

G.H.†

LiH^+

(D_e)

Д 7 Д73. Энергия связи LiH^+ и потенциал ионизации LiH : расчет с использованием смешанного базиса. Brown J. C. Binding energy of LiH^+ and the ionization potential of LiH : mixed basis set calculation. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 11, 3495—3498 (англ.)

С помощью неэмпирич. квантовомеханич. расчета с использованием обобщенной волн. ф-ции метода валентных связей получена точная нижняя граница (0,038 эв) для энергии связи D_e молекулы LiH^+ . Возможная ошибка при вычислении полной энергии оценивается в $\sim 0,1$ эв; т. обр., $0,038 < D_e(\text{LiH}^+) < 0,15$ эв. Значение энергии связи, полученное усреднением результатов, найденных с различными волн. ф-циями, составляет $0,104 \pm 0,016$ эв. Подчеркивается, что полученный результат находится в противоречии с данными более раннего расчета по методу самосогласованного поля в приближении МО ЛКАО, который предсказывал значительный минимум в потенц. кривой. Верхняя граница потенциала ионизации LiH оценена в 7,91 эв. Вероятная нижняя граница оценена в 7,8 эв. Потенц. кривая системы $\text{Li} + \text{H}^+$ табулирована для расстояний 2—10 ат. ед. В. Быховский

ф. 1965. 78



Li^+H^+

Bop-3186-IX

1966

Yenc' F

(u.n)

J. Mol. Spectrosc.

1966, 19 (1), 63-72

1969

Li H⁺

20 Б24. Электронное строение молекулярного иона-гидрида лития. L i n C. S. Electronic structure of the lithium hydride molecule ion. «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 7, 2787—2793 (англ.)

Расчет молекулярного иона гидрида лития обобщенным методом валентных связей приводит к значению полной энергии $E = -7,758855$ а. е. при $R = 3,736$ а. е. Обсуждается возможный характер кривой потенциальной энергии в диапазоне 3,60—4,25 а. е. На основании поведения этой кривой дано объяснение того, что этот ион экспериментально не обнаружен, а также предлагается возможный метод его создания. Проведено сравнение распределения электронной плотности молекулярного иона и молекулы гидрида лития.

Резюме

X. 1969. 20

1969

LiH

118244f Electronic structure of the lithium hydride molecule ion. Lin, C. S. (Indiana Univ., Bloomington, Indiana). *J. Chem. Phys.* 1969, 50(7), 2787-93 (Eng). A generalized valence-bond calculation of the LiH mol. ion gave the total energy $-7.75-8855$ a.u. at $R = 3.736$ a.u. Possible behavior of the potential-energy curve in the region $3.60-4.25$ a.u. is discussed. Based on its behavior, the reason this mol. ion has not been exptl. established is explained and a possible method of producing it is suggested. Electron-d. distribution and planar-d. distribution are calcd. and analyzed in comparison with the LiH mol.

RCJQ

ub. seen.
pacretu

CIA. 1969, 70. 26

LiH +

1969

2 Д133. Анализ натуральных спин-орбиталей трех-электронной системы. Молекулярный ион гидрида лития. Lin C. S. Analysis of the natural spin orbitals of the three-electron system: lithium hydride molecule ion. «Theoret. chim. acta», 1969, 15, № 1, 73—85 (англ.; рез. нем., франц.)

С помощью 60-детерминантной волн. ф-ции обобщенного метода валентных схем, рассчитаны натуральные спин-орбитали для LiH^+ , приводящие к полной энергии —7,758855 ат. ед. при межъядерном расстоянии 3,736 ат. ед. С использованием орбиталей, соответствующих трем высшим числам заполнения, проанализировано электронное строение системы и изучена роль фермиевской и кулоновской корреляций. Приведены распределения электронной плотности вдоль оси молекулы и рассчитаны некоторые одноэлектронные свойства слабо занятых орбиталей.

кв.-мех.
расчет

ф. 1970. 22

D₀ (paves LiH^+ , NH_2^+ , H_2) 1970

Lester W. A., 14871 13 10
"

J. Chem. Phys, 1970, 53, 24, 1511-1515
(aur)

Interaction potential between
 Li^+ and H_2 . I Region appropriate
for rotational excitation.

Aug 1970, 10344

W. W

2 Хатомное мол. - (энергии
кусы и ионы (диссоциации) 1-106. 1971
LiH⁺ Ferreira R. A - 1866
J. Chem. Phys., 1971, 75, N19, 3012-3014 (and.)

Bonding properties of diatomic
molecular orbitals.

25
10

ВХХИ, 1972, 4512 (см. оригинал)

H_2^+ , Li_2^+ , LiH^+ (кв. мех. расчёт) 1972

Chm. S. V., ~~X~~ 7130

Theor. Chim. Acta, 1972, 25, N2, 200-4
(atm.)

SCF calculations for H_2^+ , Li_2^+ ,
and LiH^+ with atomic basis
set enlarged by bond function.

10

3



CA, 1972, 76, N24, 144924W

21225.7217
Ch, Ph

BP 7595-X

LiH+40852

1972

K p. N 21225.7216

Schwartz Maurice E., Switalski Jurgen D.
Valence electron studies with gaussian-
based model potentials and Gaussian basis
functions. II. Discussion of the one-
valence-electron molecular theory and
applications to Li_2^+ , Na_2^+ , and LiH^+ .

"J. Chem. Phys.", 1972, 57, N 10, 4132-4136

(англ.) 0778 3312

758 765

(см. Li_2 ; IV)

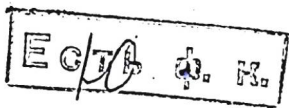
ВИНИТИ

1973

X-8034

LiH, LiH⁺, He₂, He₂⁺ (Ei, Do, parerun
u. u.)

Browne J.C., Matsen F.A.,
Advances in Chem. Phys. Vol. 23, New York
1973, 161-188



40507.4638

MGU, Ph, Te

38240

LiH^+

01

1973

2106

Cade Paul E., Huo Winifred. Hartree-Fock-
-roothaan wavefunctions for diatomic mo-
lecules. I. First- and second-row hydri-
des AH , AH^+ , and AH^- . "Atom. Data and
Nucl. Data Tables", 1973, 12, N 5, 415-466
(англ.)

0 107 552 1

083 084

ВИНИТИ

H_2^+ , HeH^{2+} , H_3 , HeH , He_2^+ , $\overline{X}8513$ 1974
 LiH^+ , $(HeH_2)^+$, H_4^+ (кб. мех. расет,
 τ_e, ϕ_0)

Blustin P. H., Linnet J. W., Part
J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2,
1974, 70(2), 327-38.

Applications of a simple molecu-
lar wave function. 5. Floating

7 лет с.к (м. на обложке)
C.A. 1974 20.12.15045-21 10 (Ф)

HeH, LiH⁺, He₂⁺, LiH, He₂ 1975
(кв. мех. пакет). X-9526

Aubert M., Bessis N., Bessis G.,
Phys. Rev. A, 1975, 12 (6),
2298-311.

Prolate-spheroidal orbitals
for homonuclear and...

C.A. 1976. 24 v6 35587h. 10 

HeH, LiH⁺ (кв. мех. паерм) 1975

Amos R.D., Doggett G., I-2565

Mol. Phys., 1975, 29 (4), 1117-24.

Spin-coupled wave functions.

I. Three-electron doublet states.

C.A. 1975, 83N4, 34887u.

10

5
⊕

1975

LiH⁺
LiH

расчет
молекулы

(45)

x 1976
N11

11 Б36. Сравнение методов лоджий и вириального разделения молекулярных зарядовых распределений. Bader R. F. W. Comparison of loge and virial methods of partitioning molecular charge distributions. «Localizat. and Delocalizat. Quantum Chem. Vol. 1». Dordrecht—Boston, 1975, 15—38. Discuss., 39 (англ.)
Для молекул $\text{LiH}^+(\text{X}^2\Sigma^+)$, $\text{LiH}(\text{X}^1\Sigma^+)$, $\text{BeH}^+(\text{X}^1\Sigma^+)$, $\text{BeH}(\text{X}^2\Sigma^+ \text{ и } \text{A}^2\Pi)$, $\text{BH}(\text{X}^1\Sigma^+)$ и $\text{BeH}_2(\text{X}^1\Sigma_g^+)$ проведено сравнение характера и степени локализации электронной плотности в молекулярных фрагментах, определенных с помощью методов лоджий и вириального разделения зарядовых распределений. В случае LiH^+ и LiH , для к-рых наблюдается глубокий минимум электронной плотности между фрагментами, вириальные фрагменты (ВФ) являются и наилучшими лоджиями, содержащими пары электронов (основную и связывающую, в случае LiH^+ — один связывающий электрон). Найдено, что поверхности нулевого потока $\Delta\rho(r)$, выделяющие ВФ, минимизируют также функцию потери информации $I(P_n, \Omega)$, где $P_n(\Omega)$ — вероятность нахождения n электронов в области Ω , и флуктуацию от средней заселенности фрагментов, $\lambda(\bar{N}, \Omega)$. Для основ-

12

ного состояния BeH , BH , и BeH_2 ВФ являются также достаточно хорошим приближением к лоджиям, содержащим пары электронов. Выделение остовных пар, не имеющее места в методе виртуального разделения, осуществлено для ВФ этих молекул с помощью минимизации $I(P_n, \Omega)$. Для $\text{BeH}^+(X^1\Sigma^+)$ и $\text{BeH}(A^2\Pi_r)$ ВФ значительно отличаются от наилучших лоджий, причем лоджия связывающей пары охватывает и атом Be. В случае $\text{BeH}(A^2\Pi_r)$ минимизацией $I(P_n, \Omega)$ удастся выделить только лоджию, содержащую 3 валентных электрона, разделение (2, 1) не отвечает минимуму этой функции. На примере BH продемонстрировано, что $\lambda(\bar{N}, \Omega)$ достигает минимума в тех же границах Ω , к-рые минимизируют $I(P_n, \Omega)$, и может быть использована для более простого выделения наилучших лоджий. Показано также, что $\lambda(\bar{N}, \Omega)$ может служить мерой корреляции движения электронов внутри Ω и их свободы от корреляционных взаимодействий с электронами, находящимися вне Ω , т. е. в выделенных с помощью $\lambda(\bar{N}, \Omega)$ фрагментах величина корреляционной дырки максимальна, а корреляция с электронами остальных частей минимальна.

А. Клягина

X-9157

1975

$\text{LiD}, \text{Li}_2, \text{LiD}^+ (\text{T}, \text{D}^0)$

Ihle H.R., W4 C.H.

J. Chem. Phys., 1975, 63, N4, 1605-1608

(10)

LiH^+ Автореферат КХН 1975

Нелушкин А. В.

Неэмпирические потенциалы.
(ш.н) кривые 2-х атом. молекул
в задачах молек. спектроскопии
и атомного рассеяния. М., 1975

LiH⁺

1976
Bader P. F. W.

Localizat. and Delocaliz.

(paired
electron)

Quant. Chem. vol 1.
Dordrecht - Boston, 1975, 15-38

(all LiH) III

LiH^+

86: 146280p A valence-bond study of dialkalis and alkali hydrides. Boeyens, J. C. A.; Lemmer, R. H. (Dep. Chem.,

Rand Afrikaans Univ., Johannesburg, S. Afr.). *J. S. Afr. Chem. Inst.* 1976, 29(2-3), 120-31 (Eng). The potential-energy curves, equil. bond lengths, and dissoen. energies for LiH^+ , MH , M_2 , M_2^+ , and MM' [$\text{M} = \text{Li, Na, K, Rb, or Cs}$; $\text{M}' = \text{Li, Na, K, Rb, or Cs}$; $\text{M} \neq \text{M}'$] were calcd. by using the classical Heitler-London method; the valence-electron wave functions were constructed by using the impenetrable-core potential model of R. G. Parsons and V. F. Weisskopf (1967). The electron-d. contour maps for Li_2 and LiH were also calcd. The results are compared with exptl. data where available. Although the present calens. are not as reliable as the more rigorous all-electron calens., they correctly predict that the major component of the bonding arises from interactions involving the s-s electron pair.

Rb, Mex.
factor

(Do)

(+20) 

$\text{MH}, \text{M}_2, \text{M}_2^+, \text{MM}'$

C.A. 1972, p. 6 N20

$\text{M} = \text{Li, Na, K, Rb, Cs}$
 $\text{M}' = \text{Li, Na, K, Rb, Cs}$

$\text{M} \neq \text{M}'$

Гидриды щелочных металлов

1976

18 Б27. Изучение методом валентных схем двух-атомных соединений щелочных металлов друг с другом и их гидридов. Boeuys J. C. A., Lemmer R. H. A valence — bond study of dialkalis and alkali hydrides. «J. S. Afr. Chem. Inst.», 1976, 29, № 2—3, 120—131 (англ.; рез. африк.)

До
Кв. шх.
расчет

Модель Парсонса — Вайскофа (ПВ) в сочетании с методом Гайтлера — Лондона (ГЛ) использована для вычисления межъядерных расстояний и энергии диссоциации гидридов щел. металлов, а также нейтр. молекул и положительно заряженных молекул-ионов, образованных атомами щел. металлов друг с другом. Получены электронные интегралы, встречающиеся в методе ГЛ, вычислены методом Монте-Карло. Показано, что модель ПВ полностью объясняет одноэлектронные спектры атомов щел. металлов и приводит в сочетании с методом ГЛ

Л. 1977 № 18

(см. картотеку!)

к межъядерным расстояниям в двухатомных соединениях щел. металлов, хорошо коррелирующим с эксперим. данными, хотя по абс. значениям вычисл. межъядерные расстояния существенно меньше полученных из эксперимента. Энергии диссоциации для молекул щел. металлов плохо согласуются с экспериментом. Метод предсказывает большую стабильность молекул щел. металлов по сравнению с соотв-щими положительно заряженными молек. ионами. Отмечено, что метод не может заменить более точные методы расчета, учитывающие все электроны, однако полученные результаты отчетливо свидетельствуют о том, что основной вклад в энергию связи в изученных молекулах вносит взаимодействие двух внешних s -электронов. В. Б. Павлов-Веревкин



$\text{LiH}^+ + \text{мезон}$

1976

4 Д126. Квантовомеханический расчет потенциальной поверхности мезона в молекулярной системе $(\text{LiH})^+$. Ляст И. Ц., Ладыжинский Б. Я. «Ж. структур. химии», 1976, 17, № 5, 791—796.

Методами квантовой химии в адиабатич. приближении осуществлен расчет большой мезомолекулы $(\text{LiH})^+ + \text{мезон}$. Получены потенц. поверхности движения мезона в поле ядер и электронов для основного и первого возбужденного электронных состояний. В основном состоянии область притяжения к атому Li намного больше, чем к атому H. Вблизи атома H мезон находится в поле, имеющем существенно кулоновский характер, однако с заметно выраженной асимметрией. Вблизи атома Li поле является центрально-симметричным, зависимость поля от расстояния сильно отличается от кулоновского. В работе осуществлены оценки квантовых чисел, при которых становится возможной делокализация мезона в молекуле. Резюме

кв. мех.
расчет

Ф. 1977
N 4

60518.4286

TC, Ph, Ch

30526GR

1976

*LiH⁺ (no. mex.
paste) # 4-12830*

Yardley R.N. Balint-Kurti G.G.

Ab initio valence-bond calculations on
HF, LiH, LiH⁺ and LiF. "Mol. Phys.",
1976, 31, N 3, 921-941 (англ.)

(см. НТ; III)

0623 ЛМК

596 599 6.15

ВИНИТИ

LiH⁺

1976

Зурба В. Б., и др.

лит. риз. сб., 1976, 16, N 2,

251-8.

(кв. мех.
расчет)

(см LiH)

B $\bar{X}$ -577

1977

H₂O, Na, BeO, LiF, LiH, BeH₂,
LiH⁺, Li₂⁺ (Kl. uex. pacem)

Chang T., Habitz P., Schwarz W.H.,

Theor. Chim. Acta 1977, 44(1), 61-76.

Accuracy and
dopotential. limitations of the pseu-
method. 10



10Б90. Фрагментация вследствие β -распада меченых тритием соединений. III. Потенциальные кривые молекул LiH^+ , BeHHe^+ и FHe^+ , получающихся из молекул LiT , BeHT , FT . Ikuta Shigeru, Yoshihara Kenji, Shiokawa Takanobu. Fragmentation by beta-decay in tritium-labelled compounds. III. Potential energy curves of LiHe^+ , BeHHe^+ and FHe^+ resulting from LiT , BeHT and FT . «J. Nucl. Sci. and Technol.», 1977, 14, № 10, 720—722 (англ.) 1977

До, сч. и

(+2) $\boxtimes$

х. 1978, N10

Ограниченным методом Хартри-Фока в базисе орбиталей слейтеровского типа ОСТ-6ГФ с оптимизированным при каждом межядерном расстоянии масштабным множителем рассчитаны потенциальные кривые и энергии диссоциации основных состояний молекул ионов LiHe^+ , BeHHe^+ и FHe^+ . Потенциальные кривые сопоставлены с полученными ранее кривыми основных состояний молекул HHe^+ , CH_3He^+ , NH_2He^+ , OHHe^+ . Найдено, что при β -распаде $\text{T} \rightarrow \text{He}^+$ основные состояния дочерних ионов LiHe^+ и BeHHe^+ являются связанными при равновесном расстоянии исходных молекул LiT и BeHT , в то время как образующийся в результате β -распада ион FHe^+ неустойчив при равновесном расстоянии FT . Пред. сообщ. см. «J. Nucl. Sci. and Technol.», 1977, 14 [9], 661.

В. Б. Павлов-Веревкин

1977

LiH⁺

FH

89: 136076z Comparison between the CNDO/2 and NDDO methods in determining the equilibrium configurations of lithium(1+) and fluoride monohydrates. Kelm, H.; Schwabe, K.; Koehler, H. J.; Mehlhorn, A. (Zentralinst. Kernforsch. Rossendorf, DAW, Rossendorf, E. Ger.). Zentralinst. Kernforsch., Rossendorf Dresden, [Ber.] 1977, ZfK-340, Jahresbericht, 159-61 (Ger). CNDO/2 studies were made and compared with NDDO studies. Ab initio studies are also discussed. The study includes potential curves.

rev. acc.

facets

(+1)



E.A. 1978, 29, N12

LiH, LiH⁺ (paper in press, 1977) BX-905

LiH B., O-Ohata K., Kirby-Rocken K.
J. Chem. Phys., 1977, 67, n5, 1850-
1854 (corr.)

Theoretical study of the anion
of lithium hydride.

PNEPus., 1978, 2294

to (9)

LiH^+

BeH^+

BH^+

CH^+

NH^+

OH^+

FH^+

NeH^+

MgH^+

AlH^+

$\text{Zn}^+, \text{Pn}^+, \text{Sn}^+, \text{HCl}^+ (\alpha, \gamma)$

1977

8 Д149. Исследование эффектов электронной корреляции в приближениях ПНО КВ и СЭП. Ч. IV. Энергии ионизации двухатомных гидридов первого и второго периодов и спектроскопические постоянные их ионов. Rosmus P., Meyer W. PNO-Cl and CEPA studies of electron correlation effects. IV. Ionization energies of the first and second row diatomic hydrides and the spectroscopic constants of their ions. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 1, 13—19 (англ.)

Методами конфигурац. взаимодействия с псевдоестественными орбиталями (ПНО КВ) и связанных электронных пар (СЭП) произведен расчет потенц. кривых и спектроскопич. постоянных положит. ионов двухатомных гидридов атомов первого и второго периодов (от Li до Cl). В расчетах учтено от 80 до 95% корреляционной энергии. Используемые расширенные гауссовы базисы обеспечивают точность расчетов, близкую к хартри-фоковскому пределу. Для LiH^+ и NaH^+ были введены дополнительные поляризующие ф-ции на атоме водорода, позволяющие правильно передать характеристики поляризационных минимумов на оттал-

СБ.Х.1-М

(413)

18

Ф.1977 №8

квивательных потенц. кривых этих ионов. Соответствующие потенц. ямы достаточно глубоки, чтобы обеспечить наличие нескольких связанных колебательных уровней. Наилучшее согласие с экспериментом достигнуто в случае метода СЭП: для R_e , ω_e и $\omega_e x_e$ ошибки не превосходят соответственно 0,003 Å (гидриды первого периода) и 0,005 Å (второй период), 20 см^{-1} и 5 см^{-1} . Табулированы вычисленные значения адиабатич. потенциалов ионизации и сродства к протону. С использованием эксперим. данных по энергиям диссоциации нейтральных гидридов оценены энергии диссоциации D_0 ионов (ожидаемая точность $\pm 0,05$ эв) и адиабатич. энергии ионизации I_a (точность около $\pm 0,1$ эв.) Рекомендованы следующие новые значения (D_0 , I_a) для XH (в эв): Li (0,12; 7,7), N (3,50; 13,5), O (5,00; 13,0), Na (0,12; 6,9), Mg (2,00; 6,9), Al (0,65; 8,4)

P (3,30; 10,2), S (3,7; 10,2). Ч. III см. РЖФиз, 1976.
В. И. Барановский
2D137.

LiH⁺

85-17790

1977

HCl⁺

BH⁺

NH⁺

AlH⁺

PH⁺

успех
(ан, до)

196: 111115] PNO-CI and CEPA studies of electron correlation effects. IV. Ionization energies of the first and second row diatomic hydrides and the spectroscopic constants of their ions. Rosmus, P.; Meyer, W. (Inst. Phys. Chem. III, Johannes Gutenberg-Univ., Mainz, Ger.). *J. Chem. Phys.* 1977, 66(1), 13-19 (Eng). Near-equil. potential curves for the ground states of the diat. hydride ions LiH⁺ to HCl⁺ were calcd. from highly correlated pseudonatural orbital(PNO)-CI and coupled-electron-pair-approxn.(CEPA) wave functions (M. and R., 1975). The spectroscopic consts. derived from the CEPA potential curves agreed with the known empirical values. Several new consts. are given: $r_e = 1.203 \pm 0.001$ Å, $\omega_e = 2539 \pm 20$ cm⁻¹, $\Delta G_{1/2} = 2401 \pm 20$ cm⁻¹ for BH⁺; $\omega_e = 2851 \pm 20$ cm⁻¹ for CH⁺; $r_e = 1.070 \pm 0.001$ Å, $\omega_e = 3059 \pm 20$ cm⁻¹ for NH⁺; $\omega_e = 1695 \pm 20$ cm⁻¹, $\Delta G_{1/2} = 1544 \pm 20$ cm⁻¹ for AlH⁺; $\omega_e = 2376 \pm 20$ cm⁻¹ for PH⁺. The polarization min. of the potential curves of the LiH⁺ and

(45)



C.A. 1977, 86 N16

NaH⁺ ground states were calcd. deep enough to allow for several vibrational levels. The correlation contributions to the proton affinities of the 1st- and 2nd-row atoms were calcd. to range from -0.47 eV (for B) to +0.13 eV (for S) with expected uncertainties of $\sim \pm 0.05$ eV. Combination of the proton affinities with exptl. at. data and dissocn. energies of the neutral hydrides yields dissocn. energies of the ions with uncertainties of $\sim \pm 0.05$ eV, and 1st adiabatic ionization energies with uncertainties of $\sim \pm 0.1$ eV. The corresponding exptl. values show large error bounds in many cases. New values are recommended for the dissocn. energies (D_0) of XH⁺ and the 1st adiabatic ionization energies of XH; resp., in the cases of X being Li(0.12, 7.7), N(3.50, 13.5), O(5.00, 13.0), Na(0.12, 6.9), Mg(2.00, 6.9), Al(0.65, 5.4), P(3.30, 10.2), and S(3.70, 10.2) (all values in eV).

LiH^+
 NaH^+

1978

6 Д211. Изучение 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 ССП исследованы основные состояния анионов ионных двухатомных молекул LiH , NaH , $NaCl$. На примере стабильных анионов LiH^- , NaH^- показано, что для получения положительных значений величины сродства к электрону необходимо выполнение двух условий: 1) набор базисных ф-ций должен правильно описывать дипольный момент нейтральной молекулы, 2) базисный набор должен включать либо диффузные ф-ции, центрированные на электроположительном атоме, либо ф-ции, центрированные в точке, лежащей на продолжении связи со стороны электроположительного атома, т. к. дополнительный электрон

Ac^- стабильно
ионизация

(+1) ☒

ср. 1978, № 6

$NaCl$ ☒

занимает орбиталь, локализованную вблизи электроположительного атома. Расчет LiH , NaH , NaCl , проведенный в таком базисе, показывает, что нижняя занятая МО в случае нейтральной молекулы имеет отрицат. энергию и анион, таким образом, даже в рамках теоремы Купманса находится в связанном состоянии. Предсказано существование стабильного аниона NaCl^- . Величина сродства к электрону для этой молекулы составила 0,65 эв. Обсуждаются возможности дальнейшего исследования отрицат. ионов полярных молекул.

Ю. Г. Абашкин

ВФ-1612-ВХ 1978

24 Б88. Неэмпирические расчеты малых радикалов спин-расширенным методом Хартри—Фока. Klimo Y., Tino J. Spin-extended Hartree—Fock ab initio calculations for small radicals. «Mol. Phys.», 1978, 35, № 6, 1777—1783 (англ.)

Ограниченным методом ССП, а также спин-расширенным и спин-спроектированным методами ССП, проведены расчеты молекул LiH⁺, BeH, BH⁺, OH. Определены значения энергии, изотропных и анизотропных констант сверхтонкого расщепления для этих систем. Проведено сравнение с результатами прежних расчетов этих систем с использованием тех же базисных наборов, полученными ограниченным вариантом метода ССП и методом полного конфигурац. взаимодействия. Отмечено, что для ускорения сходимости итераций спин-

расширенного метода ССП удобно пользоваться прямыми методами минимизации энергии. Описано применение техники этого подхода в рамках формализма матрицы плотности.

В. И. Пупышев

LiH⁺

BeH

BH⁺

15.5.78

М. И. Е.

(+2)



Х. 1978, № 24

Виттмен 6511

1978

LiH^+

BH^+

BeH

OH

кв. экв.
расчет

(+3)



12 Д152. Расширенные по спине хартри-фоковские неэмпирические расчеты небольших радикалов. Kli-
mo Viliam, Tiho Jozef. Spin-extended Hartree-
Fock ab initio calculations for small radicals. «Mol.
Phys.», 1978, 35, № 6, 1777—1783 (англ.)

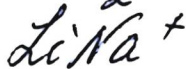
Неэмпирические расчеты радикалов LiH^+ и BH^+ в
состоянии $^2\Sigma$ и BeH и OH в состоянии $^2\Pi$ проведены
с помощью трех методов: 1) НХФ, 2) НХФ с проекти-
рованием по спине, 3) расширенным по спине методом
ХФ. В последнем случае для прямой минимизации
электронной энергии использовался метод градиента.
Расчеты проводились со следующими базисными набо-
рами гауссовых ф-ций: BeH — (6s 6p/6s); LiH^+ — (9s/
/6s); BH^+ — (9s 5p/6s); OH — (9s 5p/6s). Для каждого
радикала вычислены энергии корреляции, изотропные и
анизотропные компоненты сверхтонкого взаимодейст-
вия. Полученные значения сопоставлены с результа-
ми расчетов по методу КВ.

О. В. С.

Вар-1612-68

91978, N12

1978



88: 141933k. Floating spherical gaussian orbital (FSGO) studies with a model potential: Some open-shell systems. Mehandru, S. P.; Ray, N. K. (Dep. Chem., Univ. Delhi, Delhi, India). *Chem. Phys. Lett.* 1978, 54(1), 42-4 (Eng). A gaussian-based model potential was used within the FSGO formalism to study a series of open-shell systems (e.g. LiH^+ , NaH^+ , Li_2^+ , Na_2^+ and LiNa^+). Results for calcd. equil. geometries and dissocn. energies are compared to the corresponding quantities from available all-electron ab initio studies and other more elaborate theor. ests. The overall agreement is quite satisfactory.

γ_e ; Δ_e ; kv. max. factor

(44)

C.A. 1978, 82, N20

LiH^+

1978

изучение
систем.

(Y)

(44) 12

ф. 1978, № 7

7 Д180. Исследования методом плавающих сферических гауссовых орбиталей (ПСГО) с использованием модельного потенциала: некоторые системы с открытой оболочкой. Melian d r u S. P., Ray N. K. Floating spherical gaussian orbital (FSGO) studies with a model potential: some open-shell systems. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 54, № 1, 42—44 (англ.)

Метод модельного потенциала в рамках модели ПСГО использован для изучения ряда систем с открытой оболочкой: LiH^+ , NaH^+ , Li_2^+ , Na_2^+ , LiNa^+ . Для всех систем рассматривался только один валентный электрон; влияние остальных электронов описывалось введением модельного гауссовского потенциала. Результаты расчета равновесной геометрии и энергии диссоциации изученных систем хорошо согласуются (за исключением LiH^+) с соответствующими величинами, полученными различными методами ССП, и величинами, известными из эксперимента. Ю. Г. Абашкин

LiH^+

1978

14 Б42. Исследования методом плавающих сферических гауссовых орбиталей (ПСГО) с модельным потенциалом. Некоторые системы с открытыми оболочками. Meh and ru S. P., Ray N. K. Floating spherical gaussian orbital (FSGO) studies with a model potential. some open-shell systems. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 54, № 1, 42—44 (англ.)

Определены значения равновесного межъядерного расстояния R_e и энергии диссоциации D_e основных состояний молек. ионов LiH^+ , NaH^+ , Li_2^+ , Na_2^+ и LiNa^+ . Расчеты проведены ~~с использованием~~ одной плавающей сферич. гауссовой орбитали (ПСГО) для единствен-

78 до
равнов.
расстояния



2, 1978, N14

LiH^+

1978

5 Д150. Спиновые плотности в LiH^+ . Tortorelli James J., Harriman John E. Spin densities in LiH^+ . «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 7, 3163—3169 (англ.)

Рассчитаны изменения распределения спиновой плотности (СП) для молекулярного иона LiH^+ в состояниях $^2\Sigma$ и $^2\pi$ при варьировании межатомного расстояния в интервале от 3,5 до 6,5 ат. ед. Расчеты выполнялись

в расширенных слэтеровских базисах методами ССП со спиновой поляризацией (без оптимизации после проектирования на дублетное состояние) и КВ с учетом всех дублетных конфигураций, возникающих в данном базисе. Потенциальная кривая (ПК) основного состояния $^2\Sigma$, полученная методом КВ в наиболее широком бази-

фрагмент
спиновой
плотн.

Ф. 1979, № 5

се (11 ф-ций σ -типа и 3 π -типа) может быть описана кривой Морзе с параметрами $D_e=4,23$ ат. ед., $D_e=0,0048$ ат. ед. и $a=0,31$ ат. ед. В состоянии $^2\Sigma$ LiH^+ имеет 6 колебательных уровней, расстояния между которыми (начиная с $v=0$) составляют 313,85; 245,81; 175,58; 105,35 и ... см $^{-1}$. ПК состояния $^2\pi$ носит отталкивательный характер. Результаты расчетов распределения СП приведены в графич. форме; табулированы значения СП на ядрах. Анализ физич. природы распределения СП произведен на основе рассмотрения собств. векторов (СВ) матрицы СП: СВ с собств. значениями, близкими к 1, определяют «прямой» вклад в СП, а СВ с малыми собств. значениями — поляризационный вклад. Выполнено сравнение СП в LiH^+ и H_2^+ ; асимптотич. поведение СП на протоне в этих ионах одинаково. Отмечается зависимость СП на ядрах от базисного набора, в частности, от введения в базис ф-ций с большими экспоненц. параметрами (практически не влияющими на вычисленные значения полной энергии).

В. И. Барановский

Litt⁺

1979

Клеушкин А. В. и др.

расчет
попереч.
Кривых

« Конгр. по теории
атомов и молекул.
Видное, 1979. Мех.
ГОСА. Ч. 2.

Видное, 1979, 74

(см. N_{2}^{+} ; III)

LiH⁺

1980

NaH⁺

V92: 169665f Potential curves of alkali metal hydride cations. Nemukhin, A. V.; Stepanov, N. F. (USSR). Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim. 1980, 21(1), 18-21 (Russ). The $3\Sigma^+$ ground and excited states of MH⁺ (M = Li, Na, K, Rb, Cs) were calcd. by the 2-center model potential method (N. and S., 1977). The equil. internuclear distances in both states are also presented. The results are compared with available theor. values.

KH⁺

RbH⁺

CsH⁺

(+4) 

Кб. max.
раств.

CA 1980 92 N 20

1980

 LiH^+ NaH^+ KH^+ RbH^+ CsH^+ потенц.
кривые(+4) ☒

2.1980. N11

11 Б25. Потенциальные кривые катионов гидридов щелочных металлов. Немухин А. В., Степанов Н. Ф. «Вестн. МГУ. Химия», 1980, 21, № 1, 18—21

Методом двухцентрового модельного потенциала рассчитаны потенциальные кривые основного и первого возбужденного $^2\Sigma^+$ -состояний двухатомных катионов гидридов щел. металлов MH^+ (M — атом Li, Na, K, Rb, Cs). Зависимости параметров модельных потенциалов от межъядерного расстояния подобраны по данным неэмпирич. расчета LiH^+ для основного состояния и по результатам расчетов ионов KH^+ , RbH^+ методом псевдопотенциала для возбужденного состояния. Найденные величины равновесных межъядерных расстояний и энергий связи сопоставлены с результатами прежних вычислений.

Автореферат

LiH^+

1980

6 Д118. Потенциальные кривые катионов гидридов щелочных металлов. Немухин А. В., Степанов Н. Ф. «Вестн. МГУ. Химия». 1980, 21, № 1, 18—21

Методом двухцентрового модельного потенциала рассчитаны потенц. кривые основного и первого возбужденного $^2\Sigma^+$ -состояний двухатомных катионов гидридов щелочных металлов MH^+ (М — атом Li, Na, K, Rb, Cs). Зависимости параметров модельных потенциалов от межъядерного расстояния подобраны по данным неэмпирич. расчета LiH^+ в случае основного состояния и по результатам расчетов ионов KH^+ , RbH^+ методом псевдопотенциала в случае возбужденного состояния.

Автореферат

потенциальные
кривые

(+4) ☒

9 1980 N 6

LiH-

1981/2287

1981

4 Б21. Численные хартри-фоковские расчеты первого возбужденного состояния LiH^- . McCullough E. A., Jr. Numerical Hartree-Fock calculations on the first excited state of LiH^- . «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 3, 1579—1580. (англ.)

Ограниченным методом Хартри — Фока проведены численные расчеты 1-го возбужденного состояния иона LiH^- (конфигурация $1\sigma^2 2\sigma^2 4\sigma$). Энергия связи этого состояния (относительно LiH) составляет 0,0024 эВ (численная ошибка программы, согласно пробным расчетам отрицательных атомарных ионов, не превышает 0,0002 эВ). Аналогичные вычисления проведены в приближении замороженного остова, с 1σ - и 2σ -орбиталями, взятыми из расчетов нейтр. молекулы LiH . В этом приближении энергия LiH^- составляет 0,0023 эВ, что свидетельствует о незначит. эффекте релаксации орбиталей 1σ и 2σ при образовании иона. Орбиталь 4σ является чрезвычайно диффузной: $\langle r^2 \rangle = 1,17 \cdot 10^4$ (ат. ед.)². Оценены возможные поправки при учете корреляц. эффектов и движения ядер. М. Гофман

ξ_i

X. 1982,
19, w4

LiH-

Commuek 12287/ 1981

95: 86669w Numerical Hartree-Fock calculations on the first excited state of lithium hydride (LiH-). McCullough, E. A., Jr. (Dep. Chem. Biochem., Utah State Univ., Logan, UT 84322 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(3), 1579-80 (Eng). Accurate numerical RHF (M., 1975) calcns. were performed on the 1st excited state of LiH-. Both fully SCF and frozen core wave functions were obtained. A bound excited state is confirmed to exist with binding energy of 0.0024 eV.

Ke. deex-
pccrem

C.A. 1981, 95, N10.

LiH⁻

Оттиск 1984 — 1981

1 Д117. Численные расчеты первого возбужденного состояния LiH⁻ методом Хартри—Фока. Numerical Hartree—Fock calculations on the first excited state of LiH⁻. McCullough E. A., Jr. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 3, 1579—1580 (англ.)

расчет ϵ_i ,
E

С помощью ограниченного метода Хартри—Фока проведен расчет первого возбужденного состояния $(1\sigma^2 2\sigma^2 4\sigma)$ LiH⁻. Расчет выполнен численным методом как с полным самосогласованием, так и в приближении замороженных основных орбиталей 1σ , 2σ , перенесенных из нейтральной молекулы LiH⁻. На примере более простых расчетов отрицат. ионов атомов показано, что максим. ошибка численного расчета при определении энергии связи составляет $\pm 0,0002$ эВ. Найдено, что первое возбужденное состояние LiH⁻ является связанным с энергией связи 0,0024 эВ. Е. А. Ж.

г. 1982, 18, № 1.

LiH-

Lomnick 12839 1981,

Stevens W. J.; et al.

кв. мет.
факт
нормаль.
сфальс,
}

²
J. Chem. Phys., 1981, 74
(7), 3989-98

LiH^-

оттиски 5744

1977

расчет

До, Ш.И.

Ф. 1978
N 2

2 Д94. Теоретическое изучение аниона гидрида лития. Liu B., O-Ohata Kiyosi, Kirby-Docken K. Theoretical study of the anion of lithium hydride. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 5, 1850—1857 (англ.)

Методами ССП и конфигурационного взаимодействия (КВ) рассчитаны потенц. кривые основных электронных состояний молекулы $\text{LiH}(X^1\Sigma_g^+)$ и иона $\text{LiH}^-(X^2\Sigma_g^+)$. Базис состоял из $6s, 4p, 2d, 1f$ слэтеровских орбиталей на атоме Li и $5s, 3p, 2d$ и $1f$ — на атоме H. Учет КВ проводился в два этапа: а) включались все конфигурации данного типа симметрии, возможные при возбуждении 2σ - и 3σ -уровней ССП-решения; б) далее находились натуральные орбитали и на их основе строился новый ряд КВ с учетом возбуждений

трех электронов на натуральные орбитали с максим. числами заполнения. По оценкам авторов, с помощью КВ корреляц. поправки учтены с точностью $2 \cdot 10^{-4}$ ат. ед. Для LiH и LiH^- найдены спектроскопич. постоянные основных состояний. В случае LiH рассчитанные постоянные согласуются с эксперим. величинами в пределах 1%. Для LiH^- найдены следующие значения постоянных: $R_e = 3,15 \pm 0,03$ ат. ед., $D_e = 2,10 \pm 0,02$ эв, $D_0 = 2,03 \pm 0,02$ эв и $\omega_e = 1179 \pm 11 \text{ см}^{-1}$. Получено также сродство к электрону молекулы LiH , составившее 0,32 эв. Проведено сравнение результатов расчета методом КВ с результатами, полученными методом ур-ний движения.

А. Дементьев

LiH -

number 5744

1977

Кл. кат.
факт

М. И.
номеров,
н. публик.

57:173190m Theoretical study of the anion of lithium hydride. Liu, B.; Oohata, Kiyosi; Kirby-Docken, K. (Res. Lab., IBM, San Jose, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(5), 1850-7 (Eng). The potential-energy curves of the ground state of LiH and LiH⁻ were obtained by accurate ab-initio CI calcs. The bond length, dissocn. energy, and spectroscopic consts. obtained from the potential curve of LiH are within 1% of corresponding exptl. values. The results for LiH⁻ are $R_e = 3.15 \pm 0.03 a_0$, $D_e = 2.10 \pm 0.02$ eV, $D_0 = 2.03 \pm 0.02$ eV, and $\omega_e = 1179 \pm 11$ cm⁻¹. The calcd. adiabatic electron affinity of LiH is 0.32 eV with an estd. error limit of ± 0.02 eV. A semiempirical method for calcg. diat. mol. electron affinities is proposed. A detailed comparison was made of the current CI calcn. with the equations-of-motion calcn. of K. D. Jordan, et al., (1976).

C.A. 1977 B7 v22

LiH -

omsmee 5600

1977

Simons J.

Int. J. Quant. Chem.

1977, 11, 971-78

(Aē)

LiH-

1977

copy
C.B. Max.
parent

Simons Jack.

Annu. Rev. Phys. Chem.

Vol. 28. Palo Alto, Calif.,

1977, 15-45.

ex. 04- - III

1978

LiH⁻

NaH⁻

NaCl⁻

kb. exx.
facto

89: 118158y Studies of the negative ions of polar molecules LiH⁻, NaH⁻, and NaCl⁻. Jordan, K. D.; Wendoloski, J. J. (Dep. Eng. Appl. Sci., Yale Univ., New Haven, Conn.). *Mol. Phys.* 1978, 35(1), 223-40 (Eng). A study is presented of the type of diffuse functions that must be included in the basis sets in order to obtain a proper description of mol. anions. For diat. anions the extra electron occupies a nonbonding orbital locating most of its charge d. behind the electropos. atom. For LiH and NaH, such an orbital may be formed by hybridizing functions centered on the electropos. atom, or by employing functions centered behind the electropos. atom. The electron affinity is relatively insensitive to the basis set used, provided that it yields a good est. of the dipole moment of the neutral mol. and that the proper diffuse functions are included on the electropos. atom. Total energies were calcd. Ab initio calcns. are also performed on NaCl and its ground state anion; their potential energy curves are compared, and the calcd. electron affinity is 0.65 eV.

(+2)



C.A. 1978, 29, N14

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

(Me^-)

ε, μ

(+2) $\boxtimes$

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

LiH⁻

summary 6080

1978

NaH⁻

CsH⁻

kb max.
factor

88: 158648u Ab initio MC-SCF ground-state potential energy curves for LiH⁻, NaH⁻, and CsH⁻. Karo, Arnold M.; Gardner, Maureen A.; Hiskes, John R. (Lawrence Livermore Lab., Univ. California, Livermore, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(4), 1942-50 (Eng). The $1\Sigma^+$ ground states of LiH⁻, NaH⁻, and CsH⁻, as well as the $2\Sigma^+$ ground states of LiH⁻, NaH⁻, and CsH⁻, as well as the $2\Sigma^+$ ground state of CsH⁺ were calcd. over a wide range of internuclear distances. Multiconfiguration-SCF wavefunctions were obtained with the optimized valence configuration approach to the description of chem. bonding. Four configurations for the neutral mols. and seven for the neg. ions provided satisfactory descriptions. All of the neg.-mol.-ion ground states are attractive and have lower potential energies than the neutral parent-hydride mols. over the investigated internuclear distances. Mol. electron affinities at the equil. internuclear seps. are 0.283 (LiH), 0.278 (NaH), and 0.357 eV (CsH).

(+5)



LiH, NaH, CsH

Ar

C.A., 1978, 82, 122

LiH-

оттиски 6080

1978

17 B23. Неэмпирические потенциальные кривые основных состояний LiH^- , NaH^- и CsH^- , рассчитанные методом МК ССП. Kato Arnold M., Gardner Maureen A., Hiskes John R. Ab initio MC-CSF ground-state potential energy curves for LiH^- , NaH^- , and CsH^- . «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 4, 1942—1950 (англ.)

потенциальные
кривые

и. п.

(+2) □

(+2) ⊗

В области значений межъядерного расстояния от 4 до 20 ат. ед. многоконфигурац. методом ССП (МК ССП) рассчитаны кривые потенциальной энергии основных состояний Σ^+ -типа молекул LiH , NaH , CsH , их отрицат. ионов, а также катиона CsH^+ . Вычисления проведены в базисах двухэкспонентных функций с добавлением диффузных орбиталей. Даже в случае молекул, содержащих цезий, принимались во внимание все электроны системы. Найдено, что учет четырех конфигураций для нейтр. молекул и семи для анионов оказывается достаточным для удовлетворительного описа-

23.1978, N17

ния потенциальных кривых. Для всех систем потенциальные кривые анионов отвечают связанным состояниям и при всех межъядерных расстояниях располагаются ниже соотв-щих потенциальных кривых нейтр. молекул. Равновесные межъядерные расстояния для анионов несколько больше (на 6—7%), чем для нейтр. молекул. Приведены значения спектроскопич. постоянных, полученных при аппроксимации рассчитанных точек функциями Морзе. Найденные величины сродства к электрону в точках минимумов потенциальных кривых нейтр. молекул составляют 0,283 эв (LiH), 0,278 (NaH) и 0,357 (CsH).

А. В. Немухин

LiH —

NaH⁻

CsH⁻

Кривые
потенц.
энергии

(+2)

Витисен 6080

1978

9 Д100. Кривые потенциальной энергии основных состояний LiH⁻, NaH⁻, и CsH⁻, полученные неэмпирическим методом МК-ССП. — Каго Arnold M., Gardner Maureen A., Hiskes John R. Ab initio MC-SCF ground-state potential energy curves for LiH⁻, NaH⁻, and CsH⁻. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 4, 1942—1950 (англ.)

Многоконфигурационным методом ССП в приближении оптимизированных валентных конфигураций в широком интервале межъядерных расстояний рассчитаны потенц. кривые основных состояний нейтральных молекул LiH, NaH и CsH ($^1\Sigma^+$), анионов LiH⁻, NaH⁻ и CsH⁻ ($^2\Sigma^+$), а также катиона CsH⁺ ($^2\Sigma^+$). Расчеты проводились в двойном экспоненц. базисе ф-ций слэтеровского типа; использовалось по 4 конфигурации для нейтральных молекул и по 7 конфигураций для анионов. Получено, что потенц. кривые основных состояний всех анионов имеют связывающий характер и лежат ниже потенц. кривых исходных нейтральных молекул во всем интервале изученных R. Подгонкой по методу наименьших квадратов найдены параметры R_e и D_e для потенциа-

ср. 1978, № 9

ла Морзе и спектроскопич. константы. Для нейтральных молекул значения R_e несколько завышены по сравнению с экспериментом, а D_e хорошо совпадают. Для анионов равновесные расстояния R_e на 6—7% больше, чем у нейтральных молекул, а D_e — на 21—25% меньше. Вычисленное сродство к электрону молекул LiH , NaH , CsH равно, соответственно, 0,223, 0,278 и 0,357 эв. Для LiH и LiH^- , CsH и CsH^- приведены карты распределения электронной плотности.

О. В. Сизова

LiH-

BeH-

NaH-

MoH-

AlH-

расчет
потенц.
кривых

Ф. 1949, N5

1078
5 Д149. Исследование эффектов электронной корреляции ПНО-КВ и ПСЭП. VI. Сродство к электрону двухатомных гидридов второго и третьего рядов и спектроскопические постоянные их отрицательных ионов. Rosinus Pavel, Meyer Wilfried. PNO-Cl 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.)

Методом КВ в базисе псевдонатуральных орбиталей (ПНО-КВ) и в приближении связанных электронных пар (ПСЭП) рассчитаны потенциальные кривые влияния равновесных расстояний для отрицат. ионов AH^- ($A=Li-O, Na-S$) в основных состояниях. Для всех ионов, кроме LiH^- и BeH^- , учитывались корреляции только в валентной оболочке; в случае NaH^- , MoH^- и AlH^- учтена также межоболочечная $L-M$ корреляция. Адиабатич. сродство к электрону (СЭ) рассчитывалось как разность полных энергий анионов и изученных ранее тем же методом нейтральных молекул.

(74)

2

АН, причем вводилась поправка на нулевые колебания. Отклонения вычисленных значений СЭ от наблюдаемых составляют от 0,16 (SiH) до 0,37 (NH) эв. Все наблюдаемые тенденции в изменении СЭ хорошо воспроизводятся расчетами. Показано, что ненаблюдавшиеся до сих пор анионы BH^- и AlH^- должны быть устойчивы, а СЭ ВН и АН примерно равны 0,15 эв. Рассчитаны энергии диссоциации AH^- на А и H^- для $\text{A}=\text{Li}, \text{Be}, \text{B}, \text{Ca}, \text{Mg}, \text{Al}$ и на A^- и Н для остальных гидридов. Рассчитанные методами ССП, ПНО—КВ и ПСЭП спектроскопич. константы $R_e, B_e, \alpha_e, \omega_e, \omega_e x_e$ и D_0 сопоставлены с литературными данными. Для процессов $\text{AH}^- \rightarrow \text{AH}$ рассчитаны факторы Франка — Кондона.

О. С.

Lik⁺ [Ummex 14338]

1982

Fuentealba P., Pressly,
et al.

теорет.
расчет.

Chem. Phys. Lett.,
1982, 89, N5, 418-422

LiH^+

1983

Fuentealba P., Von Szentpaly L., et al.

u.n.

THEOCHEM 1983, 10,
213 - 219.

● (cu LiH ; III)

$H^+ - Li$

1983

1 Д249. Расчеты перезарядки для столкновений $H^+ + Li$ и $He^{2+} + Li$ методом молекулярных состояний. Molecular state calculations of charge transfer in $H^+ + Li$ and $He^{2+} + Li$ collisions. Sato Hiroshi, Kimura Mineo. «Phys. Lett.», 1983, A96, № 6, 286—288 (англ.)

В приближении прямолинейных траекторий методом возмущенных стационарных состояний, включающим электронный трансляционный фактор, проведены расчеты сечений перезарядки протонов и α -частиц низких и промежуточных энергий, сталкивающихся с атомами лития. Метод псевдопотенциала использовался для получения волн. ф-ций и энергий взаимодействия. При вычислении сечений перезарядки протонов в области межъядерных расстояний от 3 ат. ед. до 20 ат. ед. учитывалась связь шести состояний ($A^2\Sigma^+$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Pi$, $D^2\Pi$, $E^2\Sigma^+$ и $F^2\Sigma^+$), тогда как при больших межъядерных расстояниях 20 ат. ед. $\leq R \leq 30$ ат. ед. в расчетах сохранялись лишь два состояния ($B^2\Sigma^+$ и $E^2\Sigma^+$). По-

расчет Σ ,
м.п.

(4) X

ср. 1984, 18, №1

лученные результаты показывают, что при энергии протонов $E \leq 14$ кэВ захват в $2p$ -состояние является преобладающим, тогда как захват в $2s$ -состояние составляет лишь 30% от полного сечения перезарядки. В расчетах сечений перезарядки α -частиц, вычисляемых в области энергий от 0,1 до 20 кэВ/ат. ед., учитывалась связь одиннадцати состояний. Показано, что в рассматриваемой области энергий захват преобладает в состояниях с главным квантовым числом $n=3$. Отмечается хорошее согласие сечений перезарядки, вычисленных методом молекулярных состояний с расчетами, выполненными на основе разложения полной волн. ф-ции по атомным орбиталям. В. С..



LiH^+

1983

16 Б3055. Термодинамическое исследование кластеров щелочных металлов и молекул гидрида, оксида и цианида лития в газовой фазе. The thermodynamic study of alkali metal clusters, and gaseous molecules in the lithium hydride, oxide and cyanide systems. Wu C. H. «Ber. Kernforschungsanlage Jülich», 1983, № 1878, 113 pp., ill. (англ.)

термодинам. исслед.

А.Р.

С использованием квадрупольного масс-спектрометра исследовано образование молекул и ионов в газофазных системах Li-H , Li-O , Li-N-C . Впервые экспериментально обнаружены частицы LiH^+ , LiH_2 , Li_2H , Li_2H_2 , Li_3O , Li_2O , Li_3 , Li_4 , LiNC и Li_2NC . Определены появления этих частиц. Рассчитаны энергии связи литий—элемент в этих молекулах и результаты вычислений сопоставлены с квантовомех. расчетами. Установлено, что модель Полинга позволяет достаточно точно предсказывать значения энергий связи в гетероатомных молекулах. Изучены разбавленные р-ры дейтерия в литии и показано, что при высоких т-рах в газ. фазе присутствуют молекулы LiD , Li_2D , LiD_2 , Li_2 , Li_3 и Li_4 .

П. М. Чукуров

(+9) X
X. 1984, 19, N 16

LiH_k^+
 $Li_2H_k^+$

1984

15 Б1024. Неэмпирические расчеты стабильности гидридов легких элементов с учетом электронной корреляции. Чаркин О. П., Зюбин А. С., Горбик А. А. «Тр. Моск. хим.-технол. ин-т», 1984, № 134, 13—26

В рамках неэмпирич. подхода в двухэкспонентных базисах с учетом электронной корреляции рассчитаны энергии альтернативных конфигураций молекул $LH_k^\pm$, $L_2H_k^\pm$, LMH_3 , LMH_4 , где $L=Li, Na, BeH, MgH$; $M=Be, Mg, B, Al$, и различных продуктов их распада. Анализируется влияние электронной корреляции на относит. энергетич. характеристики гидридов элементов 2- и 3-го периодов. Резюме

расчет

(47) ☒

X. 1985, 19, N 15

LiH⁺

1984

15 B1019. Обобщение метода атомов в молекулах, учитывающее независимое масштабирование внутренних и внешних оболочек. Generalization of atoms-in-molecules theory to include independent scaling of inner and outer shells. Ellison Frank O., Chen Cheng. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 12, Pt2, 5855—5863 (англ.)

Предложена модификация метода атомов в молекулах с целью последующего использования результатов в приближении двухатомных фрагментов в молекулах. Применены различные масштабирующие множители для внутр. и внешн. электронных оболочек атомов в атомных волновых ф-циях. Рассмотрены способы разделения атомных гамильтонианов и собственных значений энер-

расчет М.А.,
До

Х. 1985, 19, N15

гии на внутреннюю и внешнюю составляющие. Предложены методы определения масштабирующих множителей одновременно по данным неэмпирич. расчетов и по эксперим. величинам атомной энергии. Представлены результаты расчетов полной энергии, энергии диссоциации и равномерного межъядерного расстояния для систем LiH^+ , LiH , BeH^+ , BeH , Li_2^+ , Li_2 . Найдено, что независимый подбор масштабирующих множителей позволяет существенно улучшить энергии молекул. Погрешности в энергиях диссоциации двухатомных систем с оптим. параметрами не превышают 7 ккал/моль.

А. В. Немухин

LiH^+

1984

романы,
книжки,
мел. паки

100: 127179d Nonempirical and semiempirical calculation of the potential curves for lithium-atomic hydrogen(1+)/lithium=(1+)-atomic hydrogen and lithium-molecular hydrogen(1+)/=lithium(1+)-molecular hydrogen. Nemukhin, A. V.; Bogdanova, S. A. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Khim. Fiz.* 1984, 3(2), 204-9 (Russ). The potential curves for $^2\Sigma_1^+$ and $^2\Sigma_2^+$ states of LiH^+ and for $^3A_2'$ and $^3A_2''$ for LiH_2^+ were calcd. by the MC SCF and diatomics-in-mol. methods. The results are of interest for the description of charge transfer reaction $\text{Li} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{Li}^+ 2\text{H}$.

LiH_2^+



C.A. 1984, 100, N 16

LiH^+

1985

3 10 Д58. Кривые потенциальной энергии 48 низлежащих состояний молекулы LiH^+ . Potential energy curves for the 48 lowest-lying molecular states of LiH^+ . Alikasem A., Aubert-Frécon M. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 111, № 1, 20—25 (англ.)

Кривые потенц. энергии электронных состояний $1-20^2\Sigma^+$, $1-14^2\Pi$ и $1-14^2\Delta$ молекулярного иона LiH^+ рассчитаны в рамках одноэлектронной модели с описанием взаимодействия «активного» электрона и остова Li^+ при помощи локального эффективного потенциала. В качестве базиса для построения волн. ф-ций использовались двухцентровые орбитали, представляющие собой ведущие члены разложений собств. ф-ций двухцентрового кулоновского гамильтониана в эллиптич. координатах. Основные характеристики полученной потенц. кривой основного состояния согласуются с данными расчетов в приближении связанных электронных пар и методом псевдопотенциала.

А. В. Зайцевский

(м.п.)

ср. 1986, 18, N/O

LiH^+

(Om. 23569)

1985

102: 209713d Potential energy curves for the 48 lowest-lying molecular states of lithium hydride ion (LiH^+). Alikacem, A.; Aubert-Frecon, M. (Lab. Spectrom. Ion. Mol., Univ. Lyon I, F 69622 Villeurbanne, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 111(1), 20-5 (Eng). The electronic energies of the 20 lowest-lying $^2\Sigma^+$ states, the 14 lowest-lying $^2\Pi$ states, and the 14 lowest-lying $^2\Delta$ states of LiH^+ were calcd. in the range $2 \leq R \leq 20$ a.u. from a model potential approach and using truncated diatomic orbitals as basis set. Results in very good agreement with the more recent literature were obtained for the spectroscopic consts., R_e and D_e , for the ground state $X^2\Sigma^+$.

nometes. sp-ua

48 нелатек

М. СОСМ.,

М. ПАЦИМ

C. A. 1985, 102, N 24.

LiH²⁺

Um. 21483

1985

(incop. pacen)

[102: 226231n The hydrolithium(2+)(LiH²⁺) quasimolecule. A comparison between the configuration interaction and the OEDM approaches. Errea, L. F.; Mendez, L.; Riera, A.; Yanez, M.; Hanssen, J.; Harel, C.; Salin, A. (Dep. Quim. Fis. Quim. Cuantica, Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain 28049). *J. Phys. (Les Ulis, Fr.)* 1985, 46(5), 709-18 (Eng). A direct comparison is given of the one-electron diat. mol. (OEDM) method with the conventional mol. approach, based on a full CI method using a basis set made up of symmetry adapted anti-symmetrized products of Gaussian type orbitals (GTO), for the treatment of at. collisions involving two-electrons. The quasimol. LiH²⁺ is chosen as an example. The advantage is studied of a screened Hamiltonian to define the OEDM orbitals. The energy correlation diagrams for the singlet and triplet subsystems are discussed, and also the phys. character of the mol. states involved in the Li²⁺(1s) + H(1s) collision. The comparison between both methods permits to interpret the detailed behavior of the couplings obtained in the full CI method and to assign unambiguously mol. symbols in the correlation diagrams. Even though the intuitive ((one active electron)) picture is useful for the present collision system, the inner-outer orbital interaction is significant for both the energy diagram and couplings.

C.A. 1985, 102, N 2.6

LiH⁺

1986

21 Б1036. Свойства малых молекул в импульсном пространстве и приближения локальной плотности. Критическая оценка. Momentum space properties and local density approximations in small molecules: A critical appraisal. Allan Neil L., Cooper David L. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 10, 5594—5605 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Исследована эффективность использования в рамках приближения локальной плотности функционалов $\langle p^m \rangle^{\text{TFD}}$ и E_x^{TFD} теории Томаса — Ферми — Дирака для оценки средн. значений моментов импульса $\langle p^m \rangle$ ($m = -1, 2, 3$) и обменной энергии E_x ряда двухатомных молекул элементов 2-го периода. Для расчетов использованы одnodетерминантные ф-ции, полученные в базисе OCT-(9s6p3d), а в случае LiHⁿ ($n = +1$) (I), BH (II), OH (III) — также и многодетерминантные волновые ф-ции, обеспечивающие правильный диссоциационный предел. Отклонение $\langle p^m \rangle^{\text{TFD}}$ от точных, рас-

(м.п.)

(+2)

х. 1986, 19, № 21

считанных с указанными волновыми функциями для равновесных межъядерных расстояний составляет $\sim 0,5\%$ для $m=1,2$ и $2,5\%$ для $m=-1$, а ошибка E_x^{TFD} — $0,7\%$. Отмечено, что величина ошибки не зависит от того, имеет ли молекула замкнутую или открытую оболочку. В случае I—III исследована зависимость $\langle p^m \rangle^{\text{TFD}}$ и $\langle p^m \rangle$ от межъядерного расстояния, а для молекул H_2O , CH_3OH , H_2CO , CO_2 выделены вклады в $\langle p^2 \rangle$ и $\langle p^2 \rangle^{\text{TFD}}$ атомов O и H. О. В. Гриценко



LiH^+

1986

Cardelino B. H., Eber-
hardt W. H., et al.

meop.
pacrim. Int. J. Quantum Chem.
1986, 29(5), 1635-49.

( LiH ; III)

LiD

1986

Hadinger G.,
Tergiman Y. S.

потенц.
крив.

J. Chem. Phys. 1986,
85(12), 6853-7.

●
(см. LiH; III)

LiH^+

1988

Joulakian B.

Chem. Phys. Lett., 1988,

ser. n.

143, NS, 445-449.

(see Li_2^+ ; III)

LiH⁺

1988

Кирнос В. Н., Саенко-
нов Б. Ф. и др.

Изв. вузов. Физ. 1988.
31, N 10. С. 106-108.

м.н.

(ссылка ● MeH; III)

LiH⁺⁺

1991

11 Д116. Преобладающее влияние в правиле Хунда разностей кинетической энергии для молекулярных систем при всех межъядерных расстояниях. The domination of Hund's rule by the kinetic energy differences for molecular systems at all internuclear separations / Liu Shu-Bin, Liu Xiao-Yu, Yang Qin-Song, Yu Yu-Xin // J. Mol. Struct. Theochem.— 1991.— 251.— С. 271—281.— Англ.

В базисах от ОСТ-2ГФ до 6-31ГФ** при различных межъядерных расстояниях исследовано электронное строение двухатомных гидридов атомов второго периода AH^{++} , $A = Li-F$ в синглетных и триплетных состояниях $1,3\Sigma^+$. Обнаружено, что в синглет-триплетное расщепление основной вклад вносит разность кинетич. энергий ΔT . Полученные результаты проанализированы с помощью теоремы вириала и малликовенского анализа заселенностей. Отмечено, что основной вклад в ΔT вносит ограниченный электронный перенос с $1s-AO$ на $2s-AO$ атома A .

М.П.



(+G)

Ф. 1992, №11-12 OH^{++} , BeH^{++} , BH^{++} , CH^{++} , NH^{++}
см. №1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 105, 106, 107, 108, 109, 110, 111, 112, 113, 114, 115, 116, 117, 118, 119, 120, 121, 122, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 129, 130, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 137, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146, 147, 148, 149, 150, 151, 152, 153, 154, 155, 156, 157, 158, 159, 160, 161, 162, 163, 164, 165, 166, 167, 168, 169, 170, 171, 172, 173, 174, 175, 176, 177, 178, 179, 180, 181, 182, 183, 184, 185, 186, 187, 188, 189, 190, 191, 192, 193, 194, 195, 196, 197, 198, 199, 200, 201, 202, 203, 204, 205, 206, 207, 208, 209, 210, 211, 212, 213, 214, 215, 216, 217, 218, 219, 220, 221, 222, 223, 224, 225, 226, 227, 228, 229, 230, 231, 232, 233, 234, 235, 236, 237, 238, 239, 240, 241, 242, 243, 244, 245, 246, 247, 248, 249, 250, 251, 252, 253, 254, 255, 256, 257, 258, 259, 260, 261, 262, 263, 264, 265, 266, 267, 268, 269, 270, 271, 272, 273, 274, 275, 276, 277, 278, 279, 280, 281, 282, 283, 284, 285, 286, 287, 288, 289, 290, 291, 292, 293, 294, 295, 296, 297, 298, 299, 300, 301, 302, 303, 304, 305, 306, 307, 308, 309, 310, 311, 312, 313, 314, 315, 316, 317, 318, 319, 320, 321, 322, 323, 324, 325, 326, 327, 328, 329, 330, 331, 332, 333, 334, 335, 336, 337, 338, 339, 340, 341, 342, 343, 344, 345, 346, 347, 348, 349, 350, 351, 352, 353, 354, 355, 356, 357, 358, 359, 360, 361, 362, 363, 364, 365, 366, 367, 368, 369, 370, 371, 372, 373, 374, 375, 376, 377, 378, 379, 380, 381, 382, 383, 384, 385, 386, 387, 388, 389, 390, 391, 392, 393, 394, 395, 396, 397, 398, 399, 400, 401, 402, 403, 404, 405, 406, 407, 408, 409, 410, 411, 412, 413, 414, 415, 416, 417, 418, 419, 420, 421, 422, 423, 424, 425, 426, 427, 428, 429, 430, 431, 432, 433, 434, 435, 436, 437, 438, 439, 440, 441, 442, 443, 444, 445, 446, 447, 448, 449, 450, 451, 452, 453, 454, 455, 456, 457, 458, 459, 460, 461, 462, 463, 464, 465, 466, 467, 468, 469, 470, 471, 472, 473, 474, 475, 476, 477, 478, 479, 480, 481, 482, 483, 484, 485, 486, 487, 488, 489, 490, 491, 492, 493, 494, 495, 496, 497, 498, 499, 500, 501, 502, 503, 504, 505, 506, 507, 508, 509, 510, 511, 512, 513, 514, 515, 516, 517, 518, 519, 520, 521, 522, 523, 524, 525, 526, 527, 528, 529, 530, 531, 532, 533, 534, 535, 536, 537, 538, 539, 540, 541, 542, 543, 544, 545, 546, 547, 548, 549, 550, 551, 552, 553, 554, 555, 556, 557, 558, 559, 560, 561, 562, 563, 564, 565, 566, 567, 568, 569, 570, 571, 572, 573, 574, 575, 576, 577, 578, 579, 580, 581, 582, 583, 584, 585, 586, 587, 588, 589, 590, 591, 592, 593, 594, 595, 596, 597, 598, 599, 600, 601, 602, 603, 604, 605, 606, 607, 608, 609, 610, 611, 612, 613, 614, 615, 616, 617, 618, 619, 620, 621, 622, 623, 624, 625, 626, 627, 628, 629, 630, 631, 632, 633, 634, 635, 636, 637, 638, 639, 640, 641, 642, 643, 644, 645, 646, 647, 648, 649, 650, 651, 652, 653, 654, 655, 656, 657, 658, 659, 660, 661, 662, 663, 664, 665, 666, 667, 668, 669, 670, 671, 672, 673, 674, 675, 676, 677, 678, 679, 680, 681, 682, 683, 684, 685, 686, 687, 688, 689, 690, 691, 692, 693, 694, 695, 696, 697, 698, 699, 700, 701, 702, 703, 704, 705, 706, 707, 708, 709, 710, 711, 712, 713, 714, 715, 716, 717, 718, 719, 720, 721, 722, 723, 724, 725, 726, 727, 728, 729, 730, 731, 732, 733, 734, 735, 736, 737, 738, 739, 740, 741, 742, 743, 744, 745, 746, 747, 748, 749, 750, 751, 752, 753, 754, 755, 756, 757, 758, 759, 760, 761, 762, 763, 764, 765, 766, 767, 768, 769, 770, 771, 772, 773, 774, 775, 776, 777, 778, 779, 780, 781, 782, 783, 784, 785, 786, 787, 788, 789, 790, 791, 792, 793, 794, 795, 796, 797, 798, 799, 800, 801, 802, 803, 804, 805, 806, 807, 808, 809, 810, 811, 812, 813, 814, 815, 816, 817, 818, 819, 820, 821, 822, 823, 824, 825, 826, 827, 828, 829, 830, 831, 832, 833, 834, 835, 836, 837, 838, 839, 840, 841, 842, 843, 844, 845, 846, 847, 848, 849, 850, 851, 852, 853, 854, 855, 856, 857, 858, 859, 860, 861, 862, 863, 864, 865, 866, 867, 868, 869, 870, 871, 872, 873, 874, 875, 876, 877, 878, 879, 880, 881, 882, 883, 884, 885, 886, 887, 888, 889, 890, 891, 892, 893, 894, 895, 896, 897, 898, 899, 900, 901, 902, 903, 904, 905, 906, 907, 908, 909, 910, 911, 912, 913, 914, 915, 916, 917, 918, 919, 920, 921, 922, 923, 924, 925, 926, 927, 928, 929, 930, 931, 932, 933, 934, 935, 936, 937, 938, 939, 940, 941, 942, 943, 944, 945, 946, 947, 948, 949, 950, 951, 952, 953, 954, 955, 956, 957, 958, 959, 960, 961, 962, 963, 964, 965, 966, 967, 968, 969, 970, 971, 972, 973, 974, 975, 976, 977, 978, 979, 980, 981, 982, 983, 984, 985, 986, 987, 988, 989, 990, 991, 992, 993, 994, 995, 996, 997, 998, 999, 1000.

LiH

1993

Ж 24 Б199. Описание основного и некоторых низколежащих возбужденных состояний LiH в рамках метода валентных схем. Valence bond description for the ground state and several low lying excited states of LiH / Mo Y. R., Wu W., Zhang Q. N. // J. Mol. Struct. Theochem .— 1993 .— 102 , July .— С. 237—249 .— Англ.

X. 1995, N 24

LiH

[Om. 38 129]

1995

Bellini M., De Natale P.,
Inguscio M., et al.,

transm.
chemp,
to. nupex

Phys. Rev. A 1995,

52, N3, 1954-1960.

Precise experimental test of no-

data for the breakdown of the
Born-Oppenheimer separation:
The rotational spectra of
isotopic variants of lithium
hydride.

1995

F: LiH

P: 3

14Б128. Неэмпирические адиабатические и диабатические постоянные диполи низколежащих состояний молекулы LiH. Прямая иллюстрация ионного характера. Ab initio adiabatic and diabatic permanent dipoles for the low-lying states of the LiH molecule. A direct illustration of the ionic character / Berriche Hamid, Gadea Florent Xavier [Chemical Physics Letters] // Chem. Phys. Lett. - 1995. - 247, N 1 - 2. - С. 85-88. - Англ.

Неэмпирическим методом в адиабатическом и диабатическом приближениях рассчитаны постоянные дипольные моменты восьми низколежащих {1}'СИГМА'-состояний молекулы LiH. Проанализировано соотношение ионной и ковалентной компонент волновых функций. Указано на возможность экспериментального обнаружения пересечения потенциальных кривых ряда состояний.

РМХ 1997

LiH^+

1995

22 Б150. Неэмпирическое исследование молекулы LiH^+ , анализ электронного взаимодействия и УФ-фотоэлектронный спектр LiH . Ab initio study of the LiH^+ molecule, electronic interaction analysis and LiH UV photoelectron spectrum / Berriche Hamid, Gadea Florent Xavier //

Chem. Phys. — 1995 .— 191 , № 1 - 3 .— С. 119—131 .— Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с использованием неэмпирич. псевдопотенциала для остова $\text{Li}(1s^2)$ и с учетом остовно-валентной корреляции рассчитаны адиабатич. кривые диссоциации LiH^+ на $\text{Li}(2s, 2p, 3s, 3p, 3d) + \text{H}^+$ и $\text{Li}^+ + \text{H}(1s, 2s, 2p)$, спектроскопич. постоянные и положения колебательных уровней. Для низших по энергии кривых диссоциации на $\text{Li}^+ + \text{H}(1s)$ и $\text{Li}(2S) + \text{H}^+$ в диабатич. модели проведен анализ основных электрон-электронных вз-вй и показано, что делокализация заряда вносит в связь более значительный вклад, чем поляризац. эффекты. Также рассчитан УФ-фотоэлектронный спектр LiH и обсуждены его особенности. — Н. Л.

М.А.

Х. 1995, N 22

1995

F: PsLi

P: 3

8Б155. Расчет позитрониевых соединений PsLi, PsF и PsCl во втором порядке вариационной теории возмущений. Calculation of positronium compounds, PsLi, PsF, and PsCl, by second-order variational perturbation method / Saito S. L. // Chem. Phys. Lett. - 1995. - 245, N 1. - С. 54-58. - Англ.

Во втором порядке вариационной теории возмущений с разложением по парциальным волнам рассчитаны энергии корреляции, ионизации позитрона и энергии связи позитрония (E) для основных ($\{2,1\}S$) состояний PsLi, PsF и PsCl ($E = -2,19; 2,24$ и $1,62$ эВ) и для возбужденных ($\{2,1\}P$) PsF и PsCl ($-0,16$ и $-0,05$). Значения для основных состояний PsF и PsCl хорошо согласуются с эксперим. данными и данными расчетов квантовым методом Монте-Карло. Библ. 31.

Р. Ж. Х. N 8, 1996

1995

F: LiH

P: 3

9Б1172. Расчет магнитных констант сверхтонкой структуры для низлежащих колебательно-вращательных уровней LiH, HF, CH{+} и BH. Calculations of magnetic hyperfine structure constants for the low-lying rovibrational levels of LiH, HF, CH{+}, and BH / Sauer Stephan P. A., Paidarova Ivana // Chem. Phys. - 1995. - 201, N 2 - 3. - С. 405-425. - Англ.

РМХ 1997

XH

X=Li, Be, B,
C, N, O, F

Do, Pop.
p. 096

LiH

1996

J. Chem. Phys., 1996, 105, 117
p. 7573

LiH, LiH⁺

1996

125: 98351n Computed distributions of roto-vibrational transitions in LiH ($X^1\Sigma^+$) and LiH⁺ ($X^2\Sigma^+$). Gianturco, F. A.; Giorgi, P. Gori; Berriche, H.; Gadea, F. X. (Department Chemistry, University

Rome, 00185 Rome, Italy). *Astron. Astrophys., Suppl. Ser.* 1996, 117(2), 377-392 (Eng). Accurate potential energy curves for the ground electronic states of LiH and LiH⁺ are employed to generate vibrational and rotational levels over a broad range of J values for both systems. The corresponding dipole functions are computed and used to obtain the frequency and intensity distributions of all relevant transitions between bound states for pure vibrational excitations, pure rotational excitations and for dipole allowed rovibrational processes. This extensive set of absorption data for both mols. is employed to locate the most likely region in the IR spectrum where characteristic lines could be obsd. Such data should be useful in exptl. attempts to search for LiH and LiH⁺ lines at high red shifts. Transitions between ionic levels will be markedly less intense than those for the neutral system and transitions between rotationally hot levels will be markedly more intense than those between low-J levels.

ROMANUS -
KPIKKE OCK
COCMOCH.

C. A. 1996, 125, N 8

1996

Strasburger K

Chem. Phys. Lett., 1996,

253 (1,2), 49-52

Quantum-chemical study on
the complexes of LiH molecule
with e^+ , Ps and Ps^- including
correlation energy.

EA 1996 125, 12, 19358 u

LiH, LiH-
LiHPs, LiHPs-
~~Li~~ e^+ LiH
Teor. poverf

Lit

[Om. 38818]

1997

Jan M. L. Martin,

Chem. Phys. Lett., 1997,
273, 98-106.

Do

L.H.

(Dn 38920)

1997

ab initio
racem

Lee Bk., Stout J.M.,
Dykstra C.E.,

J. Mol. Struct.,
1997, 400, 57-68.

$\text{Li}^+ - e^+$

1997

128: 106530z Positronic Lithium, an Electronically Stable $\text{Li} - e^+$ Ground State. Ryzhikh, G. G.; Mitroy, J. (Faculty of Science, Northern Territory University, Darwin NT, 0909 Australia). *Phys. Rev. Lett.* 1997, 79(21), 4124-4126 (Eng), American Physical Society. Calcns. of the positron-Li system were performed using the stochastic variational method, yielding a min. energy of -7.53208 hartree for the $L = 0$ ground state. In contrast with previous calcns. of this system, the system was found to be stable against dissocn. into the $\text{Ps} + \text{Li}^+$ channel with a binding energy of 0.00217 hartree; it is therefore electronically stable. This is the first instance of a rigorous calcn. predicting that it is possible to combine a positron with a neutral atom to form an electronically stable bound state.



C.A. 1998, 128, N9

21/12

997

Умови
доцмостів
Датум
Мова
Мова
Радна

' 126: 322545j A method of analysis of vibration-rotational and rotational spectra of light diatomic molecules. Uehara, Hiromichi (Dep. Chem., Josai Univ., Saitama, Japan 350-02). *J. Mol. Spectrosc.* 1997, 182(1), 57-64 (Eng), Academic. The potential model of G. Thompson et al. (1987) for an anal. of the vibrational-rotational and the rotational spectra of diat. mols. is modified by an algebraic WKB treatment of the Schroedinger equation given by J.K.G. Watson's (1973, 1980) effective Hamiltonian. A compact expression is given for the contributions from the adiabatic and nonadiabatic correction terms in the Hamiltonian to the J.L. Dunham's (1932) Y_{ij} coeffs. The present model is applied to the reported vibrational-rotational and rotational spectra of LiH as a typical light diat. mol. where effects of the diabatic and nonadiabatic corrections are significant, and all spectral lines of all isotopomers are fitted to a single set of mol. consts. simultaneously well within exptl. errors. The anal. expressions for $\Delta_{\omega}^{a,b}$ and $\Delta_B^{a,b}$ obtained in the present study provide the basis for the validity of the potential model of Thompson et al. for mols. composed of heavier atoms.



C.A. 1997, 126, N24

7 LiH

1998

130: 57432z The calculation of potential curve of $A^1\Sigma^+$ state of ^7LiH from experimental data. Al-Tuwirqi, Reem; Bakry, A.; Rali, M.; Fayyazuddin (Department of Physics, Faculty of Science, King Abdul Aziz University, Jeddah, Saudi Arabia 21413). *Indian J. Phys.*, B 1998, 72B(1), 87-91 (Eng), Indian Association for the Cultivation of Science. New Rydberg-Klein-Rees (RKR) potential energy curve calcs. of the $A^1\Sigma^+$ state of ^7LiH have been made from $v = 0$ to 26.

$A^1\Sigma^+$ romeruz.
Kreibel,
Mop. parum

C.A. 1999, 130, N 5

LiH
LiD

1998

✓ 128: 236527q Far- and mid-infrared emission spectroscopy of LiH and LiD. Dulick, M.; Zhang, K.-Q.; Guo, B.; Bernath, P. F. (Natl. Solar Observatory, Natl. Optical Astronomy Observatories, Tucson, AZ 85726 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1998, 188(1), 14-26 (Eng), Academic Press. High-resoln. Fourier transform spectra of LiH and LiD were recorded in the far-IR region, 100-360 cm^{-1} , and the mid-IR regions, 800-1200 cm^{-1} and 2000-3000 cm^{-1} . A total of 261 pure rotational lines and 678 rovibrational lines were measured for the isotopomers $^6\text{LiH(D)}$ and $^7\text{LiH(D)}$. Mol. consts. for the $X^1\Sigma^+$ ground state as mass-dependent Dunham Y_{ij} 's and mass-independent Dunham U_{ij} 's were detd. from a data set of 1476 lines, consisting of measured line positions and previously reported microwave, millimeter-wave, and IR lines. An effective internuclear potential for the ground electronic state where the Born-Oppenheimer part is modeled as a parameterized modified-Morse function was also detd. from a fit of the data.

UK CHEMIST

U-N

C.A. 1998, 128, N19

Y.H.
deH

1998

130: 87471d Spectroscopic constants of first-row and second-row diatomic hydride molecules. Ali, Md Sadique; Pandit, Sita Ram; Hasan, Md Mazahir (University Department of Physics, T M Bhagalpur University, Bhagalpur, 812 007 India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1998, 36(9), 508-511 (Eng), National Institute of Science Communication, CSIR. An interaction potential model consisting of an attractive and a repulsive interaction terms was employed to evaluate the values of rotation-vibration coupling const. (α_e) and vibrational anharmonicity const. ($\omega_e x_e$) for fourteen 1st-row and 2nd-row hydride mols. i.e., LiH, BeH, BH, CH, NH, OH, NaH, MgH, AlH, SiH, PH, SH, HCl and HF which are partially covalent and ionic in nature. The values of spectroscopic consts. calcd. using Ali-Hasan model are close to the exptl. values compared to the values calcd. from Born-Mayer, Hellmann and Varshni-Shukla models.

WeXe, de,
meop. paper

□ (413)

C. A. 1999, 130, N 4

H₂Li

1998

Moscardo F; et al;

теорет.
расчет
структур.
параметр.
W, D,
δ_{Hamom}.

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

(All-H₂;



III)

2⁺ Lill

DM-40472

2000

номер.
Книжка,
описание
составля.

Massimo Nello et al.,
J. Chem. Phys.,
2000, 113, N 15, p154-
p159.