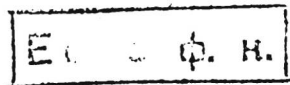


Liz F2; Liz F3

LiNaF_2 , Li_2F_2 , Na_2F_2 , $\overline{\text{X}} 5256$ 1930
 $\text{NaF}(\text{Vi}, \text{Cur. uos})$

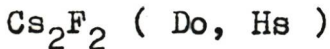
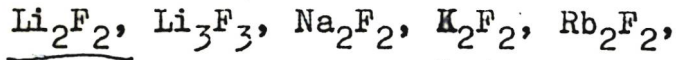
Cyvin S. J., Cyvin B. N., Snellson A.,
J. Phys. Chem., 1970, 74, 4338-4343

10



1958

188



Eisenstadt M., Rothberg G.M., Kusch P.
J.Chem.Phys., 1958, 29, N 4,
797-804

J, Be,

M

F

Акиншин Г.Н., Рамбидзе Н.Г.

"М. теор. химии", 1960, 5, 11, 23.

Электроннографическое исследование строения молекулы галогенидов калия и натрия

~~С.М. Лил~~

сильно загрязнен № 213

☒ III Лил

Li₂F₂ (2)
~~4729~~

Wilkins R. d., Ludwig R. M.,
Green S. A. 1960

Deena
m. g. p.

Symp. Combust. 8th
Pasadena Calif., 1960, 375
p.

[101]

Li₂F₂ (1)



T. g. p.

$(\text{LiF})_2$

ВФ-189-Х

1961
266

11В132. Инфракрасные спектры димеров галогенидов лития. Klemperer William, Norris Wilfred G. Infrared spectra of the lithium halide dimers. «J. Chem. Phys.», 1961, 34, № 3, 1071—1072 (англ.).— В ИК-спектрах поглощения димеров галогенидов лития обнаружены, помимо одной ранее известной, две новые полосы поглощения в далекой области спектра: 460 и 640 см^{-1} для LiF , 335 и 460 см^{-1} для LiCl , 295 и 413 см^{-1} для LiBr , 248 и 375 см^{-1} для LiI . Предполагается, что эти полосы поглощения соответствуют плоским валентным колебаниям димеров, имеющих геометрию ромба. При этом полоса с большей частотой соответствует колебаниям атомов вдоль большой диагонали ромба.

А. Сидоров

Беро отгиск N 266

№ 11В132.1961.



BQP-M 321-II

1962

Li₂F₂ (Di)

Weltner W.,

Condensation. Evaporation

Solids Proc. Intern. Symp.,

Dayton, Ohio, ● 1962, 243-53

BQP - 10010 - X

Linovsky M. J.

J. Chem. Phys., 1963, 38, 658.

LiF
Li₂F₂
ИК спектр
2-35 μ

ИК спектры соединений LiF и Li₂F₂ в диапазоне инфракрасного излучения, кристаллическая и молекулярная.
LiF ν = 838, 845 (K₁), 883 (K₂) и 883 (K₃). Li₂F ν = 836, 892 (K₁), 880 (K₂) и 840 (K₃)

9

Каждый разне спек. разн. Li₂F₂ и LiF. Молекула Li₂F₂ имеет молекулярную структуру. V_h.



Li_2F_2
4338

1963
Snelson A., Pitzer K.S.

Оценка
н. н.

J. Phys. Chem., 1963, 67, 882
p.

[32]



$\text{Li}_2\text{F}_2(\Gamma)$

н. н.

Li₂F₂

Bsp 5788 - VII

1964

Lineosky M. Y.

AD 609 121, Avail CFSTY,
1964, 61pp.

~~(Di, & Hf)~~
//



cel. ThO - III

~~dir F2(7)~~
1195

Яром - Агаев Н. П.

1964

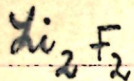
Венна
и. П.

НС. фру. хилитт, 1964, 3.8, 2579^{с.}

[58]

dir F2(7)

и. П.



Schlick S., Schnepf O.

1964

ИК-спектр J. Chem. Phys., 1964, 41, n 2,
463-72.

ИК-спектры мономеров
и димеров галогенидов
лития в жидких
средах при низ-
ких температурах.
(см. LiF)

(LiF)₂

1965
Howard Wilmont F,
et. al.

(Di)

"Inorg Chem" 1965, 14,
N2, 409-13 (over)

(cell LiF, III)

ThO_2 ; ZrO_2 ; Li_2F_2 (VI, VII 3927
1965
экспериментальные параметры)

Linevsky M. J., N&S9 Accession
No N65-31315, Rept No, AD 467 028
71-7pp 1965

Infrared studies on thorium
zirconia and lithium fluoride
by matrix isolation
10 (P) CA 1964

LiCl, LiF (We)
Li₂Cl₂, Li₂F₂ (Vi)

X-6077

1965

Schnepp O.,

U.S. Dep. Comm. AD 625045, Avail.

CFSTJ, 14pp, 1965

Infrared spectra
high temperature

W

⊕

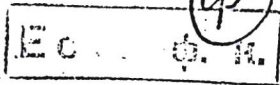
of polyatomic
molecules

CA, 1964, 63, 54, 16264h

V; (Li_2F_2 ; Li_2Cl_2 ; Li_2Br_2 ; $\bar{X}$ 4411/1966
 LiCl ; LiBr ; LiF)

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

W



ppp1964

3628

1966

$\text{LiF}, (\text{LiF})_2$ (vi)

Redington R. Z.

J. Chem. Phys., 1966, 44, 1238-
1244

PXX, 1966, 175191

HD

Li Beir
 $\boxed{\text{Li}_2\text{F}_2}$ Li_2Cl_2 ,
 Li_2Br_2 , LiF ,
 LiCl , LiBr .

Вар-4411-X

9 Д229. Длинноволновые ИК-спектры димерных галогенидов лития. Bersgtein M., Ron Arza. Far IR spectra of lithium halide dimers. «Israel J. Chem.», 1966, 4, № 1a, 49 (англ.)

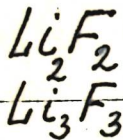
С использованием метода матричной изоляции при низких т-рах исследованы длинноволновые ИК-спектры галогенидов лития. Для изотопа Li^7 к неплоским деформационным колебаниям кольца димеров Li_2F_2 , Li_2Cl_2 и Li_2Br_2 отнесены соответственно полосы 268, 174 и

150 см^{-1} . Кроме того, в спектрах обнаруживаются добавочные полосы, отнесенные к заторможенному вращению мономерных молекул в твердом растворе. В случае изотопа Li^7 эти полосы расположены у 293 см^{-1} для LiCl и у 253 см^{-1} для LiBr . В спектре LiF наблюдаются две добавочные полосы у 242 и 253 см^{-1} . Предложенная интерпретация спектров основывается на изотопном смещении частот для Li^6 и Li^7 и корреляции между частотами полос и моментами инерции молекул галогенидов.
 А. Станевич

(+5r)

Рис 9р, 1962, 90229

☒



Do

Goldfinger P.

1967
109

La chimica e l'industria,
49, n. 1, 51.

Химическая и физическая
используемость
иросный газобразных
мод-1



70706.3460

Ph, Ch .

LiF ; Li_2F_2 ; Li_3F_3

40882

1967
(1) spectro
chem /
X-6097

Snelson Alan. Infrared spectrum of LiF ,
 Li_2F_2 , and Li_3F_3 by matrix isolation.
"J. Chem. Phys.", 1967, 46, N 9, 3652-3656

/англ./

20

Есть документ

461

ВИНИТИ

1968

LiF

5629-4

Bp

LiF₂

Li

7 D512. ИК-спектры матрицы фторида лития. Abramowitz Stanley, Acquista Nicolo, Levin Ira W. Infrared matrix spectra of lithium fluoride. «J. Res. Nat. Bur. Standards», 1968, A72, № 5, 487—493 (англ.)

В диапазоне 150—1000 см^{-1} измерены спектры поглощения матриц, образованных очищенными соединениями Li^6F , Li^7F и смесью 1:1 $\text{Li}^6\text{F}:\text{Li}^7\text{F}$. Выделены системы полос, относящихся к молекулярному соединению определенного типа, и выполнена интерпретация этих спектров. Группа полос с максимумами на 700, 500 см^{-1} и в более длинноволн. области приписана поглощению линейных димеров с двумя неэквив. атомами лития. Обсуждаются структуры димеров типа F—Li—F—Li , F—Li—F...Li и F—Li...F—Li с эквивалентными и удлинненными связями. Рассчитаны частоты некоторых колебательных обертонов и выполнено сравнение наблюдаемых и рассчитанных колебаний для различных типов симметрии всех трех структур. Библ. 10. В. Н. Ш.

ф. 1969. 78

Bp-5629-X

1968

 Li_2F_2

Li

суперкрит.

~~1012855~~ Infrared matrix spectra of lithium fluoride. Abramowitz, Stanley; Acquista, Nicolo; Levin, Ira W. (Inst. for Basic Stand., Nat. Bur. of Stand., Washington, D.C.). *J. Res. Nat. Bur. Stand., Sect. A* 1968, 72(5), 487-93 (Eng). Evidence for a linear dimer Li_2F_2 was obtained by extending the spectral measurements for matrix isolated Li fluoride into the far ir region. The vapors from solid ^6LiF , ^7LiF , and $^6\text{LiF}/^7\text{LiF}$ mixts. were deposited in Ar matrixes at liq.-H temps. Vibrational assignments were made on the basis of the following linear species: $^6\text{Li}_2\text{F}_2$, $^7\text{Li}_2\text{F}_2$, $^6,^7\text{Li}_2\text{F}_2$ and $^7,^6\text{Li}_2\text{F}_2$. Although the specific geometry of the dimer could not be detd., a normal coordinate anal. supported the spectral interpretation of a linear structure ($C_{\infty v}$). RCZM

C.A. 1968. 69.24

Li_2F_2 (2) Freiberg M., Ron A., Schnepf O. 1968
2331

Ocuna

J. Phys. Chem., 1968, 42, 3526
P.

u. n.

[46]

$\text{Li}_2\text{F}_2(\Gamma)$



u. n.

Li_2F_2

B 90-5234-X

1969

23 Б260. О структуре фтористого лития.— Data obtained on lithium fluoride structure. «Nat. Bur. Stand. Techn. News Bull.», 1969, 53, № 3, 57 (англ.)

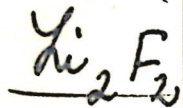
В области $150-1000\text{ см}^{-1}$ сняты ИК-спектры изолированных в матрице молекул Li^6F и Li^7F . Найдено 5 полос, к-рые путем анализа нормальных координат отнесены димерам $\text{F}-\text{Li}-\text{F}-\text{Li}$. Вычислены силовые коэф. димера. Отмечено, что димеры Li_2F_2 имеют линейную структуру.

М. Р. Алнев

Li_2F_2 ; см. н.

структура

X. 1969. 23



расширен
сст. касс.

Bp-5256-X 1970
Cyrin S. J. et al.

J. Phys. Chem., 74(25),
4338.

(sol. LiNaF₂)III

13

(LiF)₂

1970

кв.-мех.
расчет

18 Б60. Литиевая связь. Kollman Peter A., Lieberman Joel F., Allen Leland C. The lithium bond. «J. Amer. Chem. Soc.», 1970 92, № 5, 1142—1150 (англ.)

Проведены полные неэмпирич. расчеты по методу МО ЛКАО ССП (с использованием гауссовских базисных наборов) систем LiF с LiF, HF, Li₂, H₂. При расчетах варьировались конфигурации (линейная, перпендикулярная, циклическая), межъядерные расстояния и валентные углы, а также изучалось влияние *p*-орбит атомов Li на различные характеристики систем. Для мономеров и димеров приведены атомные заселенности и контуры электронной плотности, расчетные значения дипольных моментов, частот и интенсивностей полос ИК-спектров, к-рые сравнены с соотв-щими величинами в аналогич-

+1

X. 1970. 18



ных системах с водородными связями. По ные результаты хорошо согласуются с известными опытными данными (энергиями образования димеров, их ИК-характеристиками, геометрией и т. д.). Авторы заключают, что изученные литиевые системы подчиняются обычным закономерностям образования донорно-акцепторных комплексов, где решающую роль играют относит. энергии МО донора и акцептора.

Е. М. Шусторович

Li₂F₂

Pearson R. G.

1970

non.

J. Chem. Phys.,

sup-ra

1970, 52, 5, 2164

● (see 944)¹⁴

LiF , NaF , Li_2F_2 , Na_2F_2 , 1972
 LiNaF_2 (ср. ноем., ср. кв. асим. ноем.)

Cyvin S. J., Cyvin B. N., X-9983

Mol. Struct. Lib., 1972, 255-60.

Alkali fluorides. III Mean
amplitudes for lithium and
sodium fluorides.

C.A. 1975, 83 ~20. 170175\$

40 (4) 6

Li_2F_2 ; Li_2Cl_2 ; Li_2Br_2 ; Li_2I_2 ;
 Na_2F_2 ; Na_2Cl_2 ; Na_2Br_2 ; Na_2I_2 ;
 K_2F_2 ; K_2Cl_2 ; K_2Br_2 ; K_2I_2 ;
 Rb_2F_2 ; Rb_2Cl_2 ; Rb_2Br_2 ; Rb_2I_2 ;
 Cs_2F_2 ; Cs_2Cl_2 ; Cs_2Br_2 ; Cs_2I_2

молек.
 парам.;
 термод.
 ср-ущи

1972

X-76/4

Краснов К.С., Соломонович В.Т., Морозов Е.В.

Термодинам. ввс. темп., 1972, 10, №4, 760/4

Термодинамические функции ^{40 + 10 + 4} (русск) 24
 и молекулярные параметры орто-
 ромических димерных моле-
 кул галогенидов щелочных метал-
 лов.

10 (4) СД, 1972, 77, №4, 158264Р

СММ. 9588

Li_2F_2

1972

LiNaF_2

Na_2F_2

(V₁)

50341w Alkali fluorides. II. Infrared spectra of lithium-6 sodium difluoride, lithium-7 sodium difluoride, and normal coordinate analysis of planar cyclic lithium sodium difluoride, dilithium difluoride, and disodium difluoride. Snelson, A.; Cyvin, B. N.; Cyvin, S. J. (Res. Inst., Illinois Inst. Technol., Chicago, Ill.). Mol. Struct. Vib. 1972, 246-54 (Eng). Edited by Cyvin, Sven Josef. Elsevier: Amsterdam, Neth. Infrared spectra (190-4000 cm^{-1}) of vapors over LiF-NaF mixts. at 900-1000° were recorded by using the matrix isolation technique. Five of the 6 ir active frequencies of LiNaF_2 were obsd. and assigned on the basis of a planar C_2 -structure. Harmonic force consts. are given for Li_2F_2 , Na_2F_2 , and LiNaF_2 .

(+2) ☒

C.A. 1975, 83 v6

1973

2 Б19. Димеры фторида лития и гидрида натрия. Baskin C. P., Bender C. F., Kollman P. A. Dimers of lithium fluoride and sodium hydride. «J. Amer. Chem. Soc.», 1973, 95, № 18, 5868—5870 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с использованием сгруппированного гауссовского базиса рассчитаны потенциальные поверхности основных состояний мономеров и димеров LiF и NaH. Для димеров исследованы геометрич. конфигурации с симметрией типа D_{2h} и $C_{\infty v}$, причем в случае линейной конфигурации расстояния в мономерных фрагментах были взяты равными равновесным в LiF и NaH соотв. Энергии димеризации получены следующими: 47,2; 37,8 и 66,7 ккал/моль для LiH, NaH и LiF соотв. Значение для LiF хорошо согласуется с эксперим. результатом. Расчет LiH и $(LiH)_2$ был выполнен для сравнения, причем при расчете димера была исследована также конфигурация симметрии C_{2v} . Для равновесной кон-

④3

(LiF)₂

Ze

сирует.

с. 1974

N2

фигурации этого типа энергия получена более высокой, чем для системы двух изолированных молекул (H_2 и Li_2). Для всех димеров миним. энергии отвечает циклич. конфигурация типа D_{2h} . Приведены полные и орбитальные энергии, равновесные расстояния, дипольные моменты, компоненты квадрупольных моментов и атомные заселенности в рассмотренных молекулах. Полученные результаты подробно сравниваются с результатами расчетов др. авторов. Н. Ф. Степанов

Li_3F_3

1973

35743c Molecular constants and thermodynamic functions of some trimeric M_3X_3 -type (M = lithium, sodium, thallium, X = halides) molecules. Solomonik, V. G.; Danilova, T. G. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1973, 47(4), 1063 (Russ). Addnl. data considered in abstracting and indexing are available from a source cited in the original document. The est. of the vibration frequencies of a series of mols. of the M_3X_3 type, was made on the basis of Li_3F_3 IR spectrum data. The ideal gas thermodyn. functions were calcd. for these compds. at 298-5000°K. A. Giacalone

Li

T.G. op

12 80 II
143

(+23)

C.A. 1973, 79, N 6

End.

Li_2F_2

См меек 3579

1975

Ismail Z. R., et al.

См. ност.
(ист. данные)

J. Inorg. nucl. Chem.
1975, 35, 3201-6.

$(\text{LiF})_2$, $(\text{NaF})_2$, $(\text{KF})_2$, $(\text{RbF})_2$, $(\text{LiCl})_2$, $(\text{NaCl})_2$, $(\text{KCl})_2$, $(\text{RbCl})_2$, $(\text{CsCl})_2$, $(\text{LiBr})_2$, $(\text{NaBr})_2$, $(\text{KBr})_2$, $(\text{RbBr})_2$, $(\text{CsBr})_2$,
 $(\text{LiI})_2$, $(\text{NaI})_2$, $(\text{KI})_2$, $(\text{RbI})_2$, $(\text{CsI})_2$ (ub mex. pacref)

5-14434 Brumer P., Karplus M., $\bar{X}$ -9977

J. Chem. Phys. 1976, 64, 512, 5165

Perturbation theory and ionic models
 for alkali halide systems I Dimers.

CA, 1976, 85, 118, 130812g

110 $\oplus$

BX-162

1976

LiCl , LiF , Li_2Cl_2 , Li_2F_2 (Y)

De Bleijser J., Van Woerkom P.C.M.;
Levte Y.C.,

Chem. Phys. 1976, 13(4), 387-402.

Vibrational relaxation in hydrogen⁵
bonded systems. I. Theory

C.A. 1976, 85, N4, 27048m

hls

10



Li_2F_2

B-X-219

1976

7 Б114. О происхождении линейной формы молекулы Li_2F_2 в матрице. Гусаров А. В. «Ж. физ. химии», 1976, 50, № 10, 2476—2480

геометрия

Для выяснения природы образования линейного димера фторида лития и возможности его существования в газ. виде в рамках попповой модели получена зависимость потенциальной энергии молекулы Li_2F_2 от координаты перехода линейной формы в ромбическую. Показано, что уже при $T \sim 100^\circ \text{K}$ величина барьера (26 ккал/моль) значительно ниже запаса колебательной энергии молекулы. Полученные результаты подтверждают предположение, что источником линейного димера, идентифицированного в ИК-спектрах матрично-изолированного LiF , являются не соотв-щие молекулы в газовой фазе, а, гл. обр., р-ции в матрице. О. Г. Гаркуша

X. 1977 N 7

Li_2F_2

B-X-219

1976

2 Д139. О происхождении линейной формы молекулы Li_2F_2 в матрице. Гусаров А. В. «Ж. физ. химии», 1976, 50, № 10, 2476—2480

по теории

2 теор.

2 симметрии

С использованием ионной модели получена зависимость потенц. энергии молекулы Li_2F_2 от координаты перехода линейной формы в ромбическую. Установлено, что величина барьера уже при $\sim 1000^\circ\text{K}$ существенно ниже запаса колебательной энергии молекулы. Подтверждено высказанное Реддингтоном предположение о том, что источником линейной формы являются несоответствующие молекулы в паре, а главным образом реакции в матрице.

Резюме

Ф. 1977. N 2

(+1) Ембю
X

60602.3650

Ph, Ch, TC, MGU

96200

Li₂ F₂

1976

*4-13904

Radler K., Sonntag B., Chang T.C.,
Schwarz W.H.E. Experimental and theoretical
investigation of the Li 1s spectra
of molecular lithium halides. "Chem.
Phys.", 1976, 13, N 4, 363-374 (англ.).

0635 ~~мк~~

607 608

ВИНИТИ

Li2F2

[Оттиск 16033]

1976

Соломон^и В. П.,

Li;

Мурн. флу. химии,
1976, 50, N4, 1006-1008



Li_2F_2

Оттиск 5976

1976

Соломошки В.Г. и др.

Строение
молекул

Тезисы: Всесоюзн.
семинар по изучению
строения и опр. м. и.
простых молекул соедин.

Москва, июль, 1976, с 40

Li_2F_2

B-X-175

1976

(2 Б89) Электронографическое исследование строения димерной молекулы фторида лития. Соломоник В. Г., Гиричев Г. В., Краснов К. С., Засорин Е. З. «Изв. высш. учеб. заведений. Химия и хим. технол.», 1976, 19, № 8, 1280—1282

При $T=1360^\circ\text{K}$ выполнено электронографич. исследование паров фторида лития. Определены межъядерные расстояния r_g и средние амплитуды колебаний l в димерной молекуле Li_2F_2 : $\text{Li}-\text{F}$ 1,737(9) и 0,109(8) Å, $\text{F} \cdots \text{F}$ 2,778(17) и ~~0,233(19)~~ Å. Полученные результаты согласуются с плоской ромбич. структурой молекулы Li_2F_2 (симметрия D_{2h}). Угол $\text{F}-\text{Li}-\text{F}$ найден равным $106 \pm 4^\circ$.

Автореферат



Есн-у



X 1974 №2

Li₂F₂ B-X-175

1976

isomorphous

empirical

86: 8923z Electron-diffraction study of the structure of a dimeric lithium fluoride molecule. Solomonik, V. G.; Girichev, G. V.; Krasnov, K. S.; Zasorin, E. Z. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Khim. Khim. Tekhnol.* 1976, 19(8), 1280-2 (Russ). From an electron diffraction study of Li₂F₂ vapor at 1360°K the internuclear distance and amplitude of oscillation of the Li-F bond were $1.74_{-0.02}^{+0.03}$ Å, and $0.112_{-0.022}^{+0.011}$ Å. Corresponding values for the F-F bond were $2.78_{-0.03}^{+0.04}$ and $0.236_{-0.031}^{+0.018}$ Å.

C. E. Stevenson

C. A. 1977 86 N2

Li_2F_2

1390 - 24-X-B

1976

22 Б23. Расчет энергий, геометрии и частот колебаний димеров галогенидов щелочных металлов. Trugman Stuart, Gordon Roy G. Calculation of the energies, geometries, and vibration frequencies of alkali halide dimers. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 11, 4625—4627 (англ.)

В рамках модели Томаса—Ферми—Дирака (ТФД) рассчитаны поверхности потенциальной энергии некоторых димеров галогенидов щел. металлов M_2X_2 , $M=Li, Na, K, Rb$ и $X=F, Cl, Br$. Электронная плотность молекул аппроксимировалась суммой хартри-фоковских плотностей изолированных ионов M^+ и X^- . Вычисленные энергии диссоциации, равновесные длины связей и частоты колебаний димеров сопоставлены с имеющимися эксперим. значениями. Точность этих расчетов (без всяких подгоночных параметров) сравнима с точностью полупэмпирич. методов МО с несколькими подгоночными параметрами.

Ю. А. Борисов

расчет
поверхн.
потенц.
энергии

411

х 1976 N 22

04651-8*

Li_2F_2

X-13940

#976

Li_2Cl_2

Li_2Br_2

85: 68630r Calculation of the energies, geometries, and vibration frequencies of alkali halide dimers. Trugman, Stuart; Gordon, Roy G. (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(11), 4625-7 (Eng). The potential energy surfaces for a no. of alkali halide dimer mols. were calcd. from an electron gas model. These results were used to predict binding energies, equil. geometries, and vibration frequencies for M_2X_2 mols., with $\text{M} = \text{Li, Na, K, and Rb}$, and $\text{X} = \text{F, Cl, and Br}$. The accuracy of these a priori results (no adjustable parameters) is comparable to that of previous semiempirical models with several adjustable parameters.

Di. 80, Cifjarypa
Kb. mex. faeret.

(+H)

C. A. 1976. 85 n 10

B90-84-X-B

[ВФ-84-X-B]

1976

Li_2F_2
 Li_2Cl_2
 Li_2Br_2

(м.н.)

12 Д151. Вычисление энергии, геометрии и частот колебаний димеров галогенидов щелочных металлов. Trugman Stuart, Gordon Roy G. Calculation of the energies, geometries, and vibration frequencies of alkali halide dimers. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 11, 4625—4627 (англ.)

Модель электронного газа использована для вычисления частот колебаний, структурных параметров и энергии диссоциации димеров галогенидов щелочных металлов M_2X_2 с $M=Li, Na, K, Rb$; $X=F, Cl, Br$. Среднее отклонение расхождений между вычисленными и измеренными значениями частот колебаний и энергии диссоциации составляет 13%, а расхождение между вычисленными и измеренными значениями структурных параметров не превышает 5%. М. Р. Алиев

X 48-13940

ф 1976 N 12



$(LiF)_2$
 $(LiF)_3$

confign. 5.
Do, Li
кв. мет.
фрактон

X4-11491

1976

784: [69917] Alkali halide molecules: Configurations and molecular characteristics of dimers and trimers. Welch, D. O.; Lazareth, O. W.; Dienes, G. J.; Hatcher, R. D. (Brookhaven Natl. Lab., Upton, N. Y.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(2), 835-9 (Eng). The equil. configurations, equil. distances, binding energies, and vibrational frequencies have been calcd. for dimer and trimer mols. of the alkali halides. The treatment is based on an earlier application of a simple shell model to monomer mols. and crystals of the alkali halides in which all characteristic interaction parameters have been assigned. Thus, there are no adjustable parameters in the present calcn. of the dimer and trimer characteristics. The stable dimer configuration was the rhombus with the halogen-metal-halogen angle varying systematically from $>90^\circ$ to $<90^\circ$ as $(r^- - r^+)$, the difference in the ionic radii, varies from pos. to neg. [i.e., at $(r^- - r^+) \approx 0$ the configuration is essentially a perfect square, e.g., NaF , $RbCl$]. The linear dimers are unstable relative to the rhombus. The perfect hexagon was the stable configuration of the trimer mols. There is good agreement with the mea. or exptl. data available.

C. A. 1976. 84. x24

⊗
+19

$(MX)_2$ $(MX)_3$
 $M = \text{мет.}$
 $X = \text{галоген.}$

70325.1777

TC

40892

(LiF)₂

1977

9-14434

Brumer Paul, Karplus Martin.

Erratum: perturbation theory and ionic models for alkali halide systems. II. Dimers.

"J. Chem. Phys.", 1977, 66, N3, 1388

(англ.)

0839 глк .

ВИИ 822.830

ВИНИТИ

Si_3O_3 , Ge_3O_3 , Li_3F_3 (vi) 1977

Ogden J.S. B̄X-1388

Spectrochim. acta, 1977, A33, n 12, 1059-
-1066 (amer.)

Infrared frequency and intensity
patterns for isotopically substituted
 X_3Y_3 molecules: an interpretation
of the i.r. spectra of matrix-isolated
 Si_3O_3 , Ge_3O_3 and Li_3F_3 . ●

PNEUM., 1978, 19 5 260 10 (p)

Li_2F_2
4100

1977

Rupp M., Ahlrichs R.

-Окина
и. н.

Theor. Chim. Acta, 1977, ⁴⁶117,
p.

[63]

Li_2F_2



и. н.

Li1000

$Li_2 - F_2$

1977

СОЛОМОННИК В.Г.

Рукопись деп в ИИИИИИ

5дек. 1977г., 84387-77. Деп.

(ч $\bar{e}$)

с.с. $Li_2 - Cl_2 - III$

Li_2F_2

Li_2F_3

сп. ани.
колебаний,
структура
 Li

1977

Соломонович В.Т.

Автореферат
диссертации на
соискание ученого
степени к.х.н.

Ивано-во, 1977, УХТИ.

$(\text{LiF})_2$

numbers 90-16

1979

Berkowitz J.; et al.

promos.
enrich

J. Chem. Phys., 1979, 71(6)

2624-36

$$L_2 F_2$$

(omman 2609)

1973

Friedemann F. et al.

сделку.
интернет.

*J. phys. Chem. (R.D.R.), 1979,
260, N4, 693-700.*

cell. H₄-III

Li₂F₂
4883

1979

Корень Ю.М., Рымов А.Н.,
Нобольцев А.В.

Мурберг

Мурберг, Химия, 1973,
²⁰⁻²¹
24, №8, с.2201

Мур-209



Li₂F₂, Li₃F₃

Li₂F₂

Оммуек 8399 | 1979

Оммуек 16037

Соколовский В.Т

Корнеев В.С.

М.П.

Ил. груз. химии

1979, 53, 1693-97

Li_2F_2

Om 16038

1949

21 Б105. Электронографическое исследование строения молекулы Li_2F_2 . Соломоник В. Г., Краснов К. С., Гиричев Г. В., Засорин Е. З. «Ж. структур. химии», 1979, 20, № 3, 427—434

Методом газовой электронографии определены межъядерные расстояния (r_g) и средн. амплитуды колебаний пар ядер (l) в димерной молекуле Li_2F_2 : $r_g(\text{Li}-\text{F}) = 1,746 \pm 0,015$, $l(\text{Li}-\text{F}) = 0,102 \pm 0,011$, $r_g(\text{F} \cdots \text{F}) = 2,765 \pm 0,02$, $l(\text{F} \cdots \text{F}) = 0,21 \pm 0,02$ (все величины в А, $T = 1360 \text{ K}$). Сделан вывод о плоском ромбич. строении молекулы Li_2F_2 (симметрии D_{2h}). Автореферат

молекула.
структ.

x.1949/12/

Li_2F_2

DM. 16038

1979

91: 132419g Electron diffraction study of the structure of a lithium fluoride (Li_2F_2) molecule. Solomonik, V. G.; Krasnov, K. S.; Girichev, G. V.; Zasorin, E. Z. (Ivanov. Khim.-Tekh. Inst., Ivanovo, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1979, 20(3), 427-34 (Russ). The structure of gaseous Li_2F_2 was detd. by electron diffraction. The Li_2F_2 mol has planar rhombic structure (symmetry D_{2h}) with the following internuclear distances (r_g) and av. vibrational amplitude of the nuclear pair (l): $r_g(\text{Li-F}) = 1.746(15)$, $l(\text{Li-F}) = 0.102(11)$, $r_g(\text{F...F}) = 2.765(20)$, and $l(\text{F...F}) = 0.21(2)$ Å at 1360 K.

См.рук.
на р.м.

Q.4 1979 9/15/16

Li_2F_2

DM

16039

1979

6 Д247. Исследование геометрического строения, силового поля и колебательных спектров неорганических молекул с помощью ионной модели. I. Молекулы M_2X_2 ($\text{M}=\text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$; $\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{J}$). Соломо-
вник В. Г., Краснов К. С. «Ж. физ. химии», 1979, 53, № 2, 284—289

геометрич.
спектры

(+19)



9.10.79, N6

Li₂F₂

геометр.
структур,
сил, ит.



12 В227. Исследование геометрического строения, силового поля и колебательных спектров неорганических молекул с помощью ионной модели. I. Молекулы M_2X_2 ($M=Li, Na, K, Rb, Cs; X=F, Cl, Br, I$). Соломник В. Г., Краснов К. С., «Ж. физ. химии», 1979, 53, № 2, 284—289

В рамках модели поляризующихся ионов проведены расчеты равновесной конфигурации, энергии связи, коэф. силового поля и частот нормальных колебаний димерных молекул галогенидов щел. металлов. Найдено, что все рассмотренные молекулы обладают плоской, ромбич. равновесной конфигурацией (симметрии D_{2h}). Результаты расчетов находятся в колич. согласии с имеющимися эксперим. данными.

Автореферат

1979

2. 1979, N 12

Листа Spiridonov V.P., Zazorin E. Z., 1979
Modern high-temperature electron
diffraction.

Смущен.
параметр.
10th Materials Research Symposi-
um on characterization of High
temperature, Vapors and Gases.
NBS Special Publication 561.
Volume 1, 1979, 711-756.

● (у Туптура)

Li_2F_2

ссылка

Х - 9812
10226

1980

21 Б21. Неэмпирический расчет электронного строения, силового поля и частот нормальных колебаний в молекуле Li_2F_2 . Boldyrev A. I., Solomonik V. G., Zakzheskii V. G., Charkin O. P. Ab initio calculations of the structure, force field and frequencies of normal modes of Li_2F_2 . «Chem. Phys. Lett.», 1980, 73, № 1, 58—61 (англ.)

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП изучено электронное строение димера Li_2F_2 и рассчитаны силовые постоянные и частоты норм. колебаний. Расчеты проведены с использованием двух базисных наборов: $[7s3p]$ и $[9s5p]$ с двухэкспонентной группировкой $[4s2p]$ (базисы I и II). Энергия димеризации рассчитана в базисе $[10s6p]$ с трехэкспонентной группировкой валентных орбиталей $[5s3p]$ (базис III). В расчетах использованы колебательные координаты симметрии димера (группа D_{rh}), имеющей плоское ромбич. строение с $r(\text{Li}-\text{Li})=2,22$ А и $r(\text{F}-\text{F})=2,65$ А. Пригодность ис-

Кв. мех.
расчет

мол. геом;
и.и.

Х. 1980 IV 21



(41)

Li_2F_2 (расчет)

Х - 10212а

16042

м.

Использованных базисных наборов проверена путем расчета геометрич. параметров, силовой постоянной и частоты вал. кол. молекулы LiF. Представлены результаты расчетов всех частот норм. кол., силовых постоянных в координатах симметрии и натуральных координатах и амплитуды колебаний в т-рном интервале 0—2000 К. Показано, что использование указанных базисных наборов позволяет воспроизвести $r_e(\text{Li—F})$ с точностью до 0,02 А, угол $\text{FLiF} \sim 6\text{—}9^\circ$, и частот колебаний с 6—11%. Значение $r_e(\text{F—F})$ воспроизведено с гораздо меньшей точностью. Отмечено, что точность расчетов всех величин возрастает при переходе от I к II и тем более к III. Как и в случае димерной молекулы Li_2O_2 найдена небольшая ангармоничность для внеплоск. кол. симметрии B_{3n} .

С. Долин

Li_2F_2

ommuCK 9812
16092

1980

кб. рефер.
факт

93: 80653y Ab initio calculations of the structure, force field and frequencies of normal modes of lithium fluoride (Li_2F_2). Boldyrev, A. I.; Solomonik, V. G.; Zakzhevskii, V. G.; Charkin, O. P. (Inst. New Chem. Probl., 142432 Chernogolovka, USSR). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 73(1), 58-61 (Eng). Ab initio calens. of the structure, force field and frequencies of normal modes of the Li_2F_2 mol. were carried out, using the basis sets of Roos and Siegbahn (1970), and S. Huzinaga (1965) and T. H. Dunning (1965) in a double-zeta contraction. The calens. reproduce the exptl. frequencies within $\approx 10-12\%$ and $\approx 5-7\%$ resp. A small anharmonicity was found for the non-rigid out-of-plane B_{3u} vibrational mode.

X-10212a
X-10226

CA 1980 93 N 8

Оригинал 9812

1980

26091 ш

11Д145. Неэмпирические расчеты структуры, силового поля и частот нормальных колебаний Li_2F_2 . Ab initio calculations of the structure, force field and frequencies of normal modes of Li_2F_2 . Boldyrev A. I., Solomonik V. G., Zakzhevskiy V. G., Char-kin O. P. «Chem. Phys Lett.», 1980, 73, № 1, 58—61 (англ.)

По методу Хартри — Фока — Рутана с применением различных наборов базисных ф-ций вычислены полная энергия, межатомное расстояние, силовая постоянная и частота колебания молекулы Li_2F_2 . Таким же способом рассчитаны полная энергия, энергия димеризации, расстояние между атомами Li, атомами F и атомами Li и F и угол (около 93° — 96°) FLiF в молекуле Li_2F_2 . Вычислены также семь силовых постоянных в координатах симметрии, шесть силовых постоянных в естественных колебательных координатах и 6 частот колебаний с отношением к типам симметрии. Для значений т-ры 0—2000° К вычислены средние квадратичные амплитуды колебаний расстояний Li—F, Li...Li и F...F. Определена постоянная ангармоничности неплоского колебания B_{3u} . Расхождения между вычисленными и эксперим. частотами составляют 5—12%.

М. А. Ковнер

Li_2F_2
м.п.; геометрия
ф. 1980
N 11
X-10212a X-10226

Li_2F_2

Л - 10396
Ом. 16041

1980

Li_2F_2 ; см. мст

12 Д173. АВ initio исследование геометрического строения силового поля и частот нормальных колебаний молекулы Li_2F_2 . Болдырев А. И., Соломо-
ник В. Г., Зажжевский В. Г., Чаркин О. П. «Ж. неорганич. химии», 1980, 25, № 9, 2307—2312

В рамках метода Хартри — Фока — Рутана с использованием двойных экспонент базисов Роса — Зигбана ($7s3p/4s2p$) и Хузинга — Данинга ($10s6p/4s2p$) рассчитаны равновесная геометрич. конфигурация ядер, коэф. наиболее общего силового поля и частоты норм. колебаний молекулы Li_2F_2 . Исследована ангармоничность нежесткого внеплоскостного колебания типа B_{3u} .
Резюме

Ф. 1980 N 12

Li_2F_2

1980

Ом. 16041
X- 10396

кв. мех.
расчет

23 Б37. АВ initio исследование геометрического строения, силового поля и частот нормальных колебаний молекулы Li_2F_2 . Болдырев А. И., Соломо-
ник В. Г., Закжевский В. Г., Чаркин О. П.
«Ж. неорганической химии», 1980, 25, № 9, 2307—2312

В рамках метода Хартри—Фока—Рутана с использованием двух экспонентных базисов Роса—Зигбана ($7s3p/4s2p$) и Хузинаги—Данинга ($10s6p/4s2p$) рассчитаны равновесная геометрич. конфигурация ядер, коэф. наиболее общего силового поля и частоты норм. кол. молекулы Li_2F_2 . Исследована ангармоничность нежесткого вращательного колебания типа B_{3u} . Резюме

X. 1980 N 23

Li₂F₂

X - 10396

1980

Om. 16041

модель,
структ.,
данные,
исслед.
факты

193: 176154n Ab initio study of the geometric structure, field of force, and frequencies of normal vibrations of a lithium fluoride (Li_2F_2) molecule. Boldyrev, A. I.; Solomonik, V. G.; Zakzhevskii, V. G.; Charkin, O. P. (Inst. Nov. Khim. Probl., Moscow, USSR). Zh. Neorg. Khim. 1980, 25(9), 2307-12 (Russ). In the frame of the Hartree-Fock-Roothan using the double ξ base of Roos and Sregbahn (7s3p/4s2p) and Huizinaga-Daningo (10s6p/4s2p) the equil. geometric configuration of the core, the coeffs. of the most general force field and frequency of normal vibrations of the Li_2F_2 mol were calcd. The anharmonicity of the nonrigid out of plane vibrations of type B_{3u} were studied.

C.A. 1980.93 v18

$(\text{LiF})_2$

Commun 9790 | 1980

Hobza P., et al.

кв. лех.
расчет.
молекул.
структ.

Collect. Czech. Chem.
Commun., 1980, 45,
1323-30

(см. $(\text{HF})_2$; III)

Li_2F_2
 Li_2Cl_2

1980

Cu. A. No. 1.

93: 103936j Force field and vibrational amplitudes of alkali metal halide dimers using electron gas model data. Kumar, V.; Verma, U. P.; Pandey, A. N. (Dep. Phys., M. M. Coll., Modinagar, 201 204 India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1980, 18(7), 540-1 (Eng). The mol. force consts. and mean amplitudes of vibration at 298.15 and 500 K were detd. using the electron gas model data. The $L-F$ approxn. method of A. N. Pandey et al (1976,77) was applied to evaluate force consts. for alkali metal halide dimers, of the type X_2Y_2 ($\text{X} = \text{Li, Na, K, Rb}$; $\text{Y} = \text{F, Cl}$) and their mean amplitudes of vibration were also evaluated using S. J. Cyvin's (1968) secular equation. The reliability of vibrational frequencies was examd. The electron gas model data furnish satisfactory results in the case of mols. contg. lighter alkali metal atom



C. A. 1480. 93 n 10

Li_2F_2

1980

Захнеевский В. Г. и др.

ЖС. неорган. химии,
1980, 25, N 5, 1171-5

кв. мех.
расчет



См LiBF_4 | III

Li_2F_2

сборка 9332 1980
Laksherviskii V. G. et al.

Кв. мех.
растер

Chem. Phys. Lett, 1980, 40,
N 1, 147-150

См LiBeF_3 ; III

расчет molec. сг. $(\text{LiBF}_4, \text{LiAlH}_4)$ Li_2F_2 ¹⁹⁸⁰
 LiBeF_3

Закржевский В.Г., Болдирев А.И.,
Гаркин О.П., 10422-XI
м. неорганич. химии, 1980, 25, 45, 1171-1175

Расчет структуры и стабильности неметаллических
молекул LiBF_4 методом ab initio.

Рисфи, 1980, 30175-

ИД (P)

$Li_2 F_2$

1980

12 Д59. Вычисление силового поля и амплитуд колебаний димеров галогенидов щелочных металлов по модели электронного газа. Force field & vibrational amplitudes of alkali metal halide dimers using electron gas model data. Kumar V., Verma U. P., Pandey A. N. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1980, 18, № 7, 540—541 (англ.)

Выполнен расчет средних амплитуд колебаний для димеров M_2X_2 с $M=Li, Na, K, Rb$ и $X=F, Cl$. При расчете использованы значения силовых постоянных, вычисленные по модели электронного газа. Рассмотрена корреляция между значениями силовых постоянных и энергией диссоциации. М. Р. Алиев



$Li_2 Cl_2$

$Na_2 F_2, Na_2 Cl_2, K_2 F_2,$

$K_2 Cl_2, Rb_2 F_2, Rb_2 Cl_2$

сил. пост.,
ампл. пост.,

До

№ 198/18 (Д), N 12.

LiF₂

Оттиск 12/91

1981

5 Б254. Молекулярные постоянные некоторых димеров галлогенидов щелочных металлов, полученных методом кинетических постоянных. Manivannan G., Sengodan V., Srinivasacharya K. G. Molecular constants of some alkali metal halide dimers by kinetic constants method. «Z. Naturforsch.», 1981, A36, № 9, 975—979 (англ.)

Метод кинетич. постоянных использован для получения нового набора силовых постоянных молекул M_2X_2 ($M=Li, Na, K, Rb, X=F, Cl$) и Li_2Br_2 (симметрия D_{2h}). Рассчитаны также средние амплитуды колебаний молекул (при $T=0, 298,15$ и 500 K) постоянные кориолисова взаимодействия, постоянные центробежного искажения и термодинамические функции (в интервале $T-p$ 100—1000 K).

В. М. Ковба

Щел. л., т.ф;



(78)



Х. 1982, 19, N 5. $Li_2Cl_2, Li_2Br_2, Na_2F_2,$
 $Na_2Cl_2, Na_2Br_2, K_2F_2, K_2Cl_2,$

~~K₂Br₂~~, Rb₂F₂, Rb₂Cl₂;

Li₂F₂

(аммук 12/91)

1981

потенц.
постоян.,
постоян.
изотропия.
распредел.
термодин.
ф-ции

/ 95: 157051e Molecular constants of some alkali metal halide dimers by kinetic constants method. Manivannan, G.; Sengodan, V.; Srinivasacharya, K. G. (Dep. Phys., Chikkanna Gov. Arts Coll., Tiruppur, 638 602 India). *Z. Naturforsch.*, A 1981, 36A(9), 975-9 (Eng). The kinetic consts. method is employed to obtain a fresh set of potential consts. in the case of 9 X₂Y₂ type (D_{2h} symmetry) alkali metal halide dimers. The mean amplitudes of vibration, Coriolis coupling consts., centrifugal distortion consts. and thermodyn. functions are evaluated with the presently obtained potential consts. The results are briefly discussed.

Ha 05072072

(+19)

C.A. 1981, 95, N18.

Li₂Cl₂, Li₂Br₂, Li₂I₂
Na₂F₂, Na₂Cl₂, Na₂Br₂, Na₂I₂
K₂F₂, K₂Cl₂, K₂Br₂, K₂I₂
Rb₂F₂, Rb₂Cl₂, Rb₂Br₂, Rb₂I₂

Cs_2F_2 , Cs_2Cl_2 , Cs_2Br_2 , Cs_2I_2

Li_2F_2

Comm. 12061 1981.

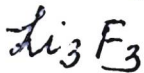
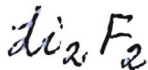
Kumar V., et al.

Сам. нот.

Средн. атом.
масса,
 D_1

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1981,
18, 540-541.

1981



кв. лнк.
расчет,
структура

(41)



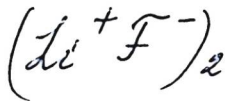
X. 1981 N 17

17 Б34. Неэмпирические исследования структурных свойств, трудно доступных экспериментальному исследованию. II. Влияние эффектов делокализации связи на молекулярные структуры некоторых кластеров фторида лития. Swepston P. N., Sellers H. L., Schäfer Lothar. Ab initio studies of structural features not easily amenable to experiment. II. The influence of bond delocalization effects on the molecular structures of some lithium fluoride clusters. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 4, 2372—2375 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО с использованием базисов гауссовых функций 4-31 ГФ для атомов F и 5—21 ГФ для атомов Li рассчитано электронное строение и проведена оптимизация геометрич. параметров линейных и циклич. форм кластеров Li_2F_2 и Li_3F_3 . Распределение заряда для различных структур кластеров исследовано в рамках анализа заселенностей МО по Малликену. Показано, что оптимизированные длины связей Li—F существенно зависят от молекулярного окружения связи Li—F. Длина связи Li—F возрастает от 1,564 Å в

мономере до 1,636 Å в линейном Li_3F_3 . В то же время длина связей между 2 мономерами LiF уменьшается от 1,709 Å в Li_2F_2 до 1,695 Å в Li_3F_3 . Линейные кластеры более стабильны, чем изогнутые цепочки LiF . Плоские циклич. формы более стабильны, чем открытые цепочки. Результаты сопоставлены с данными электростатич. моделей (ЭМ), используемых обычно для анализа структур ионных систем. Показано, что для некоторых структур данные неэмпирич. расчетов и ЭМ совпадают. Для ряда структур равновесные геометрич. параметры в неэмпирич. расчетах и ЭМ отличаются. Сделан вывод, что ЭМ ионной связи обладает существенными недостатками для колич. оптимизации молек. структур даже для тех систем, минимумы потенциальной энергии которых определяются электростатич. взаимодействиями. Основным недостатком ЭМ является пренебрежение эффектами ковалентности или делокализации связей.

И. А. Тополь



спектр

(ЭЭДР)

в манускрипте

номер 12311 1981.

Van Willigen H, et al.

J. Chem. Phys., 1981,
75 (5), 2135 - 40.

Li_2F_2

Received 1-19-14 1981

Zakzhevskii V. G. et al.

Chem. Phys. Lett., 1981,
81, N 1, 93-97.

кв. мех.
расчет
спектр
координатно-
образованная
теория

 (см. LiBF_4 , III)

Li_2F_2

Оттиски 12725 | 1981.

Закревский В.Т.

и др.

ΔE ,
координат.
параметры

Координаты, км.,
1981, ● в печати

теоретическое исследование
энергии газобразного конденсата.

Li2F2

1982

15 Б38. Электронная структура комплексных фторидов по данным *ab initio* расчетов. Болдырев А. И., Закжевский В. Г., Чаркин О. П. «Координац. химия», 1982, 8, № 4, 437—444

у

В приближении Купменса неэмпирич. методом Хартри—Фока—Рутана с использованием двухэкспонентного базиса Хузинаги—Данинга рассчитаны потенциалы ионизации комплексных фторидов Li_2F_2 , Na_2F_2 , LiBeF_3 , LiMgF_3 , NaBeF_3 , NaMgF_3 , LiBF_4 , NaBF_4 , LiAlF_4 и NaAlF_4 . Под влиянием катионов Li^+ и Na^+ вырожденные валентные и остовные уровни симметрии *e* или *t* анионов MF_3^- и MF_4^- в молекулах расщепляются на ~ 1 эВ. Показано, что энергия связи остовных электронов у мостиковых атомов фтора, имеющих больший отриц. заряд, больше, чем у концевых. Этот результат указывает, что окружение атома в молекуле может играть большую роль в определении энергии связи, чем заряд самого атома. Рассмотрен вопрос о проявлении в фото- и рентгеноэлектронных спектрах комплексных молекул $\text{L}[\text{MF}_4]$ с тетраэдрич. анионом $[\text{MF}_4]^-$ структурной нежесткости.

Автореферат


X. 1982, 19, N 15.

Li_2F_2

1982

8 Д148. Электронная структура комплексных фторидов по данным *ab initio*-расчетов. Болдырев А. И., Закжевский В. Г., Чаркин О. П. «Координац. химия», 1982, 8, № 4, 437—444

В приближении Купманса неэмпирич. методом Хартри—Фока—Рутана с использованием двухэкспонентного базиса Хузинаги—Даннинга рассчитаны потенциалы ионизации комплексных фторидов Li_2F_2 , Na_2F_2 , LiBeF_3 , LiMgF_3 , NaBeF_3 , NaMgF_3 , LiBF_4 , NaBF_4 , LiAlF_4 и NaAlF_4 . Автореферат

у;

(49) ¹⁸

ф. 1982, 18, № 8.

$(\text{LiF})_3$

ММММ 13798

1982

David Carl W.

рецензия,
суперский,
Do

J. Mol. Struct.,
1982, 87, N2, Suppl.:
Theochem, 4, N2,
219-220.
(с $(\text{LiF})_n$; III)

$(\text{LiF})_2$

Dammuck 13798 1982

David C.W.,

расчёт,
выполн.
модели,
структура.

J. Mol. Struct., 1982,
87, N2, Suppl.: "Theo-
Chem," 4, N2, 219-220

(LiF)₂ Jordan K. D., Kertx H. A. 1982.
Metal Bond and Interact.
High Temp. Syst. Emphasis
@mpykmypc, Alkali Metals. Symp. 181 Meet.
Amer. Chem. Soc., Atlanta, Ga,
March 31-Apr. 3, 1981. Washin-
gton, D.C., 1982, 377-393.
men.com.
peakyue.

($\text{Cu} \cdot \text{Li} \cdots \text{OH}_2$; III)

Li_2F_2

От 16424а" 1982

11 Д69. Ab initio исследование стабильности к деформациям линейной конфигурации молекулы Li_2F_2 . Соломоник В. Г., Озерова В. М., Болдырев А. И. «Ж. неорганич. химии», 1982, 27. № 8, 1891—1894

Методом Хартри — Фока — Рутана в двухэкспонентном базисе Хузинаги — Даннинга с учетом и без учета поляризац. ф-ций d -типа на атомах фтора рассчитаны характеристики потенц. поверхности (ПП) линейной формы димерной молекулы фторида лития $\text{Li}-\text{F}-\text{Li}-\text{F}$. Согласно расчетам линейный димер неустойчив к деформационным движениям ядер, приводящим к понижению симметрии, т. е. представляет собой седловую точку на ПП молекулы Li_2F_2 . Резюме

расчет
характер.
потенц.
поверхн.

ор. 1982, 18, № 11

Li₂F₂

Om. 16424, a "1982

97: 151044w Ab initio study of the stability of the lithium fluoride (Li₂F₂) molecule against deformations of linear configuration. Solomonik, V. G.; Ozerova, V. M.; Boldyrev, A. I. (Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Zh. Neorg. Khim.*

1982, 27(8), 1891-4. (Russ). The potential energy of linear dimeric Li₂F₂ (Li-F-Li-F) with C_{∞v} sym. was calcd. by the Hartree-Fock-Roothaan method by using Huzinaga-Dunning 2-exponent basis with and without consideration of d-type polarization functions on the F atoms. The linear dimer is unstable to deformational motion of the nuclei indicating a saddle point on the potential surface of Li₂F₂.

стабильн.
лин. $C_{\infty v}$
соединен.
структур.

(теор. расч.)

C. A. 1982, 97, N 18.

Li_2F_2

От. 16424, а"

1982

23 Б29. Ab initio исследование стабильности к де-

формациям линейной конфигурации молекулы Li_2F_2 .
Соломоник В. Г., Озерова В. М., Болды-
рев А. И. «Ж. неорган. химии», 1982, 27, № 8, 1891—
1894

ab initio
расчёт,

геометрии,
структура,
потенц. поверхность.

Методом Хартри — Фока — Рутана в двухэкспонент-
ном базисе Хузинаги — Даннинга с учетом и без учета
поляризац. ф-ций d -типа на атомах фтора рассчитаны
характеристики потенциальной поверхности (ПП) ли-
нейной формы димерной молекулы фторида лития $\text{Li}-$
 $\text{F}-\text{Li}-\text{F}$. Согласно расчетам, линейный димер неустой-
чив к деформац. движениям ядер, приводящим к по-
нижению симметрии, т. е. представляет собой седловую
точку на ПП молекулы Li_2F_2 .

Резюме

X. 1982, 19, N23

Li2F2

получено 5/II - 1982
(в перах)

В. П. Соломонович,

ab initio
расчет

Неэмпирические МО ЛКАО
расчеты внешних полей и
колебат. спектров много-
атомных теоретич. молекул

Li_2F_2

ab initio
расчет

Отчет 16053

(послана в АНХ 6 ноября 1981г.)

Соломошкин В.П., Озеро-
ва В.М. и др.,

Ab initio исследование
стабильности к диссоци-
рованию линейной
конфигурации молекулы Li_2F_2

Li₂F₂

1983

структур.
исследования,
обзор.

98: 167020s Study of the structure of molecules using electron diffraction and computational-theoretical methods. Krasnov, K. S. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). Zh. Strukt. Khim. 1983, 24(1), 3-8 (Russ). The topics reviewed with 58 refs. include: (1) high-temp. gas-phase electron diffraction of Group IVB tetrahalides, rare earth trihalides, and cyclic M₂F₂ mols (M = Li, Tl); and (2) theor. methods of mol. structure study.

(+3) ☒

C. A. 1983, 98, N 20

Лист

[ом. 18437]

1983

Соломошки В.Т.,

ab initio
расчет
свойств
полей и
колебаний.
спектров

ж. структур. химии,
1983, 24, №1, 29-38.



$(\text{LiF})_2$

1984

Modoscek M., Solmajer
T.

первый
генерал-
завис,
ab initio.
расчет

J. Am. Chem. Soc. 1984,
106 (6), 1854-6.

(cur. $(\text{LiXHn})_2$; III)

$(\text{LiF})_2$

1986

Sannigrahi A. B.,
Kar Tapas, et al.

ab initio Proc. Indian Acad.
paerem. Sci, Chem. Sci. 1986,
96 (3-4), 253-62.

(LiH)₂; III)

Li_2F_2

1988

Ramondo F.,
Bencivenni L., et al.

UK 6
campuse

Chem. Phys. 1988,
124 (2), 291-6.

●
(see. LiNaF_2 ; III)

Лиза

1989

Лапина С.Б.,

Авторизация диссертации на
соискание ученой степени
к.х.н., Ивачево, 1989.

м.п.

$(LiF)_2$

DM. 34 267

1990

Tomasello P., Von Niessen W.,

Мол. Phys. 1990, 69, N 6,
1043-1058

Электрон. Структур. Electronic structure of
lithium halide monomers
and dimers: ionization ener-
gies and electron affinities.

Лизт2

1990

Закашевский В.Г.,

Молекулярная структура.
Т; Меавузовский сборник
наукных трудов. Иванова,
1990, стр. 27-31.

U.
List.

1991

10 Б1050. Анализ поляризуемостей, потенциалов и геометрии димеров галогенидов щелочных металлов. Analysis of polarizabilities, potentials, and geometries of alkali-halide dimers / Chauhan R. S., Sharma S. C., Sharma S. B., Sharma B. S. // J. Chem. Phys.— 1991.— 95, № 6.— С. 4397—4406.— Англ.

На основе ионной модели проанализированы поляризуемости, ПТ и геометрии 20 димеров галогенидов щел. металлов M_2X_2 ($M=Li-Cs$, $X=F-I$). Поляризуемость ионов в мономерах и димерах рассчитана с учетом электростатич. ПТ соседних ионов в рамках модели Зейтца—Руффы. Полученные поляризуемости использованы для вычисления значений поляризац. энергии и вандерваальсовой диполь-дипольной энергии. Применены две формы описания отталкивательного ПТ перекрывания (модифицированный ПТ Борна—Майера и ПТ Харрисона). Полученные ПТ использованы для расчета энергий связи в мономерах и димерах, спектроскопич. постоянных мономеров, равновесных геометрий димеров и энергий димеризации. Результаты сопоставлены с имеющимися эксперим. данными. А. А. С.

М.П.

(49)

X. 1992, N 10

$(\text{LiF})_2$

1991

- 114: 254277y An electron diffraction study of the dimeric lithium fluoride molecule: structural and thermodynamic aspects. Lapshina, S. B.; Girichev, G. V. (Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1991, 32(1), 60-7 (Russ).
- The equil. parameters, harmonic force field and IR-inactive frequencies are obtained for Li_2F_2 using electron-diffraction and spectral data. The mol. forms are found of LiF vapors at 1360 ± 50 K as well as the entropy and enthalpy of the dissocn. reactions $\text{Li}_2\text{F}_2 \rightleftharpoons 2\text{LiF}$ and $3\text{Li}_2\text{F}_2 \rightleftharpoons 2\text{Li}_3\text{F}_3$.

смыслу,
до

(42) Δ

$\text{LiF}, \text{Li}_3\text{F}_3 (K_p, \Delta H)$

C.A. 1991, 114, N 26

LiF₂

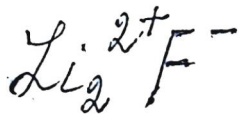
1991

6 Д55. Электронографическое исследование димерной молекулы фторида лития: структурный и термодинамические аспекты / Лапшина С. Б., Гиричев Г. В. // Ж. структур. химии.— 1991.— 32, № 1.— С. 60—67

Посредством совместного анализа электронографических и спектральных данных для молекул Li_2F_2 получены равновесные параметры, силовое поле в гармонич. приближении и частоты колебаний, неактивные в ИК-спектре. Найдены относит. содержания молекулярных форм насыщенного пара фторида лития при $T_{\text{эксп}} = 1360 \pm 50$ К и определены энтальпии и энтропии реакций $\text{Li}_2\text{F}_2 \rightleftharpoons 2\text{LiF}$ и $3\text{Li}_2\text{F}_2 \rightleftharpoons 2\text{Li}_3\text{F}_3$. Резюме

М.П.

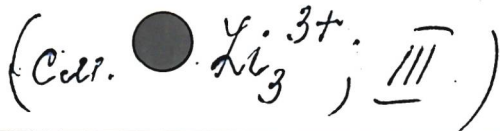
ф. 1991, № 6



1991

Shalabi A. S.

Chem. Phys. 1991. 156,
N 3. C. 359-368.



1992

Li₂F
Li₂F⁺

117: 220435v Ab initio study of superalkalis. First ionization potentials and thermodynamic stability. Rehm, Eva; Boldyrev, Alexander I.; Schleyer, Paul v R. (Inst. Org. Chem., Friedrich-Alexander Univ., 8520 Erlangen, Germany). *Inorg. Chem.* 1992, 31(23), 4834-42 (Eng). The equil. geometries and fundamental frequencies of the Li₂F⁺, Li₂F, Na₂Cl⁺, Na₂Cl, Li₂O, Li₃O⁺, Li₃O, Li₂S, Li₃S⁺, Li₃S, Na₂O, Na₃O⁺, Li₃N, Li₄N⁺, Li₄N, Li₃P, Li₄P⁺, and Li₄P species were calcd. at MP2-FULL/6-31+G*. The total energies at these geometries were calcd. at the MP4SDTQ and QCISD(T) levels with the 6-31+G*, 6-311+G*, and 6-311+G(2df) basis sets. The global min. are as follows: linear Li₂F⁺, Na₂Cl⁺, Na₂O (D_{∞h}, ¹Σ⁺); angular Li₂O, Li₂S (C_{2v}, ¹A₁) and Li₂F, Na₂Cl (C_{2v}, ²A₁); planar Li₃O⁺, Li₃S⁺, Na₃O⁺, Li₃N (D_{3h}, ¹A₁) and Li₃O, Na₃O (D_{3h}, ²A₁); pyramidal Li₃P (C_{3v}, ¹A₁) and Li₃S (C_{3v}, ²A₁); tetrahedral Li₄N⁺, Li₄P⁺ (T_d, ¹A₁) and Li₄N (T_d, ²A₁); distorted tetrahedral Li₄P (C_{2v}, ²A₁). All cationic and neutral species are stable toward loss of alkali metal cation M⁺ or alkali metal atom M, resp. All Li₂F, Na₂Cl, Li₂O, Li₃S, Na₃O, Li₃N, and Li₄P species possess lower first ionization potentials (FIP) than the Cs atom (3.9 eV) and therefore are termed "superalkalis".

неоп. рачен
опычен.
на рачен,
Vi, не рачен
Чуеви, I₂

©. A. 1992, 117, N 22

(LiF)₂

01 37795 1994

№ 6 Б1048. Неэмпирическое исследование $(\text{LiF})_2$ и $(\text{LiF})_2(\text{H}_2\text{O})$. Ab initio modeling of $(\text{LiF})_2$ and $(\text{LiF})_2(\text{H}_2\text{O})$ /Woon David E. //J. Phys. Chem. .—1994 .—98 ,№ 36 .—С. 8831—8833 .—Англ.

В приближении теории возмущения Меллера—Плессета второго порядка с использованием корреляционно-согласованного базиса Даннинга и др. исследованы $(\text{LiF})_2$ (I) и $(\text{LiF})_2(\text{H}_2\text{O})$ (II). Рассчитанное значение энергии димеризации $2\text{LiF} \rightarrow \text{I}$, равное $-61,8$ ккал/моль ($-59,9$ ккал/моль с учетом поправки на нулевые колебания), близко к эксперим. величине (-59 ккал/моль). Найдено, что циклич. структура I симметрии C_1 с почти копланарными двумя четырехчленными кольцами имеет миним. энергию и близка по геометрич. параметрам самой низкоэнергетич. конформации кластера меньшего размера $\text{LiF}(\text{H}_2\text{O})$ (III). Энергия связывания структуры II симметрии C_1 , равная $-16,7$ ккал/моль ($-14,6$ ккал/моль с учетом поправки на нулевые колебания), на 18% ниже энергии связывания аналогичной структуры III ($-20,3$ ккал/моль). Конформация II симметрии C_{2v} с энергией связывания, равной $-7,4$ ккал/моль, отвечает переходному состоянию.

Н. С.

М.П.

17

41

Х.1995, №6

$(\text{LiF})_2$
 $(\text{LiF})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

om. 37 745

1994

meop. paper

121: 213503v Ab Initio Modeling of $(\text{LiF})_2$ and $(\text{LiF})_2(\text{H}_2\text{O})$. Woon, David E. (Molecular Science Research Center, Pacific Northwest Laboratory, Richland, WA 99352 USA). *J. Phys. Chem.* 1994, 98(36), 8831-3 (Eng). Second-order Moeller-Plesset perturbation theory (MP2) and correlation-consistent basis sets were used to study the energetics and min.-energy structures of $(\text{LiF})_2$ and its complex with one water, $(\text{LiF})_2(\text{H}_2\text{O})$. The computed dimerization energy for $2\text{LiF} \rightarrow (\text{LiF})_2$ of -61.8 kcal/mol [-59.9 kcal/mol with zero-point correction (ZPC)] compares very well with the exptl. value of -59 kcal/mol. The cyclic C_1 min. structure for $(\text{LiF})_2(\text{H}_2\text{O})$ is very similar to that of $\text{LiF}(\text{H}_2\text{O})$. The binding energy for $(\text{LiF})_2(\text{H}_2\text{O})$ of -16.7 kcal/mol (-14.6 kcal/mol with ZPC) is nearly 20% smaller than the value of -20.3 kcal/mol (-17.9 kcal/mol with ZPC) for $\text{LiF}(\text{H}_2\text{O})$. A transition state with C_{2v} symmetry is also discussed. A simple electrostatic argument indicates that this configuration will remain a transition state even with an extended substrate present.

C.A. 1994, 121, N18

List 2

1995

125: 68281x **Quadruplet polarizabilities of alkali-halide clusters.** Craw, J. Simon; Hinchliffe, Alan (Dep. Chem., UMIST, Manchester, UK M60 1QD). *Electron. J. Theor. Chem. [Electronic Publication]* 1995, 1(Avail. URL: <http://ejtc.wiley.co.uk/public/papers/pdf/ejtc02.pdf>), 8-10 (Eng). The authors report ab initio calcns., at the Hartree-Fock level of theory, of the binding energies and elec. dipole polarizabilities of the linear and cyclic clusters Li_2F_2 and Na_2F_2 , and of the linear cluster K_2F_2 . Bond distances corresponding to the diat. (denoted MF) bond lengths were used, and all calcns. were done using large basis sets. The results demonstrate that four-body effects are non-negligible in calcns. of the elec. dipole polarizability for such species, with the geometries considered.

Δ

(+2) Na_2F_2 ,

K_2F_2

C.A. 1996, 125, N6

Li_3F_3 Om 37944 1995
Readington R.L.,

UK 6 J. Chem. Phys. 1995,
102(19), 7325-31.
manuscript

(cur. Li_2F_2 ; III)

LiF₂

Dm 37944

1995

123: 20742e Infrared vibrational spectra of matrix-isolated cyclic Li₂F₂, Li₃F₃, and Li₄F₄ isotopomers. Redington, Richard L. (Dep. Chem. Biochem., Texas Tech Univ., Lubbock, TX 79409 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 102(19), 7325-31 (Eng). IR spectra of the ^{6,7}Li isotopomers of the LiF species isolated in rare gas matrixes are interpreted with the input of mol. geometries and vibrational spectra computed using ab initio MO theory at the MP2/6-31G* level. The MO computations, together with IR matrix-isolation observations, support firm species assignments and vibrational assignments for the IR-active modes of the title mols. The study presents the first evidence for the existence of matrix-isolated Li₄F₄ cyclic tetramer, and resolves contradictory species/vibrational assignments for the smaller oligomers. Most of the matrix-isolated cyclic trimer and tetramer population is formed by coalescence of smaller species during the matrix deposition process or during subsequent matrix annealing/warming processes. There appears to be no evidence in the available matrix-isolation data for the existence of a matrix-stabilized Li₂F₂ linear dimer.

UK B

Mamuse

(12) 123

C. A. 1995, 123, N2

Li₃F₃, Li₄F₄

dist F₂

1996

11B162. Геометрические параметры, силовые поля, колебательные спектры, энергии изомеризации молекул $MM'F_2$ ($M, M' = Li, Na, K$): неэмпирическое исследование с учетом электронной корреляции / Слизнев В. В., Соломоник В. Г. // 1 Регион. межвуз. конф. «Актуал. пробл. химии, хим. технол. и хим. образ.»: «Химия-96», Иваново, 22—26 апр., 1996: Тез. докл.— Иваново, 1996.— С. 26—27.— Рус.

Исследования молекул $MM'F_2$ проведены методом Хартри-Фока-Рутана, теории возмущений Меллера—Плессета 2-го порядка и конфигурационного взаимодействия с включением одно- и двукратных возбуждений и с учетом поправки на квартичные возбуждения в базисах сгруппированных гауссовых функций: $Li-(9s3p1d/4s3p1d)$; $Na-(12s8p1d/6s4p1d)$; $K-(14s11p3d/9s8p3d)$; $F-(9s5p1d/4s2p1d)$. Равновесными конфигурациями молекул M_2F_2 и $MM'F_2$ являются циклические (симметрии D_{2h} и C_{2v} соответственно). Линейные

M. A.

17 (15)

X. 1997, N 112

$Na_2F_2, K_2F_2, LiNaF_2, LiKF_2, NaKF_2$

конфигурации $M-F-M'-F$ всех молекул, за исключением $M-F-K-F$, отвечают минимумам на поверхности потенциальной энергии. Их относительная энергия ($h=E_{\text{лин}}-E_{\text{цикл}}$) изменяется в пределах от 70 до 190 кДж/моль. Барьер перегруппировки из линейной структуры в циклическую в молекуле Li_2F_2 составляет всего 56 см^{-1} . Учет корреляционных эффектов приводит к удлинению теор. значений равновесных межъядерных расстояний $Li-F$ и $Na-F$ на $0,014-0,028 \text{ \AA}$ и укорочению $R_e(K-F)$ не более чем на $0,012 \text{ \AA}$; величины валентных углов изменяются не более чем на $0,5^\circ$; значения частот колебаний уменьшаются в среднем на $3,1\%$. Расчеты в обоих приближениях приводят к близким значениям величин молек. параметров. Изучены закономерности строения, силовых полей и колебательных спектров молекул $MM'F_2$. Проведен совместный анализ неэмпирических и имеющихся в лит-ре эксперим. данных о строении и спектрах рассмотренного класса соединений.

Om 38380

1996

F: Li₂F₂

P: 3

15B138. Структура димеров галогенидов щелочных металлов. Критический анализ ионных моделей и новых неэмпирических результатов. The structure of alkali halide dimers: A critical test of ionic models and new ab initio results / Topping T., Biermann S., Hoest J., Mawhorter R., Cave R. J., Szemenyei C. [Journal of Chemical Physics] // J. Chem. Phys. - 1996. - 104, N 20. - С. 8032-8042. - Англ.

РЖХ 1997

List 2

1998

cul. rocm,
cmp-pa,
Pi, ab initio
param



45

130: 7586g Ab initio study of the molecular structures, force fields, and vibrational spectra of alkali metal fluoride dimers $MM'F_2$ ($M, M' = Li, Na, K$). Solomonik, V. G.; Sliznev, V. V. (State Chemical Technological Academy, Ivanovo, Russia). *J. Struct. Chem.* 1998, 39(2), 158-168 (Eng). Consultants Bureau. Ab initio calcns. of the equil. geometrical parameters, force consts., and IR vibration frequencies and intensities of Li_2F_2 , Na_2F_2 , K_2F_2 , $LiNaF_2$, $LiKF_2$, and $NaKF_2$ are reported. The calcns. use the Hartree-Fock-Roothaan method and second-order Moeller-Plesset perturbation theory along with CI theory including singly and doubly excited configurations and corrections for quartic excitations with basis sets of grouped Gaussian functions: Li - (9s3p1d/4s3p1d), Na - (12s8p1d/6s4p1d), K - (14s11p3d/9s8p3d), F - (9s5p1d/4s2p1d). According to the results of calcns., the equil. structures of the mols. are planar cyclic structures of D_{2h} (for M_2F_2) and C_{2v} (for $MM'F_2$) symmetries. The linear configurations $M-F-M'-F$ (of $C_{\infty v}$ sym-

C. A. 1999, 130, N 1

netry) are 70–190 kJ/mol less stable than the cyclic ones; for all mols. except M–F–K–F, these configurations correspond to local min. on the potential energy surface. The role of correlation effects in ab initio calcns. of the geometry, force fields, and IR characteristics of mols. with highly polar chem. bonds is discussed. The theor. force fields of the mols. are represented in canonical form in a system of redundant natural vibrational coordinates. The force fields of $MM'F_2$ mols. are studied. The results of the ab initio calcns. are compared with the exptl. structural data and vibrational spectra available in the literature.

F: Li₂F₂

P: 3

21B1123. Неэмпирическое исследование строения, силовых полей и колебательных спектров димерных молекул фторидов щелочных металлов MM'F₂ (M, M'=Li, Na, K) / Соломоник

В. Г., Слизнев В. В. // Ж. структур. химии. - 1998. - 39, 2. - С. 196-209. - Рус.

Выполнены неэмпирические расчеты равновесных геометрических параметров, силовых постоянных, частот колебаний и интенсивностей в ИК спектрах молекул Li₂F₂, Na₂F₂, K₂F₂, LiNaF₂, LiKF₂, NaKF₂. Использованы методы Хартри-Фока-Рутана, теории возмущений Меллера-Плессета второго порядка и конфигурационного взаимодействия с включением одно- и двукратных возбуждений и с учетом поправки на квартичные возбуждения и базисы

1998

РЖХ, 1998, 121

сгруппированных гауссовых функций: Li - (9s3p1d/4s3p1d), Na - (12s8p1d/6s4p1d), K - (14s11p3d/9s8p3d), F (9s5p1d/4s2p1d). Согласно расчетам у изученных молекул равновесными являются плоские циклические структуры симметрии D[2h] (у M[2]F[2]) и C[2v] (у MM'F[2]). Линейные конфигурации M-F-M'-F (симметрии C['БЕСКОНЕЧН'-'ню']) на 70-190 кДж/моль менее стабильны, чем циклические; у всех молекул, за исключением M-F-K-F, они отвечают локальным минимумам на поверхности потенциальной энергии. На примере рассмотренных молекул обсуждена роль корреляционных эффектов в неэмпирических расчетах геометрии, силовых полей и характеристик ИК спектров молекул с высокой полярностью хим. связей. Теор. силовые поля молекул представлены в канонической форме в системе избыточных естественных колебательных координат. Изучены закономерности силовых полей молекул MM'F[2]. Результаты неэмпирических расчетов сопоставлены с имеющимися в литературе эксперим. данными о строении и колебательных спектрах рассмотренных молекул. Библ. 30.