## The Alkali Halides Dimer Data [01.04.20]

		ikali nal									
Molecule Li2F2		ciation[eV] {Li2, F2} -2.5	L[Å] 1.69		om Posit	ions <y></y>		Elo <0bj>	ectron F	osition:	s [Å] <z></z>
11272		{Li2, F2} -2.5 {Li2, F1} -2.5	1.09	<0bj> Li1 Li2	-1.137 1.137	<y> 0 0</y>	<2> 0 0	<00)> F1 Li1	-0.195	<y> 0.678 -0.678</y>	-1.036
				F1	0	0	-1.25	F1	0.195	0.678	-1.036
				F2	0	0	1.25	F1 F2	0.195 -0.195	-0.678 0.678	-1.036 1.036
								F2 F2		-0.678 0.678	1.036 1.036
			<u> </u>					Li2	0.195	-0.678	1.036
Li2Cl2		{Li2, Cl2} -2.37 {Li2, Cl1} -2.37	2.23	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>
	, , ,			Li1 Li2	-1.31 1.31	0 0	0 0	Cl1 Li1		0.929 -0.929	-1.421
				C11	0	0	-1.805	C11	0.278	0.929	-1.421
				C12	0	0	1.805	C11 C12	0.278 -0.278		-1.421 1.421
								C12 C12	-0.278 0.278	-0.929 0.929	1.421 1.421
L								Li2	0.278	-0.929	1.421
Li2Br2		{Li2, Br2} -2.27 {Li2, Br1} -2.27	2.35	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	<0bj>	· <x></x>	<y></y>	<z></z>
				Li1 Li2	-1.348 1.348	0 0	0 0	Br1 Li1		0.992 -0.992	
				Br1	0	0	-1.925	Br1	0.3	0.992	-1.496
				Br2	0	0	1.925	Br1 Br2		-0.992 0.992	1.496
								Br2 Br2	-0.3 0.3	-0.992 0.992	1.496 1.496
Li2I2	[  i1 T1)	{Li2, I2} -2.12	2.54	∠Oh-i-	٧٠.	<y></y>	<z></z>	Li2		-0.992 <y></y>	1.496 <z></z>
		{Li2, I2} -2.12 {Li2, I1} -2.12	1,4	<0bj>				<0bj>			
			1	Li1 Li2	-1.352 1.352	0 0	0 0	Li1	-0.351	1.119 -1.119	-1.593
			1	I1 I2	0 0	0 0	-2.15 2.15	I1 I1	0.351 0.351	1.119 -1.119	
			1				-	I2 I2	-0.351	1.119 -1.119	1.593 1.593
			1					12	0.351	1.119	1.593
Na2F2	{Na1, F1}	{Na2, F2} -2.42	1.99	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	Li2 <obj></obj>	0.351 <x></x>	-1.119 <y></y>	1.593 <z></z>
		{Na2, F1} -2.42	1	Na1	-1.373	0	0	F1		0.742	
			1	Na2	1.373	0	0	Na1	-0.212	-0.742	-1.218
			1	F1 F2	0 0	0 0	-1.44 1.44	F1   F1	0.212 0.212	0.742 -0.742	-1.218 -1.218
			1					F2 F2		0.742 -0.742	1.218
			1					F2	0.212	0.742	1.218
Na2C12	{Na1, Cl1}	{Na2, Cl2} -2.3	2.51	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	Na2 <obj></obj>	0.212 <x></x>	-0.742 <y></y>	1.218 <z></z>
	{Na1, Cl2}	{Na2, Cl1} -2.3	1	Na1	-1.712	0	0	C11	-0.246	0.866	-1.571
			1	Na2 Cl1	1.712	0	0 -1.835	Na1 Cl1		-0.866 0.866	
			1	C11	9	0	1.835	C11	0.246	-0.866	-1.571
			1					C12 C12	-0.246 -0.246	0.866 -0.866	1.571 1.571
			1					C12 Na2	0.246 0.246	0.866 -0.866	1.571 1.571
Na2Br2		{Na2, Br2} -2.24	2.65	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>
	{Na1, Br2}	{Na2, Br1} -2.24	1	Na1	-1.811	0	0	Br1		0.896	-1.663
			1	Na2 Br1	1.811 0	0 0	0 -1.935	Na1 Br1	-0.254 0.254	-0.896 0.896	-1.663 -1.663
			1	Br2	0	0	1.935	Br1	0.254	-0.896	-1.663
								Br2 Br2		-0.896	1.663 1.663
			1					Br2 Na2	0.254 0.254	0.896 -0.896	1.663 1.663
Na2I2		{Na2, I2} -2.09	2.88	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>
	\mai, 12}	{Na2, I1} -2.09		Na1	-1.944	0	0	I1	-0.279		
			1	Na2 I1	1.944 0	0 0	0 -2.125	Na1 I1	-0.279 0.279	-0.981 0.981	-1.819 -1.819
			1	12	0	0	2.125	I1 I2	0.279		-1.819 1.819
			1					12	-0.279	-0.981	1.819
			L	L				I2 Na2	0.279 0.279	0.981 -0.981	1.819 1.819
K2F2		{K2, F2} -2.09 {K2, F1} -2.09	2.33	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>
	· ·-, · -,	. , _,	1	K1 K2	-1.655 1.655	0 0	0 0	F1 K1	-0.236	0.835	-1.406 -1.406
			1	F1	1.655	0	-1.64	F1	0.236	-0.835 0.835	-1.406
			1	F2	0	0	1.64	F1 F2	0.236 -0.236		-1.406 1.406
			1					F2 F2		-0.835 0.835	1.406 1.406
			<u> </u>					K2	0.236	-0.835	1.406
K2C12		{K2, Cl2} -2.06 {K2, Cl1} -2.06	2.84	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>
			1	K1 K2	-1.981 1.981	0 0	0 0	Cl1 K1	-0.266 -0.266	0.942 -0.942	-1.762 -1.762
			1	Cl1	0	0	-2.035	C11	0.266	0.942	-1.762
				C12	0	0	2.035	C11 C12	0.266 -0.266		-1.762 1.762
			1					C12 C12	-0.266 0.266	-0.942 0.942	1.762 1.762
1			1					K2	0.266	-0.942	1.762

										The A	kali Hal
K2Br2		{K2, Br2} -2.02	2.97	<0bj>	<x></x>	<y></y>	< <b>Z</b> >	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>
	{K1, Br2}	{K2, Br1} -2.02		K1	-2.059	0	0	Br1	-0 276	0.976	_1 853
			1	K2	2.059	ø	ø	K1		-0.976	
			1	Br1	0	0	-2.14	Br1	0.276		-1.853
			1	Br2	0	0	2.14	Br1	0.276		-1.853
			1					Br2 Br2	-0.276 -0.276	0.976 -0.976	1.853
			1					Br2	0.276	0.976	1.853
			1					К2	0.276	-0.976	
K2I2		{K2, I2} -1.93	3.21	<0bj>	> <x></x>	<y></y>	<z></z>	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>
	{K1, I2}	{K2, I1} -1.93	1	K1	-2.24	0	0	I1	_0 287	1.019	-2.005
			1	K2	2.24	0	0	K1		-1.019	
			1	I1	0	0	-2.3	I1	0.287		-2.005
			1	12	0	0	2.3	I1		-1.019	
			1					I2		1.019	2.005
			1					I2 I2	0.287	-1.019 1.019	2.005
			1					K2	0.287	-1.019	2.005
Rb2F2	{Rb1, F1}	{Rb2, F2} -1.93	2.47	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>
	{Rb1, F2}	{Rb2, F1} -1.93	1			_	_				
			1	Rb1 Rb2	-1.778 1.778	0 0	0 0	F1 Rb1		0.878 -0.878	-1.476
			1	F1	0	0	-1.715	F1	0.248	0.878	-1.476
			1	F2	ø	ø	1.715	F1	0.248		-1.476
			1					F2	-0.248	0.878	1.476
			1					F2		-0.878	1.476
			1					F2	0.248	0.878	1.476
Rb2C12	(Ph1 C11)	{Rb2, Cl2} -1.96	12 06	∠0hi>	ν×.	۷V.	<b>.7</b> \	Rb2 <0bi>	0.248	-0.878	1.476
NUZCIZ		{Rb2, Cl2} -1.96 {Rb2, Cl1} -1.96	2.96	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	<uuj></uuj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>
	-,,	,,		Rb1	-2.076	0	0	C11	-0.276	0.979	-1.829
				Rb2	2.076	0	0	Rb1		-0.979	
				C11	0	0	-2.11	Cl1	0.276	0.979	-1.829
			1	C12	0	0	2.11	Cli	0.276		-1.829
			1					C12 C12	-0.276	0.979 -0.979	1.829 1.829
			1					C12	0.276	0.979	1.829
			1					Rb2	0.276	-0.979	
Rb2Br2	{Rb1, Br1}	{Rb2, Br2} -1.94	3.11	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>
	{Rb1, Br2}	{Rb2, Br1} -1.94	1			_	_	١			
			1	Rb1 Rb2	-2.188 2.188	0	0 0	Br1 Rb1		0.995 -0.995	-1.927
			1	Br1	0	0	-2.21	Br1	0.28	0.995	-1.927
			1	Br2	0	ø	2.21	Br1	0.28	-0.995	
			1					Br2	-0.28	0.995	1.927
			1					Br2			1.927
			1					Br2	0.28	0.995	1.927
Rb2I2	(Rh1, T1)	{Rb2, I2} -1.84	3.35	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	Rb2 <0bj>	0.28 <x></x>	-0.995 <y></y>	1.927 <z></z>
NOLIL		{Rb2, I1} -1.84	3.33	(00)/	\n/	```	\_/	(00)/	(A)	\	\_/
			1	Rb1	-2.337	0	0	I1		1.068	-2.091
			1	Rb2	2.337	0	0	Rb1		-1.068	
			1	I1 I2	0 0	0 0	-2.4 2.4	I1 I1	0.301	1.068	-2.091
			1	12	V	О	2.4	12	0.301 -0.301	-1.068 1.068	2.091
			1					12			2.091
			1					12	0.301	1.068	2.091
			<u> </u>					Rb2	0.301	-1.068	
Cs2F2		{Cs2, F2} -1.72 {Cs2, F1} -1.72	2.6	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>
	{C31, F2}	{C32, F1} -1.72	1	Cs1	-1.881	0	0	F1	-0.266	0.943	-1.541
			1	Cs2	1.881	0	0	Cs1		-0.943	
			1	F1	0	0	-1.795	F1	0.266	0.943	-1.541
			1	F2	0	0	1.795	F1	0.266		-1.541
			1					F2		0.943	1.541
								F2 F2	-0.266 0.266	-0.943 0.943	1.541
								Cs2	0.266	-0.943	
Cs2C12	{Cs1, Cl1}	{Cs2, Cl2} -1.83	3.12	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	<0bj>		<y></y>	<z></z>
		{Cs2, Cl1} -1.83		•				_			
				Cs1	-2.197	0	0	C11		1.037	
				Cs2	2.197	0	0	Cs1		1 037	
				Cl1 Cl2	0 0	0 0	-2.215 2.215	Cl1 Cl1	0.292 a 292	1.037 -1.037	-1.92 -1.92
			1	***	Ü	Ü	2.213	C12		1.037	1.92
			1					C12		2 -1.037	
								C12	0.292		1.92
C-20::2	(6-1 5 1	(6-2 8-2)	12.55	.05.2				Cs2	0.292		
Cs2Br2		{Cs2, Br2} -1.81 {Cs2, Br1} -1.81	3.26	<00J>	<x></x>	<y></y>	< <b>Z</b> >	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>
	(, 5, 2,	(, -, -, -1.01		Cs1	-2.295	0	0	Br1	-0.298	1.059	-2.014
				Cs2	2.295	0	0	Cs1	-0.298	-1.059	
			1	Br1	0	0	-2.315	Br1	0.298		-2.014
				Br2	0	0	2.315	Br1	0.298		-2.014
								Br2 Br2		1.059 -1.059	2.014
								Br2	0.298	1.059	2.014
								Cs2	0.298	-1.059	
		{Cs2, I2} -1.74	3.49	<0bj>	<x></x>	<y></y>	<z></z>	<0bj>		<y></y>	<z></z>
Cs2I2	{Cs1, I2}	{Cs2, I1} -1.74			3 45-	^	^	T-4	0.344		3 4
Cs2I2				Cs1 Cs2	-2.455 2.455	0	0 0	I1 Cs1		1.111 -1.111	
Cs2I2			I	I1	2.455	0	-2.48	I1	0.312		-2.165
Cs2I2			1		-	_					
Cs2I2				12	0	0	2.48	I1	0.312	-1.111	-2.165
Cs2I2					0	0	2.48	I1 I2		-1.111 1.111	-2.165 2.165
Cs2I2					0	0	2.48	12 12	-0.312 -0.312	1.111 -1.111	2.165 2.165
Cs2I2					0	0	2.48	12	-0.312	1.111	2.165 2.165 2.165