

91203

Li_2CO_3
 LiO_4

Tarte P.

1964

Spectrochim. Acta 20 (2), 238.

Identification of Li-O bands
in the infrared spectra of
simple lithium compounds
containing LiO_4 tetrahedra.

(cu. Li_2CO_3)

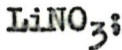
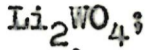
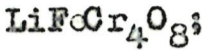
Bsp-6104-X

10066a

1965

X503

- X - BP



(kp, vi)

Tarte P.

Spectrochim. Acta, 1965, 21, N2,
313-319

Effect isotopique ...

J

PX, 1966, 16120

E c . φ . H .

$\text{Li}_2\text{CO}_3, \text{Na}_2\text{CO}_3, \text{K}_2\text{CO}_3$ (20) 1972
(расквал) \bar{x} 7126

Bates J. B., Brooker M. H., Quist A. S.,
Boyd G. S.,

J. Phys. Chem., 1972, 76 (11), 1565-71 (Eng)

Raman spectra of molten alkali
metal carbonates

10

7

CA, 1972, 77, 4, 26827 g

Li_2CO_3

(Kspett.)

J₁

1979

91:148713j Lithium-oxygen Raman bands of lithium-6 and lithium-7 carbonates. Hase, Y.; Yoshida, I. V. P. (Inst. Quim., Univ. Estadual Campinas, Sao Paulo, Brazil). *Spectrochim. Acta, Part A* 1979, 35A(4), 377-8 (Eng). The Raman spectra of polycryst. $^6\text{Li}_2\text{CO}_3$ and $^7\text{Li}_2\text{CO}_3$ were recorded in the Li-O vibrational region, and showed 4 weak bands for each compd. Results were compared with those from the IR spectra of the LiO_4 tetrahedrons.



C.A. 1979, 91, N18

Li_2CO_3

(spec.)

(Di)

1979

91:148714k Low frequency bands of lithium carbonate crystal. Hase, Y.; Yoshida, I. V. P. (Inst. Quim., Univ. Estadual Campinas, Sao Paulo, Brazil). *Spectrochim. Acta, Part A* 1979, 35A(1), 379 (Eng). The IR and Raman spectra at $<300 \text{ cm}^{-1}$ were recorded for polycryst. $^6\text{Li}_2\text{CO}_3$ and $^7\text{Li}_2\text{CO}_3$. No isotopic frequency shifts for Li^+ translations were obsd. The no. of obsd. bands was compared with that of the CO_3^{2-} translational and rotational modes by factor group anal.

C.A. 1949, 9, N18

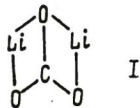
Li_2CO_3

1983

17 Б48. АВ INITIO. Исследование геометрического строения молекулы Li_2CO_3 . Коновалов С. П., Соломонович В. Г. «Ж. структур. химии», 1983, 24, № 2, 163—164

Методом Хартри—Фока с использованием двухэкспонентного базисного набора ОГТ Хузиняги—Даннинга рассчитаны энергии нек-рых геометрич. конфигураций молекулы Li_2CO_3 , дипольные моменты и заселенности

кометр,
структура, E;



по Малликену. Найдено, что минимуму полной энергии отвечает структура (I), не противоречащая результатам эксперим. исследований. Проведена оптимизация геометрич. параметров, рассчитаны энергии мономолек. распада по нескольким каналам и силовые постоянные.

А. В. Немухин

X. 1983, 19,
N 17

Li_2CO_3

(Дт. 20940 / 1985

7 Л146. Ab initio исследование потенциальной поверхности и колебательного спектра молекулы Li_2CO_3 . Коновалов С. П., Соломоник В. Г. «Ж. структур. химии», 1985, 26, № 1, 15—21.

Методом Хартри—Фока—Рутана в двухэкспонентном базисе Хузинаги—Даннинга (DZ) проведено исследование некоторых участков потенц. поверхности (ПП) молекулы карбоната лития Li_2CO_3 . Отдельные точки на ПП были рассчитаны в базисе DZ, дополненном поляризационными d -ф-циями на атомах кислорода и углерода. Найдено, что единственная равновесная конфигурация молекулы имеет симметрию C_{2v} с двумя бидентатно-координированными атомами лития. Выполнен расчет силового поля и колебательного спектра молекулы. Результаты сопоставлены с имеющимися в литературе данными по ИК-спектрам карбонатов щелочных металлов.

Резюме

расчет м.л.,
геометрии,
структ., сил. поле
ф. 1985, 18, N 7

Li₂CO₃

От 20.940/1985

15 Б1088. Ab initio исследование потенциальной поверхности и колебательного спектра молекулы Li_2CO_3 . Коновалов С. П., Соломоник В. Г. «Ж. структур. химии», 1985, 26, № 1, 15—21

Методом Хартри—Фока—Рутана в двухэкспонентном базисе Хузинаги—Даннинга (DZ) проведено исследование нек-рых участков потенциальной поверхности (ПП) молекулы карбоната лития Li_2CO_3 . Отдельные точки на ПП рассчитаны в базисе, дополненном поляризационными d -функциями на атомах кислорода и углерода. Найдено, что единственная равновесная конфигурация молекулы имеет симметрию C_{2v} с двумя бидентатно-координированными атомами лития. Выполнен расчет силового поля и колебат. спектра молекулы. Результаты сопоставлены с имеющимися в лит-ре данными по ИК-спектрам карбонатов щел. металлов. Резюме

Di, эмб. пост,
геометр.,
структура

х. 1985, 19, № 15

От 22911

Li_2CO_3

[Dm. 20940] 1985

102:191542k Ab initio study of the potential surface and vibrational spectrum of the lithium carbonate molecule, Konovalov, S. P.; Solomonik, V. G. (Ivanov, Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1985, 26(1), 15-21 (Russ). The potential surface of Li_2CO_3 was studied by the Hartree-Fock-Roothaan method by using double-zeta basis sets with consideration of polarized d -functions on O and C atoms. The single equil. configuration has C_{2v} symmetry with 2 bidentately coordinated Li atoms. The force consts. and mol. vibrations of Li_2CO_3 were calcd. The results are compared with IR spectral data of alkali metal carbonates.

номеров. по -
деп. х.и., числ.
ночм., Vi,

C.A. 1985, 102, N 22

Li_2CO_3

(Dm 34089)

1990

113: 65622a Molecular geometry and vibrational frequencies of the lithium carbonate molecule. Ramondo, F.; Bencivenni, L. (Dip. Chim., Univ. di Roma, I-00185 Rome, Italy). *J. Mol. Struct.* 1990, 221, 169-74 (Eng). MO calcs. are reported for different structures of the mol. Li_2CO_3 . The calcs. were carried out at the RHF-SCF level employing contracted Gaussian basis sets: 3-21G and 3-21G*. Configurations of C_{2v} and C_{3v} symmetry were examd., and were found to be stationary points. The bidentate structure is the stable equil. form of Li_2CO_3 , while the monodentate one is a saddle point for Li atom migration around the group CO_3^{2-} . The nonplanar C_{3v} structure is the highest energy point on the hypersurface explored. Harmonic vibrational frequencies were computed for CO_3^{2-} and for bidentate Li_2CO_3 with C_{2v} symmetry.

рацем

структура

с.А. 1990, 113, N 8

Li_2CO_3

1992

Ramondo F., Bencivenni L.,
et al.,

смыкка,
мед.
рацем

TEOCHEM 1992, 85, 121-47

(см. ● LiAsO_3 ; III)

1996

F: Li₂CO₃

P: 3

17B138. Карбонаты щелочных металлов. Спектроскопия КР, неэмпирические расчеты и структура. Alkali carbonates: Raman spectroscopy, ab initio calculations, and structure / Koura N., Kohara S., Takeuchi K., Takahashi Setsuko, Curtiss L. A., Grimsditch M., Saboungi Marie-Louise // J. Mol. Struct. - 1996. - 382, 3. - С. 163-169. - Англ.

Неэмпирическим методом ССП в базисе 6-31ГФ{*} исследовано электронное строение Li[2]CO[3] и K[2]CO[3]. Наиболее выгодными в обоих случаях оказываются плоские структуры. Рассчитанные гармонич. частоты согласуются с данными спектров КР.

РМХ 1997