

Li-Hal

Li_2X^+

1959

$X = Cl, F, Br, I$

Milne T. A.

Cubacchiotti D.

exam. inst.

11, 12.

H-271

exam. inst.

"F. Chem. Phys"

1959, 30, 16, 1412 21

Li_2X_2

$\text{X} = \text{Cl, Br, I}$

Т. 00.

11960

4В87. Молекулярная структура димеров хлористого лития. Термодинамические функции Li_2X_2 ($\text{X} = \text{Cl, Br, I}$). Bauer S. H., Ino Tadashi, Porter Richard F. Molecular structure of lithium chloride dimer. Thermodynamic functions of Li_2X_2 ($\text{X} = \text{Cl, Br, I}$). «J. Chem. Phys.», 1960, 33, № 3, 685—691 (англ.)—Методом электронной дифракции исследована структура Li_2Cl_2 . Изложена техника эксперимента, и проведен анализ эксперим. данных. В предположении плоской алмазоподобной структуры получены следующие значения углов и межатомных расстояний: Li—Li 2,64 Å; Cl—Cl $3,61 \pm 0,03$ Å; Li—Cl $2,23 \pm 0,03$ Å; $\angle \text{ClLiCl}$ $108^\circ \pm 4^\circ$. Полученные значения структурных параметров (СП) Li_2Cl_2 сравниваются с имеющимися в литературе теоретич. данными.

Ф. 1961. 64

см. н/б

Такое же сравнение проведено для СП димеров Li_2Br_2 и Li_2J_2 (эксперим. и теоретич. значения СП для этих димеров взяты из литературных источников). Приведены значения термодинамич. ф-ций (теплоемкость, энтропия, энтальпия и свободная энергия) димерных состояний галогенидов лития (Li_2Cl_2 , Li_2Br_2 и Li_2J_2), рассчитанных в интервале t -р $298,16\text{--}5000,00^\circ\text{K}$.

Е. Пшеничников

LiF
LiCl
LiBr
LiI
димеры

ВФ-189-Х

1961
266

1Б130. Инфракрасные спектры димерных галогенидов лития. Klemperer William, Norris Wilfred G. Infrared spectra of the lithium halide dimers. «J. Chem. Phys.», 1961, 34, № 3, 1071—1072 (англ.).—Исследованы ИК-спектры поглощения парообразных галогенидов лития. Помимо поглощения, измеренного ранее (РЖХим, 1958, № 9, 27626) и отнесенного к мономерам, обнаружено дополнительно по две полосы для каждого галогенида (в см^{-1}): LiF 640 и 460; LiCl 460 и 335; LiBr 413 и 295; LiI 375 и 348. Принимая плоское ромбич. строение димеров, авторы относят эти полосы к вал. кол. B_{2u} и B_{3u} . В. Коряжкин

х. 1962.1.



Li_2F_2
 Li_2Cl_2
 Li_2Br_2

 Li_2I_2
guapb

B9p-189-X

1961
266

Infrared spectra of the lithium halide dimers. William Klemperer and Wilfred G. Norris (Harvard Univ.). *J. Chem. Phys.* 34, 1071-2(1961).—The following values of the absorption max. of the Li halide dimers in cm^{-1} were detd.: LiF , 640, 460; LiCl , 460, 335; LiBr , 413, 295; LiI , 375, 248. The 2 observed vibrations were assigned to the B_{2u} and B_{3u} bond-stretching motions.

Henry Leidheiser, Jr.

c. A. 1962.56.1
117a



LiX

оттиски 7470

[1962]

$\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$

Корзневский В. А.; ебгр.

(и.и)

Вестн. Моск. ун-та

Сер. хим. 1962, №2

15-20

1967

LiR
LiCl
LiBr
LiI
NaF

Ref. no. 5

+4 mg

19848 (UCRL-11828(p.193-7)) MOLECULAR BEAM ELECTRIC RESONANCE EXPERIMENTS ON LiF, LiCl, LiBr, LiI, AND NaF. Alvin J. Hebert, Troy L. Story, Jr., Francis W. Breivogel, Jr., Craig D. Hollowell, and Kenneth Street, Jr. (Lawrence Radiation Lab., Univ. of California, Berkeley).

The molecular beam electric resonance method was used to study the molecular properties of ${}^6\text{Li}^{19}\text{F}$, ${}^7\text{Li}^{19}\text{F}$, ${}^6\text{Li}^{35}\text{Cl}$, ${}^6\text{Li}^{37}\text{Cl}$, ${}^6\text{Li}^{79}\text{Br}$, ${}^6\text{Li}^{81}\text{Br}$, ${}^7\text{Li}^{79}\text{Br}$, ${}^6\text{Li}^{127}\text{I}$, and ${}^{23}\text{Na}^{19}\text{F}$. Values are reported for rotational constants, dipole moments, quadrupole coupling constants, and spin-rotation and spin-spin interaction constants of molecules in different vibration states and in low rotational states. (D.L.C.)

NSA. 1965. 19.11

X

⁶LiCl

$$\boxed{\gamma=1 \rightarrow \gamma=0}$$

$$B_0 = 23821,088 \pm 0,006$$

$$B_1 = 23682,420 \pm 0,007$$

$$B_2 = 23396,844 \pm 0,012$$

⁶Li³⁷Cl

$$B_0 = 23781,615 \pm 0,009$$

Mc/sec

ν : (Li_2F_2 ; Li_2Cl_2 ; Li_2Br_2 ; Li_2I_2)
(LiCl ; LiBr ; LiF)

1966

Bergstein M., Ron A.
Israel J. Chem., 1966, 4,
11a, 49

(99)

10

REC'D. & N.

pp 1964

BEP 3983- $\bar{X}$

1967

LiF, LiCl, LiBr, LiI (Te, Se, D)

Tasi M. P., Doyama M.,
Phys. Rev., 1967, 160, N3,
716-718

BQ 3982-X

1968

LiH, LiF, LiCl, LiBr, LiI

(француз. и немецк. пост.)

Dass L., Saxena S.C.

Indian J. Pure Appl. Phys.,

1968, 6 (2), ● 102-104

Li_2Cl_2
 Li_2Br_2
 Li_2I_2

оттиск А - 1309

Краснов Р.С., Е.В. Морозов,
В.С. Тимошинин,
Т.Г. Данилова.

1968
744.

(и.п.)

"Труды Ивановского химико-технологического института.
1968, вып. 10, 36-41.

Зачислен в штат (до) 1969
металлов

Николаев Е.Н.,
Хим. выс. энерг., 1969, 3, № 6, 491-4 (рус.)

X4713

Масс-спектры ионных газовых
молекул.

25

Б, Ю (Ф)

СА, 1970, 72, N14, 72 190 W

2amoresnyg (neugne) user. memad.

1972

64420w Interionic distances in the liquid alkali halides.

Melnichak, M. E.; Kleppa, O. J. (Dep. Chem., Univ. Chicago, Chicago, Ill.). *Rev. Chim. Miner.* 1972, 9(1), 63-70 (Eng). Methods used to obtain interionic distances are discussed crit. and a new set of estd. interionic distances for the liq. alkali halides is obtained. This set is recommended for use in the evaluation and correlation of thermodyn. data for simple alkali halide mixts. The new distances are in very good agreement with the x-ray results of Levy and Danford (1964).

($\bar{r}_e$)

C.A. 1974 80. N12

A-2239

1973

Li_2F^+

Li_2Cl^+ , Li_2Br^+ , Li_2Y^+ , Li_2F
 Li_2Cl , Li_2Br , Li_2Y (I, nomeny.
- Krubice)

$Li_2S.M.$, Wharton J.G.,

Grice R.,

Mol. Phys.,

317-328

1973, 26, N2,

из Cl_3 ; $\text{Li}_3 \text{Br}_3$; $\text{Li}_3 \text{I}_3$; $\text{Na}_3 \text{F}_3$; $\left(\begin{array}{l} \text{Li}_3 \\ \text{перм. гр. хим} \\ \text{расчет} \end{array} \right) 1973$
 $\text{Na}_3 \text{Cl}_3$, $\text{Te}_3 \text{F}_3$ 57624
Соломонович В. Г., Батимов А. П.;
[Резюме работы «Ж. физ. химии АН СССР»]
М., 1973, 21 с., ил., библиогр. 22 назв.
(Резюме работы в ВИНТИ 3 янв. 1973,
N 53.28-73 Ден 1, (русск.)
Молекулярные взаимодействия и
термодинамические функции
некоторых простых молекул
и их смеси.
Рязань, 1973, 105-196 Ден. 10 (Р)

57624-1

1974

Li галогениды

Crice A.

метод расчета
расщепления.

"Mol. Phys.", 1974,
27, (I), 159-175



(см. M₂; III)

40718.1233

TC, Ph, Ch, I, GU

40892 (Co, Re, W)

1974

Li-Hal (Hal = F, Cl, Br)

2243

Ein Yung Sik — Gordon Roy G. Ion-ion
interaction potentials and their applica-
tion to the theory of alkali halide and
alkaline earth dihalide molecules.

"J. Chem. Phys.", 1974, 60, N 11, 4332-

4344

(англ.)

0156 экз.

130 135

ВИНИТИ

40820.1856

Ph, TC, Ch

LiCl, LiF, LiBr.

35223

(Рез. франц.)

1974

2324

Laplanche Jean-Pierre. Bandrauk Andre D.
Electric field gradients in alkali halide
molecules.

"Can. J. Chem.", 1974, 52, N 11, 2143-
2156 (англ., рез. франц.)

0170

158 160

102

ВИНИТИ

Li - галогениды

1975

13 Б45. Энергия связи молекул галогенидов лития.
Rai S. B., Rai D. K. Binding energy of lithium halide
molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 30, № 2, 326—328
(англ.)

Энергия связи галогенидов лития вычислены в рамках полужемпирич. модели Харриса — Пола. Электронная энергия ξ вычисляется вариационным методом только для двух электронов, находящихся в поле атомных остатков, с волновой функцией типа Гайтлера — Лондона. Взаимодействие атомных остатков на расстоянии R описывается потенциалом $E_n(R) = A \exp(-R/\rho) + 1/R$. Для вычисления энергии связи U_b используется выражение $U_b = I_{v1} + I_{v2} + P_2^0 + E_n + \xi$, где I_{v1} и I_{v2} — потенциалы ионизации валентного состояния Li и галогена, соотв., а P_2^0 — величина т. наз. энергии активации галогена. Рассчитанные и эксперим. величины энергий связи хорошо согласуются между собой за исключением молекулы LiI. Приведены результаты расчета ξ для гидридов щел. металлов.

А. В. Немухин

энергия
связи

Х. 1975. N13

50410.3699

40892

1975

Ch, Ph, TC

Li - 2a107.
(20) not spent

3165

Thakkar Ajit J.A new generalized expansion for the potential energy curves of diatomic molecules."J. Chem. Phys.", 1975, 62, N 5, 1693-1701
(англ.)

0341 БЖИ

314 317 333

ВИНИТИ

$Li^+ F^-$

Литий 4343

1976

$Li^+ Cl_2^-$

9 Д293. Оптические спектры ионов F_2^- , Cl_2^- и Cl_3^- в соединениях $M+F_2^-$, $M+Cl_2^-$ и $M+Cl_3^-$, изолированных в аргоновой матрице. Andrews Lester. Optical spectra of the difluoride, dichloride, and trichloride ions in the matrix-isolated $M+F_2^-$, $M+Cl_2^-$, and $M+Cl_3^-$ species. «J. Amer. Chem. Soc.», 1976, 98, № 8, 2147—2152 (англ.)

$Li^+ Cl_3^-$

Изучены УФ-спектры ионов $M+F_2^-$, $M+Cl_2^-$ и $M+Cl_3^-$ ($M=Li, K, Na, Cs$), в матрице аргона на сапфировой подложке при $T=17^\circ K$. В спектре $M+F_2^-$ обнаружена интенсивная полоса поглощения ~ 300 нм (340 нм для $M+Cl_2^-$), которая приписана переходу $\sigma-\sigma^*$ в дигалонидном анионе. Предположено, что интенсивная полоса 250 нм в спектре $M+Cl_3^-$ обусловле-

в матрице
спектр
в матрице

(+7)

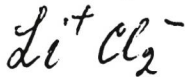
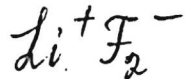


9776 N9

$LiCl_3 F_2$
2/4

на взаимодействиями атомов металла с атомами Cl и реакциями между CsCl и Cl₂ в матрице. Показано, что относит. интенсивность полос 250 и 340 нм резко зависит от конц-ии M и Cl₂. Проведено сопоставление энергий $\sigma \rightarrow \sigma^*$ -переходов Cl₂ и Cl₂⁻. Отмечены вариации энергии переходов в M⁺F₂⁻, обусловленные влиянием индуцированного дипольного момента M⁺. Сделан вывод, что влияние щелочного металла на спектры поглощения анионов соответствует ионной модели поляризующихся ионных пар. Установлена более высокая фотолитич. стабильность M⁺Cl₂⁻ в матрице по сравнению с M⁺F₂⁻, причем наиболее устойчивым является Cs⁺Cl₂⁻. Библ. 29. И. В. А.

1976



19 Б164. Оптические спектры ионов дифторида, ди-хлорида и трихлорида, полученные методом изоляции ионных пар $\text{M}+\text{F}_2^-$, $\text{M}+\text{Cl}_2^-$ и $\text{M}+\text{Cl}_3^-$ в матрицах. Andrews Lester. Optical spectra of the difluoride, dichloride, and trichloride ions in the matrix-isolated $\text{M}+\text{F}_2^-$, $\text{M}+\text{Cl}_2^-$, and $\text{M}+\text{Cl}_3^-$ species. «J. Amer. Chem. Soc.», 1976, 98, № 8, 2147—2152 (англ.)

В спектральной области 200—800 нм при т-рах 10 и 17 К исследованы спектры поглощения ионных пар атомов щел. металлов (Li , Na , K , Rb и Cs) с фтором или

хлором, изолированных в аргоновых матрицах. Измеренные интенсивные полосы поглощения 300 нм в случае $\text{M}+\text{F}_2^-$ и 340 нм для $\text{M}+\text{Cl}_2^-$ отнесены к $\sigma \rightarrow \sigma^*$ -переходу аниона дигалогенида. Этот переход для Cl_2^- соответствует энергии, в 2 раза меньшей известной для Cl_2 , что согласуется с ионной моделью поляризуемых ионных пар. В случае аниона трихлорида, полученного при взаимодействии металла с хлором и в результате р-ции CsCl с Cl_2 в условиях матрицы, наблюдается интенсивная полоса 250 нм. Аналогичная полоса для аниона трифторида из-за эксперим. трудностей не зарегистрирована.

О. Г. Гаркуша

(спектр в матр.)

(49)

X.1976.19

4343

70301.9180

Ph, Ch, TC

LiCl : H₂O
43587
LiF : H₂O

1976

-отдел
5622

Clementi Enrico, Barsotti Riccardo,
Fromm ~~Job~~, Watts Robert O. Study
 of the structure of molecular complexes.
 XIV. Coordination numbers for selected
 ion pairs in water. "Theor. chim. acta",
 1976, 43, N 2, 101-120

(англ.) 6823 ББК

784 787

8 14

ВИНИТИ

60219.3716

Ph, Ch, TC

40892X=F, Cl, Br, J

 $LiX; (LiX)_2$

1976

XU-11491

Welch D.O., Lazareth O.W., Dienes G.J.,
 Hatcher R.D. Alkali halide molecules:
 configurations and molecular characteris-
 tics of dimers and trimers. "J. Chem.
 Phys.", 1976, 64, N 2, 835-839 (англ.)

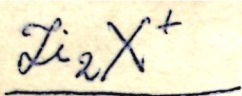
Рем. $(LiF)_2; III$

0554 ПМК

541 541

546

ВИНИТИ



X = Cl, Br, F, I

(Do, см. ное,
нечет)

[Comm 5233]

1977

Reck J. G. P. et al.
J. Chem. Phys.
1977, 66, No,
3847-53.

X₂ Li⁻

X = F, Cl, Br, I

(Do, and, well,
wellp.)

10mm 5233/

1977

Reck G. P., et al.
J. Chem. Phys.,
1977, 66, N9,
3847-53.

Li X

[*18-18863]

1977

$X = F, Cl, Br, I$

Thakur K.P., et al.

(Ea)

Z. phys. Chemie, Leipzig
1977, 258, 2, 397-400

(see. LiF; III)

hi-racior.

ommuch 9016

1979

Berkowitz J. et al.

(2) J. Chem. Phys., 1979, 71, ~ 6,
2624-2636.



(see. hit; M)

LiX

Lammuck 8449

1979

X = F, Cl, Br, I

Mohammad S. Noor

Int. J. Quant. Chem.

M.N

1979, 15, 769-82

● (ccr. LiF; 19)

Li_2X_2

$X = \text{защит.}$

индекс 8399 1979

Соломонов В.Т

Нореев В.С.

М.П.

Дл. груз. индекс

1979, 53, 1693-97

LiF
LiCl
LiBr
LiY

Lomnick 10843 1980.

Shanker J; et al.

Знамен
свѣта,

J. Chem. Phys., 1980,
73 (8), 4056-60.

и. н.

проф.

Галогиды
щелочных
металлов

1982

5 Л339. Фотоионизационная и фотоэлектронная спектроскопия мономеров, димеров и тримеров галогидов щелочных металлов. Photoionization and photoelectron spectroscopy of alkali halide monomers, dimers, and trimers. Berkowitz J., Batson C. H., Goodman G. L. «Metal Bond. and Interact. High Temp. Syst. Emphasis Alkali Metals. Symp. 181 Meet. Amer. Chem. Soc., Atlanta, Ga, March 31—Apr. 3, 1981». Washington, D. C., 1982, 275—299 (англ.)

фотоионизационная
и фотоэлектронная
спектроскопия

В статье обзорного характера детально обсуждены УФ фотоэлектронные спектры двухатомных молекул галогидов щелочных металлов (ГЩМ). Основное внимание уделено адекватному доказательству существования димеров ГЩМ. На примере LiHal показано наличие в перегретом паре LiHal димеров и тримеров. Получены фотоэлектронные и фотоионизационные спектры димеров LiHal. На основе полученных данных обсуждена электронная структура ионов ГЩМ. Библ. 31. Ю. В. Чижов

ср. 1984, 15, N 5

Тамоченидзе Ли

1982

Борисов Ю.А.

оценка
жесткости
связей

Изв. АН СССР, Сер. хим.,
1982, N 10, 2401-2402.

(с. Тамоченидзе Н.И.)

Запоишгн Li

1982

(ионн)

97: 203381a Excited states of polar negative ions. Garrett, W. R. (Health Saf. Res. Div., Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, TN 37830 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(7), 3666-73 (Eng). The spectra of electronically excited states of strongly polar neg. ions are discussed in terms of general features that may be predicted for such systems. The general properties are then studied through a systematic treatment of Li halide and Li hydride anions. Only one or two excited electronic levels exist for these systems, and the binding energies are so low that a limited no. of bound rotational levels are assoc. with each of the excited states. For the states of lowest binding energies, abnormal rotational level spacings re demonstrated. Also, a discussion is given of the implication for electron scattering and photodetachment studies, of the higher lying dipole states which cross over into the continuum.

Розыагн.
состоен.

(H) X

ионн Li (ионн)

C. A. 1982, 97, 1424

(Розыагн. сост.)

1982

20 ranoveruegt
igewon.
Mennat

197: 44705r Solution of Rittner potential for alkali metal halides by the Simons-Parr-Finlan method. Ghodgaonkar, A. M.; Ramani, K.; Prabhavalkar, P. D. (West. Reg. Instrum. Cent., Univ. Bombay, Bombay, 400 098 India). *Proc. Nucl. Phys. Solid State Phys. Symp.* 1981 (Pub. 1982). 24 C, 199-200 (Eng). The Rittner potential problem is solved by using the Simons-Parr-Finlan (SPF) technique, and an equation is developed to correlate SPF coeffs. with spectroscopic consts. and polarizability of constituent ions. An excellent agreement is obtained for dissocn. energies for 20 alkali halides with available exptl. data, and a satisfactory fit for SPF coeffs. is also obtained.

Do, pacit

C.A. 1982, 97, v 6

Заполнение
целочных
металлов

1982

97: 136811a Estimate of entropy of vacancy migration in alkali halide crystals. Galanov, Yu. I. (Tomsk. Politekh. Inst., Tomsk, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Fiz.* 1982, 25(8), 104-5 (Russ). An expression was developed to calc. the entropy of vacancy migration as function of rate of vibration of the crystal lattice.

Согласов.
ваханши

С.А. 1982, 97, N 16

Li X

1982

X = F, Cl, Br, I

μ, γ

10 Б375. Дипольные моменты, молекулярные потенциалы ионизации и асимптотическая форма электронной плотности для галогеноводородов и других гетероядерных двухатомных молекул. Dipole moments, molecular ionization potentials, and asymptotic form of electron density in hydrogen halides and other heteronuclear diatomic molecules. March N. H., Mucci J. F. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 9, 4555—4557 (англ.)

Систематизированы имеющиеся в лит. данные по дипольным моментам галогеноводородов и гетероядерных двухатомных молекул типа MX ($M = \text{Li, Na; } X = \text{F, Cl, Br, I}$). Установлено, что значения дипольных моментов (D) коррелируют с молек. Пот. ионизации (I). Показано, что ф-ция электронной плотности $\rho(r)$ при больших r м. б. записана в асимптотич. форме $\rho(r) = \rho_0(r) [1 + A \cos \theta / r^2]$, где константа $A = D/2I$, θ — угол между осью молекулы, связывающей 2 атома, и направлением вектора r .

Л. А. Корытко

ж. 1983, 19, N 10

1) NaX ($X = \text{F, Cl, Br, I}$)
2) галогеноводороды (μ, γ)

2^х-атом. мол-лы

1984

20 потенциалы

из атом. потенциал

(потенц. кривая)

102: 32683r A new representation of potential energy curves for diatomic molecules. Artega, Gustavo A.; Fernandez, Francisco M.; Castro, Eduardo A. (Div. Quim. Teor., INIFTA, 1900 La Plata, Argent.). *J. Chem. Phys.* 1984, 81(10), 4540-5 (Eng). A new method is given for constructing potential energy curves that allows one to incorporate available exptl. information systematically. It consists of a variable transformation that properly takes into account the behavior of the vibrational potential when the nuclei are far apart. As a result, the Dunham power series are changed into a sequence with improved convergence properties. Potential energy-curves obtained in this way are free from spurious max. and unphys. singularities. The method predicts dissocn. energies for both ionic and covalent mols. that are in much closer agreement with expt. than those obtained by other procedures that make use of the same input data. Results are given for 20 alkali halides and 3 covalent mols.

C. A. 1985, 102, N 4.

$M_n X_{n-1}$

1984

23 Б1115. Структура кластеров галогенидов щелочных металлов. The structure of alkali halide clusters. Diefenbach J., Martin T. P. «Surface Sci.», 1985, 156, № 1: Small Part. and Inorg. Clusters Proc. 3rd Int. Meet., Berlin (West), 9—13 July, 1984. Pt 1, 234—240 (англ.)

Проведены расчеты полной энергии различных катионных кластеров типа $(M_n X_{n-1})^+$, где M — атом щел. металла, X — атом галогена в рамках жесткой ионной модели (ЖИМ) с нулевым дипольным моментом и модели поляризуемости ионов (МПИ). На основании данных по энергиям 134 определенных исходных структур найдены наиболее стабильные геометрич. конфигурации ионов $(Na_n Cl_{n-1})^+$. Согласно расчетам, лишь кластеры состава $M_4 X_3^+$, $M_5 X_4^+$ и $M_{16} X_{15}^+$, должны иметь структуру, сходную с аналогичными кластерами из NaCl. При помощи соконденсации NaJ и CsJ в инертном газе получены смешанные кластеры, идентифицированные мето-

M — атом
Щелочн. металл

X — атом галогена

структура

X. 1985, 19, № 23

дом МС в виде катионов $\text{Na}_x\text{Cs}_y\text{J}_{x+y-1}^+$. Согласно масс-спектральным данным повышенной стабильностью обладают ионы $\text{NaCs}_3\text{J}_3^+$. Расчеты полной энергии показывают, что наибольшее уменьшение энергии происходит при замене атома Cs на Na в ионах Cs_4J_3^+ .

Д. В. Загоревский



MX

1984

M-целочн. металы
X-галогены

Inoue A.,
Kojima K., et al.

J. Solution Chem. 1984,
13 (11), 811-23.

IR;
спектр

● (ср. MgCl_2 ; III)

Започни да
цел. мем. алат,
Бла. заф,
металите

1984

101: 157813u The structure of elemental and molecular clusters. Martin, T. Patrick (Max-Planck-Inst. Festkoerperforsch., Stuttgart, Fed. Rep. Ger.). *Festkoerperprobleme* 1984, 24, 1-24 (Eng). A review with 78 refs. is given on the structures and related properties (including mass spectra and dissocn. energies) of several kinds of at. and mol. clusters (including alkali metal halides, rare gases, and metals).

(сбор, струк-
тура, до)

с. А. 1984, 101, № 18

Структура

1984

LiX_y

Rambidi N. G.,

$X = Al, Y = O, Cl, F$ Stepanov N. F.,
et al.

(обзор) Khim. Svyaz Str.

Mol. 1984, 5-20.

(сер. Структура MNO_2 ; III)

198.5

$M^+ \cdot XHX^-$, где

X — галоген

M — щелочной металл

8 Д73. Щелочно-водородные дигалогениды как примеры колебательной связи. Alkali hydrogen bihalides as candidates for vibrational bonding. Ault B. S., Manz J. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 115, № 4—5, 392—394 (англ.)

Обсуждается колебательная связь в соединениях $M^+ \cdot XHX^-$, где X — галоген, а M — щелочной металл.

колебательн.

связь

ф. 1985, 18, N 8

1985

Двухатомные
галогениды
щелочных
металлов

17 Б1160. Энергии диссоциации и порядки связи для двухатомных галогенидов щелочных металлов. Bond dissociation energies and bond orders for diatomic alkali halides. Reddy R. R., Reddy A. S. R., Reddy V. K. «Theor. chim. acta», 1985, 67, № 3, 187—191 (англ.)

Для оценки энергий диссоциации (D_{AB}) и порядков связей (q) в молекулах галогенидов щел. металлов предложены след. выражения: $D_{AB} = \bar{D}_{AB} + 31,973 e^{0,363\Delta x}$, $D_{AB} = \bar{D}_{AB} (1 - 0,2075\Delta x e) + 52,29\Delta x$, $q = 1,5783 \cdot 10^{-3} (\omega_e^2 \bar{r}_e / B_e)^{1/2}$, где $\bar{D}_{AB} = (D_{AA} \cdot D_{BB})^{1/2}$, Δx — разность электроотрицательностей по Полингу ($x_A - x_B$). Значения D_{AB} , вычисленные по этим ф-лам, отличаются от эксперимент. не более, чем на 4,5 и 5,3% соотв. Полученные результаты сопоставлены с др. оценками. В. М. Козба

До, порядок
связи

Х. 1985, 19, N 17.

1985

Двухатомные
молекулы
галогенидов
щелочных
металлов

8 Д122. Энергия диссоциации и порядки связей в двухатомных галогенидах щелочных металлов. Bond dissociation energies and bond orders for diatomic alkali halides. Reddy Rajuru R., Reddy Agarala S. R., Reddy Vanka Krishna. «Theor. chim. acta», 1985, 67, № 3, 187—191 (англ.)

Для двухатомных молекул галогенидов щелочных элементов проведен расчет энергии диссоциации и порядка связей с использованием простых эмпирич. соотношений

$$D_{AB} = \bar{D}_{AB} + 31,973 \exp(0,363 \Delta x) \quad (1)$$

$$D_{AB} = \bar{D}_{AB} (1 - 0,2075 \Delta x r_e) + 52,29 \Delta x, \quad (2)$$

расчет
энергии дис-
социации
и порядка связей
ср. 1985, 18, № 8



где $B_{AB} = (D_{AA} \cdot D_{BB})^{1/2}$ и Δx — разность электроотрицательностей по Паулингу ($X_A - X_B$), а r_e — межъядерное расстояние. Полученные по этим ф-лам энергии диссоциации сравниваются с данными, выведенными с помощью эмпирич. соотношения Паулинга $D_{AB} = B_{AB} + 30(\Delta x)^2$ и Матча $D_{AB} = B_{AB} + K\{1 - \exp(-\alpha \Delta x^2)\}$ (где $K = 103$ и $\alpha = 0,29$). Обнаружено, что энергии диссоциации для фторидов сильно отклоняются от общей тенденции, что объясняется ослаблением связи фтора со щелочными элементами по сравнению с ожидаемой на основании экстраполяции данных для более тяжелых галогенов. Ошибка в энергии диссоциации по сравнению с эксперим. данными составляет $\sim 4,5$ и $5,3\%$ для ур-ний (1) и (2) соответственно, тогда как расчет по ф-ле Паулинга дает ошибку $40,2\%$. Порядок связи q связан со спектроскопич. константами ω_e и B_e с помощью соотношения $q = 1,5783 \cdot 10^{-3} (\omega_e^2 r / B_e)^{1/2}$. Расчетные величины оказались в хорошем соответствии с литературными данными.

Л. Д. Б.

LiX

(Dm. 30 934)

1988

X = F, Cl, Br, I

Chaturvedi S.D.,

meopem. Sharma S.C. et al.,

pacem Indian J. Phys. B 1988,

nocm. 62, N 1, 101-105.



LiX
(X=F, Cl, Br)

Ac, J, parat

1990

/ 113: 65520r Electronic structures of lithium halide monomers and dimers: ionization energies and electron affinities. Tomasello, Pasquale; Von Niessen, Wolfgang (Dip. Fis., Univ. Catania, I-95129 57 Catania, Italy). *Mol. Phys.* 1990, 69(6), 1043-58 (Eng). The electronic structure of lithium halide LiX (X = F, Cl, Br) monomers and dimers is investigated by focusing mainly on the vertical ionization energies in the entire valence region. For the monomers the electron affinities are also studied. The investigations are performed using two Green-function methods to calc. the ionization energies and the electron affinities with the inclusion of correlation and relaxation effects. For the electron affinities large basis sets on Li and the halogens were employed. For the monomers LiCl and LiBr, Koopmans' approxn. provides good results for the lowest ionic states, but present investigations demonstrate that for the higher-energy states and for the remaining mols. many-body effects are strong. This feature is also obsd. in the theor. detn. of the electron affinities of the monomers, where shifts of 10-20% from the Koopmans values are noticed. In the inner valence region correlation effects dominate the ionization process for the essentially halogen-localized Cl 3s and Br 4s orbitals, in particular for LiBr and its dimer. For the bromides calcns. indicate a breakdown of the mol.-orbital picture for the ionization of the σ inner valence orbital. Satisfactory results are also obtained for the dimerization energies.

C.A. 1990,
113, N8

M-X

[OM · 36107]

1991

M = Li, Na, K,
Rb, Cs

Mestdagh J. M.,
Visticot J. P.,

X = F, Cl, Br, I

Chem. Phys. 1991, 155,
79-89

энергии связи,
μ, электростат.
терми.

Semiempirical electro-
static polarizability model

• of the ionic bonding in alkali
and alkaline earth hydroxides
and halides.

$(M\text{Hal})_2$

1993

M-щелочной
металл

Cave Robert F., Ono Tan,

J. Chem. Phys., 1993,

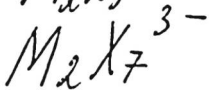
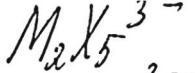
99, N 12, C. 9764-69

М.А.



J. Chem. Phys., 1994, 101 51081

1994



M-узелок-мет
X-затвор

теоретическ-

расчет

составляющих

118249h Construction principle for stable multiply-negative charged molecular systems. Part II. Triply-negative charged systems. Scheller, M. K.; Cederbaum, L. S. (Dip. Chim., Univ. Perugia, 06100 Perugia, Italy). *J. Chem. Phys.* 1994, 100(12), 6035-6055 (Eng). Following a recently introduced construction principle, triply-neg. charged compds. are designed and investigated. The specific series of systems discussed are $M_2X_5^{3-}$ alkali halides and $M_2X_7^{3-}$ alk. earth halides. For the highly ionic members in these series, considerable evidence for their stability to fragmentation and electron autodetachment is obtained at various levels of theory.

C.A. 1994, 121, N10