

Table 2 – Charge characteristics (q, charge units), bond lengths (r_{A-B} , nm), enthalpy of formation ($\Delta_f H^\circ$, kJ/mol), total energy (E_{tot} , kJ/mol), dipole moment (μ , D) in model systems sphalerite-neutral molecules

Compound	q, units charge	r_{A-B} , nm	$\Delta_f H^\circ$, kJ/mol	μ , D
Zn ₄ S ₄ -HF Zn (on all atoms) S ₃ , S ₄ , S ₆ S ₉ F	-0,01 +0,02 -0,003 -0,17	Zn ₇ -S ₉ 0,241 F ₉ -H ₁₀ 0,094 S ₉ -H ₁₀ 0,409	-1507,41	1,63
Zn ₄ S ₄ -HCl Zn S ₁ , S ₃ S ₅ , S ₇ Cl	-0,01 +0,03 -0,03 -0,20	S ₈ -H ₉ 0,550 H ₉ -Cl ₉ 0,134 Cl ₁₀ -Zn 0,241	-1343,36	2,79
Zn ₄ S ₄ -HBr Zn S ₃ S ₄ , S ₇ , S ₈ Br	-0,002 +0,01 +0,03 -0,30	S ₃ -H ₁₀ 0,170 Br ₉ -H ₁₀ 0,156 S ₃ -Zn ₅ 0,241	-1272,48	4,15
Zn ₄ S ₄ -H ₂ O Zn S ₃ , S ₂ S ₇ S ₈ O ₁₀	-0,01 +0,01 -0,003 0,02 -0,36	S ₇ -H ₉ 0,409 H ₉ -O ₁₀ 0,095 O ₁₀ -H ₁₁ 0,095 S ₇ -Zn ₆ 0,232	-1468,12	1,92
Zn ₄ S ₄ -H ₂ O ₂ Zn S ₂ , S ₄ , S ₆ S ₈ O ₁₀ , O ₁₁	-0,01 +0,02 -0,003 -0,21	S ₈ -Zn ₆ 0,241 S ₈ -H ₉ 0,408 H ₉ -O ₁₀ 0,094 O ₁₀ -O ₁₁ 0,148 O ₁₁ -H ₁₂ 0,094	-1414,69	0,15
Zn ₄ S ₄ -HNO ₂ Zn S ₁ , S ₄ , S ₈ S ₅ N ₁₁ O ₁₀ O ₁₂	-0,01 +0,02 -0,01 +1,36 -0,46 -0,55	S ₈ -H ₉ 0,757 H ₉ -O ₁₀ 0,285 O ₁₀ -N ₁₁ 0,138 N ₁₁ -O ₁₂ 0,117 S ₈ -Zn ₆ 0,241	-1307,00	2,40
Zn ₄ S ₄ -HClO ₂ Zn S ₂ S ₃ , S ₆ , S ₇ O ₁₁ Cl ₁	-0,11 +0,10 +0,12 -0,32 +0,12	Cl ₁ -O ₁₁ 0,171 O ₁₁ -H ₁₀ 0,095 H ₁₄ -S ₆ 0,596 S ₆ -Zn 0,231	-2255,01	1,78