

Gil (+ 7)

50910.4226

Ch, Ph, TC, MGU

Кв. мех. пакет

Li<sub>2</sub><sup>4+</sup>

1975

3266

Leclerc Jean-Claude. Laplace transformation trial basis functions for the  $1 \Sigma_g^+$  ground state of two-electron diatomic molecules. "Bull. Soc. chim. belg.", 1975, 84, N 5, 475-481 (англ.)

0447 г.м.к

420 421

33

ВИНИТИ

1976

Li<sub>2</sub><sup>4+</sup>Be<sub>2</sub><sup>6+</sup>Kb. Mex.  
passt

84:169868j Study of the hydrogen mol. and the dihelium dication using three- and four-parameter nonintegral nitrogen 1s basic functions. Leclerc, Jean C. (Inst. Chim., Univ. Liege, Liege, Belg.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1976, 72(4), 759-64 (Eng). Ground state energies of H<sub>2</sub> and He<sub>2</sub><sup>2+</sup> were calcd. by a CI method using numerical integration for mol. 1- and 2-electron integrals. A new 4 parameter basis function was presented as a generalization of the function of V. Guillemin and C. Zener (1929) and gave a significant improvement in energy compared with nonintegral *n* 2- and 3-parameter basis functions. The results show that at the internuclear distance the nonintegral *n* basis functions are good approxns. to the SCF energy of W. Kolos and C. C. J. Roothaan (1960). Calcs. were also performed on Li<sub>2</sub><sup>4+</sup> and Be<sub>2</sub><sup>6+</sup>.

⊕ ⊗

C.A. 1976.84.24



$Li^{n+} \cdot H_2O$

1984

9 Б1063. Влияние катиона на структуру воды и распределение в ней электронной плотности для некоторых комплексов  $M^{n+} \cdot H_2O$ . Cation influence on the structure and electron density of water in some  $Me^{n+} \cdot H_2O$  complexes. Hermansson Kersti, Olovsson Ivar, Lunell Sten. «Theor. chim. acta», 1984, 64, № 4, 265—276 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в двух-экспонентном базисе ГФ, включающем поляризационные функции, проведены расчеты моногидратов  $M^{n+} \cdot H_2O$  ( $M=Li, Be, Mg$  и  $Al$ ). Расстояния  $M-O$  фиксированы при значениях 1,85; 1,618; 2,050 и 1,85 Å соотв. для  $Li, Be, Mg$  и  $Al$ , на основе известных эксперим. и теор. данных. Геометрич. параметры  $H_2O$  оптимизированы. Согласно полученным результатам, равновесное расстояние  $O-H$  в воде монотонно растет в ряду  $Li^+ < Mg^{2+} < Be^{2+} < Al^{3+}$  от 0,9516 у  $Li^+$  до 0,9968 Å у  $Al^{3+}$  симбатно росту энергии связи  $H_2O$  с катионом. Угол  $HOH$  гидратной воды на  $\sim 1^\circ$  отличается от значения в свобод-

кометрии,  
структура

⊗  
(+)

Х. 1984, 12, 49

$Be^{n+} \cdot H_2O,$

$Mg^{n+} \cdot H_2O, Al^{n+} \cdot H_2O$

ной воде и не обнаруживает систематич. изменения в исследованном ряду комплексов. Силовые постоянные валентного колебания  $O-H$  уменьшаются при увеличении энергии связи катиона с водой. Перераспределение электронной плотности, сопровождающее изменение внутренней геометрии  $H_2O$  при комплексообразовании, значительно слабее обусловленного прямым влиянием внешнего электрич. поля. Увеличение электронной плотности приблизительно посредине связи  $M^{n+}-O$  (особенно в комплексах  $Be^{2+}$  и  $Al^{3+}$ ) при перемещении электронов от  $H$  к  $O$  вследствие комплексообразования, повышает поляризацию  $H_2O$ . Показано, что в области локализации неподеленной пары электронная плотность понижена.

Э. Герман

Y. K<sup>+</sup>  
Li<sub>2</sub>

1986

Wells B.H., Wilson S.

Результаты  
микро-  
исследований.  
Электрон.  
спектроскопия.

J. Phys. B: Atom. and  
Mol. Phys., 1986, 19,  
N1, 17-32.

(ср. H<sub>2</sub><sup>+</sup>; III)

Li<sup>2+</sup>  
Li<sub>2</sub>

1987

/ 107: 84174y Ab initio studies of collisions between lithium(1+); ions. Cooper, I. L.; Dickinson, A. S.; Sur, S. K.; Ta, C. T. (Sch. Chem., Newcastle Univ., Newcastle upon Tyne, UK NE1 7RU). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1987, 20(9), 2005-23 (Eng). SCF and CI procedures are used to calc. the potential energy curves and the nonadiabatic radial and rotational couplings for the  $\text{Li}_2^{2+}$  system. The lowest six  $1\Sigma_g$ , four  $1\Pi_g$  and one  $1\Delta_g$  states are included. The std. perturbed-stationary-state approach is employed to study collisions between  $\text{Li}^+$  ions at 10-80 keV. The calcd. charge transfer cross sections agree with the observations for  $\text{Li}^{2+}$  formation at >35 keV.

homotell-  
kpuetue



C.A. 1987, 107, N10

У. +2  
 $\text{Li}_2$

1987

Кирнос В.Н., Савсо-  
нов Б.Ф. и др.

Изв. вузов. Физ., 1987,  
30, N 8, 53-56.

л. 17.

(см.  $\text{H}_2^-$ ; III)

1999

F: Li2+

P: 3

132:42118      Theoretical Study of Two-Photon above  
Threshold Dissociation and Related Processes in Na2+  
and Li2+.      Magnier, Sylvie; Persico, Maurizio;  
Rahman, Naseem Laboratoire de Physique Moléculaire et  
des Collisions, Institut de Physique Metz      F-57078,  
Fr.      J. Phys. Chem. A, 103(50), 10691-10698  
(English) 1999      The authors present wavepacket  
dynamics simulations of above threshold dissociation  
(ATD) in Na2+ and Li2+.      The authors consider  
resonant 2-photon processes in which both the

C.A. 2000, 132

intermediate and the final state belong to the dissociative continuum. In both mol. ions ATD expts. can be planned with moderately high laser intensities. If a vibrational initial state other  $v = 0$  is selected and/or a 2-color excitation is envisaged, a wider range processes can be obsd., such as interference phenomena and Rabi oscillations between continuum states.