Таблица 1. Расчетные результаты для молекулы BF и BF+: орбитальные энергии (эВ), относительные заселенности АО (%), порядок связи, эффективные заряды (a.e.)

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | 3σ | | 1π | | 2σ | | 1σ | | P/q(A) |
| BF | -εi=7.77 | | -εi=14.50 | | -εi= 16.97 | | -εi= 35.38 | | 1.42  0.151 |
| 71/21 | 3/5 | 0/4 | 0/96 | 19/5 | 10/65 | 5/3 | 91/2 |
| C:\Users\Holic\Documents\LESQM\Двухатомные молекулы (расчёт)\B, Al, Ga, In\Гетероядерные молекулы\BF\3 sigma.jpg | | C:\Users\Holic\Documents\LESQM\Двухатомные молекулы (расчёт)\B, Al, Ga, In\Гетероядерные молекулы\BF\1 pi.jpg | | C:\Users\Holic\Documents\LESQM\Двухатомные молекулы (расчёт)\B, Al, Ga, In\Гетероядерные молекулы\BF\2 sigma.jpg | | C:\Users\Holic\Documents\LESQM\Двухатомные молекулы (расчёт)\B, Al, Ga, In\Гетероядерные молекулы\BF\1 sigma.jpg | |
| BF+ | -εi= 19.19 | | -εi= 23.50 | | -εi= 25.94 | | -εi= 44.83 | | 1.68  0.910 |
| 71/24 | 1/4 | 0/8 | 0/92 | 24/6 | 13/58 | 8/4 | 86/2 |

Таблица 2. Экспериментальные и расчетные молекулярные параметры А3В7 и (А3В7)+: Re – межатомное расстояние (Å), ωе – колебательный параметр (см-1), q(A3) – эффективный заряд по Малликену (а.е.), Р – порядок связи

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| АВ,  (AB)+ | Re | | ωе | | DFT q(A)/q(B) | | P |
| Эксп. | DFT | Эксп. | DFT | Mull | NBO | DFT |
| BF | 1.263a | 1.266 | 1402a | 1398 | 0.15 |  | 1.43 |
| BF+ | 1.208b | 1.215 | 1765b | 1684 | 0.91 |  | 1.68 |

Таблица 3. Спектроскопические параметры для молекулы с 10-ю валентными электронами

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| А3В7 | МО | -εi, a эВ | Терм | , эВ | эВ | или , | Литература |
| BF  1402 | 3σ  1π  2σ  1σ | 11.12  17.85  20.32  38.73 | 2Σ+ | 11.12 | 11.12 | 1765 | 1 |