J. (Inst. Phys. Chem., Pol. Acad. Sci., Warsaw, Pol.). *Acta Phys. Pol. A* 1978, A54(1), 73-97 (Eng). The 2nd-order-perturbation (SOP) singlet- and triplet-electron-pair correlation energies of LiH, BH, and HF, the total mol. SCF energies [-7.9853, -25.1132, and -99.3538 at. unit (a.u.) for LiH, BH, and HF, resp.], and the total SOP correlation energies [$E^{(2)} = -0.04896$, -0.08277, and -0.17347 a.u. for LiH, BH, and HF, resp.] were obtained in calcns. with minimal Gaussian geminal (GG) basis sets by using the previously described theor. methods (A. and S., 1977; A., 1978). The nonlinear parameters for each GG were optimized by using 2nd-order pair-energy functionals and FSGO SCF ref. functions. The present calcns. gave $E^{(2)}$ values that are 60-75% of the value obtained in existing high-accuracy calcns. with many-body perturbation theory.



C.A., 1978, 89, N18

LiH
BH
HF

Метод
расчета
энергии

(42)



р 1978, N12

12 Д153. Расчеты молекулярной энергии корреляции методом теории возмущений с использованием геминалей гауссового типа. Парные энергии второго порядка двухатомных гидридов первого периода, полученные в минимальном базисе гауссовых орбиталей. Adamowicz L., Sadlej A. J. Perturbation calculation of molecular correlation energy using gaussian-type geminals. Second-order pair energies of the first-row diatomic hydrides from minimal gaussian geminal basis sets. «Acta phys. pol.», 1978, A54, № 1, 73—97 (англ.)

Описан метод расчета энергии корреляции во втором порядке теории возмущений ($E^{(2)}$) с использованием геминальных ф-ций (ГФ) с корреляц. множителем гауссового типа. Конкретные расчеты $E^{(2)}$ для LiH, BH и HF выполнены в миним. базисе ГФ (т. е. при длине разложения ГФ, равной единице). Результаты сравнивались с данными расчетов методом многочастичной теории возмущений, проведенных в расширенных слэтеровских базисах. Показано, что используемый метод позволяет учесть 76% $E^{(2)}$ для LiH и BH и около 60% — для HF (что обусловлено относительно худшим качеством одноэлектронного базиса, использованного в случае HF).

О. В. Сизова

6385
См. см.

LiH

BH

расчет
энергий

(+)

Q: 1949, N9

9 Б30. Вычисление молекулярной корреляционной энергии методом теории возмущений с использованием гауссовых геминалей. Парные энергии LiH и BH во втором приближении. Adamowicz Ludwik. Perturbation calculation of molecular correlation energy using Gaussian-type geminals. Second-order pair energies of LiH and BH. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 9, 3992—4000 (англ.)

Методом теории возмущений вычислены парные энергии LiH и BH. На 1-м этапе вычислений основной набор двухэлектронных ф-ций с коррелирующим множителем гауссова типа оптимизирован относительно одноэлектронных потенциалов, определенных из приближенных ф-ций ССП. На 2-м этапе линейные параметры пересчитаны с использованием точных ССП орбиталей и определены парные корреляц. энергии во 2-м приближении. Вычисленные корреляц. энергии 2-го порядка для LiH и BH сопоставлены с результатами многочастичной теории возмущений. Указывается, что парные ф-ции в 1-м приближении, выраженные через гауссовы геминали, имеют сравнительно простую форму, а при оптимизации обеспечивают высокую точность вычисления корреляц. энергии во 2-м приближении.

В. И. Захарьин

1949

2171

оптмиз

LiH
HF
LiF
CO

1979
7 Б10. Модифицированный метод ВКВЛО. I. Энергия второго порядка, полученная с использованием приближенных гамильтонианов методов ППДП/2 и ЧПДП. Bořa Roman, Pelikán Peter. A modified PCILO method. I. Second-order energy using CNDO/2 and INDO Hamiltonian approximations. «Theor. chim. acta», 1978, 50, № 1, 11—19 (англ.)

Разработана модифицированная схема метода ВКВЛО, в к-рой: 1) используется разделение гамильтониана по Меллеру—Плессету, а не по Эпштейну—Несбету; 2) используется приближенный гамильтониан метода ЧПДП; 3) расширена область применимости —

Сил. пост.

Те равновесн.
расстояния

(+3) ☒

ж. 1979, № 7

можно рассматривать атомы от Н до Вг включительно, в том числе атомы переходных элементов; 4) схема применима к системам с незаполненными оболочками, (в рамках неограниченного метода Хартри—Фока). Кроме того, модифицировано определение гибридных орбиталей и исходных полностью локализованных МО. Получены выражения для поправки 2-го порядка к энергии. С помощью предложенной схемы в рамках приближений ППДП/2 и ЧПДП вычислены равновесные расстояния и силовые постоянные молекул LiH, HF, LiF, CO. Полученные результаты сопоставлены с результатами расчетов по станд. схеме метода ВКВЛО и методом МО ЛКАО ССП. Проведены также расчеты молекул CH_4 , CH_3F , CH_2F_2 , CHF_3 , CN и показано, что в этом ряду вычисленная корреляц. энергия линейно зависит от числа валентных электронов. Обсуждены преимущества описанной модификации по сравнению со станд. схемой метода ВКВЛО. М. М. Гофман

Ли Н

1978

Бродович А. И.

Авторизация К. И. И.

и., 1978.

структ.
ссыл., посыл.
поверхи.

LiM

расчет
потенц.
энергий

1978

Болдогров А. И. и др.

" 13 Всес. Чугаев. совещ.
по химии комплексов.
соедин., 1978" М., 1978,
51

(см. BeM₂; ☒)

1978

LiH

H₂O

(y; Ae)

(+1) $\boxtimes$

89: 65632q Electronic molecular properties by the many-body Green's function method: lithium hydride and water. Carravetta, V.; Moccia, R. (Ist. Chim. Fis., Univ. Pisa, Pisa, Italy). *Mol. Phys.* 1978, 35(1), 129-44 (Eng). The Dyson equation for the 1-body Green's function is solved, in a finite basis representation, using an approximated optical potential derived from its functional deriv. expression. Some undesirable features of this approxn. are discussed and techniques used to carry out the computations are examd. Ground state energy, dipole moment, ionization potential, electron affinity results are reported for LiH and H₂O. The calcd. ionization spectrum of H₂O agrees with the exptl. data.



Q.A. 1978, 29, NS

LiH
H₂O

Авг; 7, м

(+1) 

2, 1978, № 12

1978

12 Б26. Изучение электронных свойств молекул LiH и H₂O методом многочастичных функций Грина. Carravetta V., Moccia R. Electronic molecular properties by the many-body Green's function method: LiH and H₂O. «Mol. Phys.», 1978, 35, № 1, 129—144 (англ.)

Рассмотрено получение одночастичных функций Грина путем прямого решения уравнения Дайсона с приближенным выражением для оптич. потенциала. Проанализированы возможности устранения возникающей в рассмотренном приближении неэрмитовости потенциала. Изложены различные схемы вычислительной процедуры и проведено их сопоставление. Выполнены численные расчеты для молекул LiH и H₂O в расширенных базисах ФСТ—ЛКГО. Результаты для энергий основного состояния значительно улучшены по сравнению с хартри-фоковскими расчетами в тех же базисах. Рассчитаны также дипольные моменты, потенциалы ионизации и энергии сродства к электрону для LiH H₂O. В случае H₂O в области энергий $\sim -1,3$ ат. ед. (ССП-энергия $\varepsilon_{2\alpha 1} = 1,354$ ат. ед.) имеется три полюса функции Грина примерно одинаковой важности при $-1,31$.

—1,29 и —1,21 ат. ед. Сделан вывод, что спектр фотоионизации H_2O в этой области должен иметь три пика на интервале ~ 3 эв. (экспериментально установлено, что в фотоэлектронных спектрах H_2O наблюдается сильная асимметрия сечения фотоионизации в этой области).

М. Гофман

1978

LiH

H₂O

(He, J)

6 Д223. Расчет электронных молекулярных свойств методом многочастичной функции Грина: LiH и H₂O. Carravetta V., Moccia R. Electronic molecular properties by the many-body Green's function method: LiH and H₂O. «Mol. Phys.», 1978, 35, № 1, 129—144. (англ.)

В пространстве конечной размерности решено уравнение Дайсона для одночастичной ф-ции Грина. При этом использован оптич. потенциал, полученный из выражения функциональной производной. Отмечен ряд трудностей, встречающихся при использовании оптич. потенциала, таких как неэрмитовость операторов и проблема N -представимости. Для молекул LiH и H₂O с помощью развитого формализма рассчитаны дипольные моменты, потенциалы ионизации и сродство к электрону. Базисом служили МО, полученные в пространстве сгруппированных гауссовых ф-ций. А. Дементьев



Ф. 1978, № 6

LiH

[Оттиск 6674]

1978

24 Б23. Результаты расчетов LiH, HF, H₂O и NH₃ в диагональном расширенном приближении случайных фаз. Carravetta V., Moccia R. Results of diagonal ARPA calculations for LiH, HF, H₂O and NH₃. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 57, № 1, 134—138 (англ.)

С использованием диагонального варианта расширенного приближения случайных фаз (РПСФ) рассчитаны функции линейного отклика в молекулах LiH, HF, H₂O и NH₃. Для каждой молекулы проведены расчеты в трех приближениях, учитывающих вклады от а) всех диаграмм, б) диаграмм типа частица+частица — дырка+дырка, в) диаграмм типа дырка+частица — частица+дырка. При расчете использовался базис сгруппированных гауссовых орбиталей s- и p-типов. Найдено, что все три диагональных варианта РПСФ дают результаты, практически совпадающие между собой и с результатами, полученными в обычном приближении случайных фаз.

В. Б. Павлов-Верезкин

расчет
молекулы

(+3) ☒

х. 1978, N 24

BX 883

1978

7,6 LiH (a.n., 7d-coupling)

Caldow G.L., Duxbury G., Evans L.A.

J. Mol. Spectrosc. 1978, 69(2), 239-53

Laser Stark saturation spectroscopy of the ν_2 band of methyl-d₃ iodide.

CA. 1978, 28, N16, 112742S

10



LiH

11 Д151. Молекулярная модель орбиталей связи. 1948
Метод модельного потенциала. Gáspár R., Gáspár R., Jr. Bond orbital model of molecules the model potential approach. Acta phys. Acad. sci. hung., 1978, 45, № 1, 27—36 (англ.)

Предложен вариант метода псевдопотенциала, в котором радиальные компоненты потенциала, создаваемого остовом, аппроксимируются линейной комбинацией гауссовых ф-ций

$$V_l(r) = \sum_i A_i^l \exp(-\alpha_i^l r^2).$$

Параметры A_i^l и α_i^l подбираются таким образом, чтобы правильно воспроизвести энергию основного и первого возбужденного состояний электрона с орбитальным квантовым числом l вне остова. Конкретные расчеты произведены для молекул Li_2 и LiH в рамках метода плавающих сферических гауссовых ф-ций. Получены следующие результаты (в ат. ед.) (в скобках — эксперим. значения): для Li_2 $R_e=4,596$ (5,050), $D_e=0,0481$ (0,0406); для LiH $R_e=2,303$ (3,101), дипольный момент $\mu=4,624$ (5,882). Худшие результаты для LiH , по-видимому, обусловлены заметной асимметрией этой системы.

О. С.

М. Н.

☒

Ф. 1949, № 11

LiH

1978

11 Б9. Исследования отрицательных ионов полярных молекул LiH^- , NaH^- , NaCl^- . Jordan K. D., Wendoloski J. J. Studies of the negative ions of polar molecules LiH^- , NaH^- , NaCl^- . «Mol. Phys.», 1978, 35, № 1, 223—240 (англ.)

Методом Хартри — Фока рассчитаны энергии, дипольные моменты и распределения электронной плотности основных состояний полярных молекул LiH , NaH , NaCl и их отриц. ионов. Показано, что можно добиться правильного предсказания стабильности отриц. ионов даже на уровне приближения Купманса при включении в базис гауссовых функций диффузных s - и p -орбиталей слейтеровского типа, центрированных на электроположит. атоме. При подобных расчетах оказывается полезным «вариационный» принцип для орбитальной энергии низшей вакантной орбитали нейтр. молекулы: оптимальным является то значение показателя экспоненты для диффузных слейтеровских орбиталей, при котором сродство к электрону максимально. При этом варьирование диффузных функций

основн.
сост.
молекулы

X. 1978
N 11

практически не меняет значения полной энергии и дипольного момента. Вместо включения в базис диффузных слейтеровских орбиталей с показателями экспонент около 0,3, можно добиться нужного результата также за счет добавления в базис одной гауссовой орбитали типа $1s$ с показателем экспоненты порядка 0,009, центрированной на межъядерной оси на нек-ром расстоянии за электроположительным атомом. Отмечено, что при использовании обоих вариантов базисных наборов существенно меняется распределение электронной плотности в области молекулы за электроположительным атомом по сравнению с обычным вариантом, когда диффузные функции не учитываются. Найдено, что кривые сродства к электрону в зависимости от межъядерного расстояния, полученные как разности хартри-фоковских энергий молекулы и аниона и на основе теоремы Купманса, достаточно близки. Установлены линейные корреляц. соотношения между дипольным моментом молекулы и энергией низшей вакантной орбитали. Предсказано существование стабильного аниона NaCl^- со значением сродства к электрону 0,65 эв.

А. В. Немухин

BX-1064

1978

LiH^- , NaH^- , CsH^- (Ks. Mex. pacific)
 LiH , NaH , CsH (Ac)

Karo A.M., Gardner M.A., Hiskes J.R.
J. Chem. Phys. 1978, 68(4), 1942-50.

Ab initio MC-SCF ground-state
potential energy curves
for LiH^- , NaH^- ...

C.A. 1978, 28; N22, 1586-1844

W.M. 13434
W.M. 0080

10 (4)

LiH Kurtz H.A., Öhrn L.

1978

J. Chem. Phys., 1978, 69, n3,
1162-1167.

расчет энергии
связи электро-
нов

(см. Ne) III

LiH

ommc 6825

1978

(A.P.)

90: 92858v Ab initio study of the positron affinity of lithium hydride. Kurtz, Henry A.; Jordan, Kenneth D. (Mason Lab., Yale Univ., New Haven, Conn.). *J. Phys. B* 1978: 11(16), L479-L482 (Eng). The binding of a positron to LiH to give a stable [LiH; positron] complex is examd. by using ab initio calcs. within LCAO MO SCF framework. The results are compared with those for LiH and in both cases the charge d. of the extra particle is dominated by the dipole field of the neutral mol. The positron and electron affinities vary approx. linearly with the dipole moment which in turn varies nearly linearly with the Li-H bond length.

C. A. 1979. 20 N 12

LiH

Оттиск 6825

Оттиск 6897

1978

2 Д124. Неэмпирическое изучение сродства к позитрону в молекуле LiH. Kurtz Henry A., Jordan Kenneth D. Ab initio study of the positron affinity of LiH. «J. Phys.», 1978, B11, № 16, L479—L482 (англ.)

В рамках метода ЛКАО-МО-ССП Хартри-Фока показано, что молекула LiH может образовывать устойчивый комплекс $[LiH, e^+]$ с позитроном e^+ . Для лучшего описания связывания позитрона в молекуле базисный набор $[5s/2p]$ для Li и $[2s]$ для H был дополнен 4 диффузными s -ф-циями с экспонентами от 0,06 до 0,002 и двумя p -ф-циями со значениями экспонент 0,05 и 0,01. Величина сродства к позитрону оказалась равной 0,13, 0,16 эв (первая цифра получена по теореме Купманса, а вторая — как разность хартри-фоковских энергий молекулы LiH и комплекса $[LiH, e^+]$ при равновесном межъядерном расстоянии 3,015 ат. ед. При варьировании межъядерного расстояния установлено, что дипольный момент и сродство к позитрону связаны почти линейной зависимостью.

А. Обухов

расчет
Ан^т

Р. 1979.2

Оттиски 6897 1978

LiH

4 Б16. Неэмпирическое изучение сродства к позитрону молекулы LiH. Kurtz Henry A., Jordan Kenneth D. Ab initio study of the positron affinity of LiH. «J. Phys.», 1978, B11, № 16, L479—L482 (англ.)

сродство
к позитрону

При расчетах в рамках метода МО ЛКАО найдено, что молекула LiH может присоединить позитрон с образованием устойчивого комплекса. Вычисленная энергия связи позитрона (ЭСП) сравнима по величине с энергией связи электрона. Показано, что ЭСП почти линейно возрастает с увеличением дипольного момента и длины связи молекулы LiH. Найдено, что электронная корреляция лишь слабо влияет на величину ЭСП. Обсуждена возможность распада комплекса молекулы LiH с позитроном в колебательно возбужденных состояниях.
В. Б. Павлов-Веревкин.

Х. 1949, №4

hill, BH, BH⁺, OH (pactum c.n., E) 1978

Klein L., Tino J. BX-1612

Int. Phys., 1978, 52, 16, 1777-1783 (amer.)

Spin - extended Hartree-Fock ab
initio calculations for small ra-
dicals.

Proc. Amer., 1978, 24 588 W (P)

LiH.
LiD.

M. N.

1078
89: 188415d A $1\Sigma^+ \rightarrow X\ 1\Sigma^+$ bands of the isotopic lithium hydrides. Li, K. C.; Stwalley, W. C. (Dep. Chem., Univ. Iowa, Iowa City, Iowa). Report 1977, COO-2326-28, 52 pp. (Eng). Avail. INIS; NTIS. From *INIS Atomindex* 1978, 9(15), Abstr. No. 387294. To obtain a better understanding of the $X\ 1\Sigma^+$ ground state and the $A\ 1\Sigma^+$ state potential energy curves of LiH and to examine in detail the concept of mass-reduced quantum nos. for both an ordinary ($X\ 1\Sigma^+$) and an anomalous ($A\ 1\Sigma^+$) electronic state, the emission spectra of the $A\ 1\Sigma^+ \rightarrow X\ 1\Sigma^+$ bands of the isotopic Li hydrides and deuterides were photographed at 3000-5000 Å with a 3.4 m Ebert Spectrograph. The bands found involved $v'' = 0-7$ to various $v' = 0-17$ for ${}^6\text{LiH}$ and $v'' = 0-7$ to various $v' = 1-16$ for ${}^6\text{LiD}$. Addnl. bands involving $v'' = 4$ and 5 were also found for ${}^7\text{LiH}$. The vibrational-rotational spectroscopic anal. of ${}^7\text{LiH}$, ${}^6\text{LiH}$, and ${}^6\text{LiD}$ are reported here, as are the reanalyses of the ${}^7\text{LiH}$ and ${}^7\text{LiD}$ data reported by Crawford and Jorgensen. New Rydberg-Klein-Rees (RKR) $A\ 1\Sigma^+$ and $X\ 1\Sigma^+$ potential curves were constructed for each individual mol. and are reported, but detailed isotopic comparisons will be reported in subsequent publications.

C.A., 1978, 89, N22

LiH

om muck 6060/BP-1356 1978

88:1127431 The $A\ ^1\Sigma^+ \rightarrow X\ ^1\Sigma^+$ bands of the isotopic lithium hydrides. Li, Kwong C.; Stwalley, William C. (Dep. Chem., Univ. Iowa, Iowa City, Iowa). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 69(2), 294-318 (Eng). To obtain a better understanding of the $X\ ^1\Sigma^+$ ground state and the $A\ ^1\Sigma^+$ state potential energy curves of LiH and to examine in detail the concept of mass-reduced quantum nos. for both an ordinary ($T\ ^1\Sigma^+$) and an anomalous ($A\ ^1\Sigma^+$) electronic state, the emission spectra of the $A\ ^1\Sigma^+ \rightarrow X\ ^1\Sigma^+$ bands of the isotopic Li hydrides and deuterides were photographed at 3000-5000 Å with a 3.4-m Ebert Spectrograph. The bands found involved $v'' = 0$ to 7 to various $v' = 0$ to 17 for ^6LiH , and $v'' = 0$ to 7 to various $v' = 1$ to 16 for ^7LiH . Addnl. bands involving $v'' = 4$ and 5 were also found for ^7LiH . The vibrational-rotational spectroscopic anal. of ^7LiH , ^6LiH , and ^6LiD are reported, as are the reanalyses of the ^7LiD data reported by F. H. Crawford and T. Jorgensen, (1935); new Rydberg-Klein-Rees $A\ ^1\Sigma^+$ and $X\ ^1\Sigma^+$ potential curves were constructed for each individual mol. and are reported.

M. H.

21: cncrop

C.A. 1978, 88, 116 om. N 8 (6 name) BPV 1356 Stwalley

LiH

оттиск 6060

1978

17 Б161. Полосы $A^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ изотопных гидридов:
лития. Li Kwong C., Stwalley William C.
The $A^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ bands of the isotopic lithium hydrides.
«J. Mol. Spectrosc.», 1978, 69, № 2, 294—318 (англ.)

М. П.

оттиск на обложке

оттиск N8

● (в папке оттисков
Stwalley)

№ 1978, N14

12
-1356

В99

В области 3000—5000 Å получены спектры испускания ${}^6\text{LiH}$, ${}^7\text{LiH}$ и ${}^6\text{LiD}$ (теор. разрешение $0,07 \text{ см}^{-1}$). Для возбуждения спектров использован полый катод. На основании проведенного анализа наблюдаемая система полос отнесена к переходу $A^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ и определены молек. постоянные (B_v , D_v и H_v) для состояний $v''=0-7$ и $v'=0-17$ (${}^6\text{LiH}$); $v''=0-7$, $v'=1-16$ (${}^6\text{LiD}$) и $v''=4-5$ (${}^7\text{LiH}$). С помощью полученных постоянных построены потенциальные кривые основного и возбужденного состояний и обсуждаются аномалии в ходе зависимости B_v в состоянии $A^1\Sigma^+$.

Л. В. Серебrenников

LiH

оттиска 6060

1978

1) 8 Д408. Полосы $A^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ изотопических гидридов лития. Li Kwong C., Stwalley William C. The $A^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ bands of the isotopic lithium hydrides. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 69, № 2, 294—318 (англ.)

Спектры испускания изотопич. гидридов лития сфотографированы в области 3000—50 000 Å с помощью 3,4-метрового спектрографа Эберта. В спектрах идентифицированы следующие полосы системы $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$: $v''=0 \div 7$, $v'=0 \div 17$ для ^6LiH , $v''=0 \div 7$, $v'=1 \div 10$ для ^6LiD и некоторые полосы с $v''=4,5$ для ^7LiH . Выполнен колебательно-вращательный анализ спектров. Пересмотрены некоторые ранее опубликованные результаты. Для всех исследованных молекул построены потенциальные кривые РКР состояний $A^1\Sigma^+$ и $X^1\Sigma^+$. Библ. 28.

М.И.

от. №8

(в напке оттисков Stwalley)

оп. 1978, №8

LiH

1978

1 Б38. Полустрогие оценки дипольных моментов и моментов переходов для молекулы LiH. Langhoff Stephen R., Chong Delano P. Semirigorous bounds for the dipole moments and transition moments of the LiH molecule. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 1, 194—199 (англ.)

оценки

μ

1 ор
вне

2.1979, N1

Для молекулы LiH выполнены расчеты по ф-лам Вейнхольда (см. «Adv. Quantum Chem.», 1972, 6, 299) верхних и нижних границ дипольных моментов и моментов перехода. Оценки снизу и сверху для интеграла перекрывания между неизвестной точной и приближенной волновыми функциями, к-рые необходимы при использовании ф-л Вейнхольда, построены по методу Чонга (см. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 39, 531). Приближенные волновые функции для ряда электронных состояний LiH найдены по методу конфигурац. взаимодействия с использованием базиса слейтеровских функций при равновесном межъядерном расстоянии основного состояния. Получены след. приближенные двухсторонние оценки: для дипольных моментов $\mu(X^1\Sigma^+) = -5,836 \pm 0,262 D$, $\mu(A'\Sigma^+) = -5,078, \pm 0,344 D$; и для моментов переходов (в атомных единицах) $W(X'\Sigma^+ - A'\Sigma^+) = 0,94 (+0,13, -0,18)$, $W(X'\Sigma^+ - B'\Pi) = 1,29 \pm 0,23$, $W(A'\Sigma^+ - B'\Pi) = 1,82 \pm 0,24$.

В. А. Истомин

LiH

1 Д158. Полустрогие границы для дипольных моментов и моментов переходов в молекуле LiH. Langhoff Stephen R., Chong Delano P. Semirigorous bounds for the dipole moments and transition moments of the LiH molecule. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 1, 194—199 (англ.)

Оценка пределов погрешностей вычисления молекулярных свойств, основанная на полустрогом выражении Чонга для нижней границы интеграла перекрывания между приближенной и точной волн. ф-циями, распространена на случай, когда волн. ф-ция нулевого порядка содержит несколько ф-ций ССП. С помощью ф-лы Вейнхольда, модифицированной с целью включения переходов между состояниями с одинаковой симметрией, вычислены полустрогие границы для дипольных моментов и моментов переходов молекулы LiH. Все вычисления проведены для $R=3,015$ ат. ед. в двух базах ф-ций слэтеровского типа: $16\sigma 9\pi 6\delta$ и $22\sigma 12\pi 7\delta$. С наиболее точной волн. ф-цией, найденной методом конфигурации взаимодействия, получены следующие

границы
м

ф. 1949, 11

результаты: $\mu(X^1\Sigma^+) = 5,836 \pm 0,262$; $\mu(A^1\Sigma^+) = -5,078 \pm 0,344$ ед. Дебая; $\omega(X^1\Sigma^+ - A^1\Sigma^+) = 0,94 (+0,13 - 0,18)$; $\omega(X^1\Sigma^+ - B^1\Pi) = 1,29 \pm 0,23$; $\omega(A^1\Sigma^+ - B^1\Pi) = 1,82 \pm 0,24$ ат. ед. Сделан вывод о том, что для получения надежных результатов этим методом необходимо использовать приближенную волн. ф-цию высокого качества, содержащую большую часть энергии корреляции.

А. Чесный

Litt Commen 8317 | 1978

Mohammed Noot S.

Indian J Pure and Appl.

Phys., 1978, 16, 752-760

on the Generalization of
the Linnett ● Potential

(номер 7443)
LiH Polezzos, et al 1978

Кб. экз.
раскр.) Мол. Phys., 1978, 36/6,
1835-43.

● (C₆₀H₂; III)

LiH

1978

3 Б155. Расчет квадратичных-квартичных силовых постоянных двухатомных молекул методом ab initio с дифференцированной оценкой интегралов. Перевозчиков В. И., Грибов Л. А. «Оптика и спектроскопия», 1978, 45, № 2, 401—402

Представлены результаты расчета квадратич. (k_2), кубич. (k_3) и квартич. (k_4) силовых коэф. двухатомных молекул LiH, H₂⁺, FH, BH, H₂, NH и CH⁺, полученных ранее разработанным приближенным методом (Грибов Л. А. и др.; ДАН СССР, 1975, 221, 104) в однопредельном приближении в миним. слейтеровском базисе. Результаты сравнены с известными данными точного расчета ab initio и с эксперим. значениями для тех же самых молекул; расчетные результаты обоих методов находятся в удовлетворительном согласии.

Б. В. Рассадин

СССР.

МВСТ.

(+6)



2-1079, N3

LiH

1978

90: 63697m Use of an approximation of the potential curve of the Morse function in quantum calculations of force constants of diatomic molecules. Perevozchikov, V. I.; Gribov, L. A. (USSR). *Zh. Prikl. Spektrosk.* 1978, 29(5), 927-8 (Russ). Force consts. of diat. mols., calcd. by the approxn. of the potential curve of the Morse function, are in agreement with force consts. from ab initio calens. Force consts. were calcd. for LiH, FH, BH, H₂, NH, F₂, CH⁺.

CUA, root.

(+6) ☒

C.A. 134999N8

LiH

1978

Энергии
основного
состояния

~~1~~

12 Б19. Парно-корреляционная модель электронной структуры в рамках метода обобщенных валентных схем. V. Приближение многоконфигурационного перекрывания для парных энергий ОВС. Petersson G. A., Nyden M. R., Chupka J. T., Ryan P. B., Todd H. D. The pairwise-correlated generalized valence bond model of electronic structure. V. A multiconfiguration overlap approximation for GVB pair Energies. «Int. J. Quantum Chem.», 1978, Quantum Biol. Symp. № 12, 201—218 (англ.)

Предложено развитие теории многоэлектронных систем, согласно к-рой полная энергия представляется в виде суммы энергии, подсчитанной в приближении обобщенных валентных схем (ОВС), и парно-корреляц. поправок (пред. сообщ. см. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, 2015). Выведены приближенные аналитич. ф-лы для парно-корреляц. энергий в предположении, что многоэлектронные волновые функции включают возбужденные

х. 1979, N 12

конфигурации по отношению к функциям ОВС. В этом случае результаты должны быть эквивалентны результатам многоконфигурац. метода самосогласованного поля. Вывод ф-л основан на представлении парно-корреляц. энергий во втором порядке теории возмущений, разделении полученного выражения на триплетную и обменную составляющие и упрощении обменного вклада. В кач-ве примеров рассмотрены энергии основных состояний молекул H_2 и LiH . Показано, что учет трех низших возбуждений волновых функций ОВС позволяет получать полную энергию молекул с погрешностью порядка 0,001 ат. ед. для всей области межъядерных расстояний, включая область ван-дер-ваальсова взаимодействия.

А. В. Немухин

LiH

ammuck 6611

1978

89: 65650u Use of atomic Fues potential within the floating spherical gaussian orbital method: study of some two-valence-electron diatomics and triatomic ions. Ray, N. K.; Mehandru, S. P. (Dep. Chem., Univ. Delhi, Delhi, India). *Pramana* 1978, 10(2), 201-6 (Eng). The bond lengths (R_e), force consts. (k), and electron populations of LiH, NaH, KH, RbH, CsH, MgH^+ , CaH^+ , NaLi, KLi, KNa, RbLi, CsLi, RbNa, and CsNa, the R_e and k values for M_2 ($M = Li, Na, K, Rb, Cs$), and the mol. structures H_2Li^+ , H_2Na^+ , Li_2Na^+ , Na_2Li^+ , Li_3^+ , Na_3^+ , Li_2H^+ , and Na_2H^+ were calcd. within the FSGO formalism by using model at. potentials of the type given by E. Fues (1926). Good agreement was obtained with the available exptl. data and other existing theor. calcs.

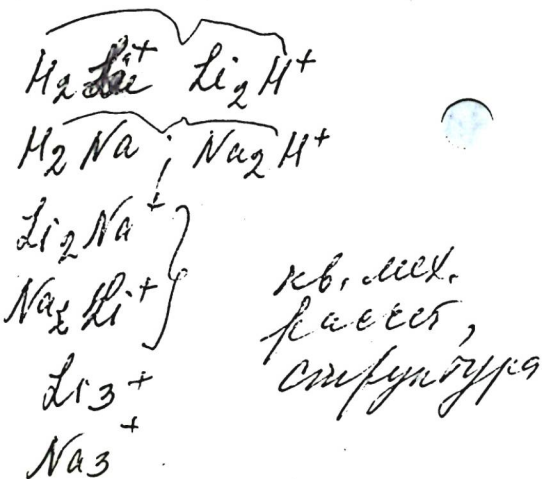
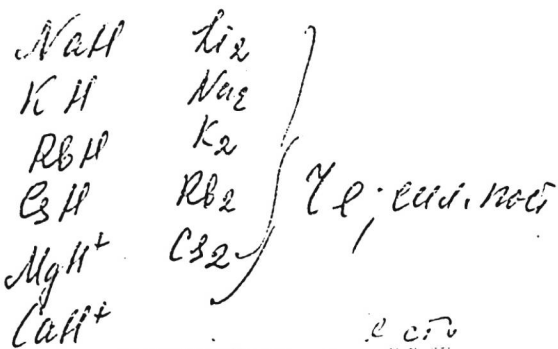
Ур; сив. ност

(417)
121

сив. на одароме



C.A. 1978, 29, NP



Ro, chim. (LiH^- , BeH^- , BH^- , NaH^- , MgH^- , 1978

AlH^-)
 Ae^- (LiH , BeH , BH , CH , NH , OH , NaH , MgH , AlH , SiH , PH , SH) $\text{BX}-1774$

Rozmus P., Meyer W.

J. Chem. Phys., 1978, 69, NC, 2745 -
-2757 (atm.)

PNO-CE and CEPA studies of electron correlation effects. VI. Electron affinities of the first-row and second.

J. Chem. Phys., 1979, 52 149 | 10, 11 (9)

row diatomic hydrides and the
spectroscopic constants of their
negative ions.

Life

[Ом. 17518]

1978

Степанов Н.Ф., Сивкин В.Я.
и др.,

расчет
мультимедийных
моделей

Вестник Моск. ун-та,
Сер. химия, 1978, 19, №4,

484 ● —5.

LiH

1978

8 Д142.) Молекулы с большими межатомными расстояниями. Stwalley William C. Long-range molecules. «Contemp. Phys.», 1978, 19, № 1, 65—80 (англ.)

Рассматриваются свойства молекул, находящихся в высших возбужденных колебательных состояниях, для которых взаимодействие между атомами сводится к дальнедействующим дисперсионным силам, а обычная химич. связь уже практически разорвана. Преимущественно обсуждаются двухатомные молекулы в основном и возбужденных электронных состояниях (например LiH состояния $X^1\Sigma^+$ и $A^1\Sigma^+$). При больших квантовых числах v колебательная волн. ф-ция системы имеет не-

Структ.
колебат.
уровней



сп. 1978, N 8

обычный вид с широким главным максимумом вблизи внешней точки поворота, благодаря чему система обладает очень малой кинетич. энергией. Обсуждается структура колебательных уровней вблизи порога диссоциации. Если в разложении потенц. энергии ограничиться одним членом, $V(R) = -C_n R^{-n}$, то энергия связи колебательного состояния зависит от v как $\epsilon(v) = a_n^\infty \cdot (v_D - v)^{2n/(n-2)}$, где v_D — эффективно квантовое число, соответствующее $\epsilon(v_D) = 0$; аналогичным образом остальные наблюдаемые величины также могут быть представлены как ф-ции $(v_D - v)$. Расстояния между самыми верхними уровнями настолько малы, что они заметно перекрываются, образуя континуум ниже области неперывного спектра. Рассматриваются различные типы переходов (излучательные, безизлучательные, индуцированные столкновениями) для молекул с большими межатомными расстояниями.

В. И. Барановский

CsH, LiH (Do) BX-1442 1978

Swalley William C., Yang Sze-Cheng,
Hsieh Yin-Kang, Orth Frederick B.,
Li Kwong C.

J. Chem. Phys., 1978, 69, N4, 1791-1792 (4pp.)
The dissociation energy of CsH.

RH Xuon., 1979

55815



HO, M (P)

LiH

Спиновые
плотности

1978
Б24. Спиновые плотности в LiH^+ . Tortorella,
James J., Harriman John E. Spin densities in
 LiH^+ . «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 7, 3163—3169.
(англ.)

С помощью спин-поляризованного метода ССП и полного метода конфигурац. взаимодействия проведен расчет электронных энергий и распределения спиновой плотности для молекулы LiH^+ . Для расчета $^2\Sigma$ - и $^2\Pi$ -состояний использовались базисы слейтеровских функций, центрированных на ядрах, к которым добавлялись дополнительные компактные функции, локализованные вблизи ядер, для правильного описания спиновой плотности в окрестности ядер. Для основного $^2\Sigma$ -состояния рассчитаны спектроскопич. постоянные R_e , D_e , дипольный момент, а также положения всех шести связанных колебательных уровней. Получены значения спиновой плотности на ядрах, а также ее распределение в пространстве. Найдено, что спиновые плотности на ядрах чувствительны к добавлению к базисному набору компактных доп. функций вблизи ядер, хотя последние не оказывают заметного влияния на энергию.

Б. И. Жилинский

2-1978/19

Litt ommea 6409 1978.

Fenne W. T.
et al.

nomus.
Kpubel.

finn

J. Chem. Phys;
1978, 68 (10) 4619-4624

Lill

omman 6410

1978

Fennel W.T.
et al.

frequency.

from

J. Chem. Phys., 1978,
68 (40), 4628-4630



Lill [ommu 6514a] 1978.

Zemke W.T.; et al.

Krubee
nomencl.
tree mu,
Ei, fmn J. Chem. Phys., 1978,
69 (1), 402-408.

Radiative ● transition
probabilities for...