

Na-Be

Na_2BeF_4

А. И. Фригорьев,
Ю. В. Орлов и др.

1963

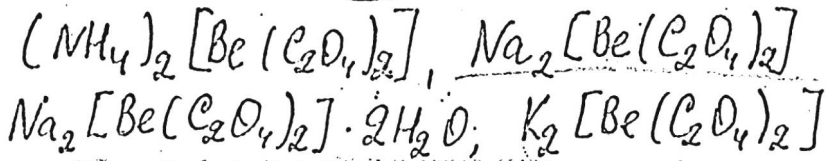
ДАН СССР 152, 11, 154

Колл. смеси фторидов
и др. чистых металлов
 Na_2BeF_4

III Li_2BeF_4

IX - 1187

1785



(Di)

Drăgulescu C., Tribunescu P.,

Menessy I.,

Rev. roumaine chim., 1965, 10, 913-916

Prax 1966, 16:5 157

10

10. 3 1926 1966

$\text{Na}_2(\text{C}_2\text{H}_5)_4\text{H}_2\text{Be}_2$

$\text{Na}_2(\text{C}_2\text{H}_5)_4\text{H}_2\text{Be}_2; [(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{BeN}(\text{C}_2\text{H}_5)_2]$

Bell v. A., Coates G. E., Emmsley J. W.

J. Chem. Soc., 1966, A, 49-52

Dimethylberyllium. Part IV. Spectroscopic
properties of some methylberyllium
compounds.

Praxair, 1966, 16 5149

5

Na-соедин.

1967

19 Б164. Исследование характера гидратации эпидимита посредством ИК-спектра поглощения и протонного магнитного резонанса. Ставицкая Г. П., Рыскин Я. И., Кольцов А. И., Шульгин Е. И., Победоносцева А. А. «Ж. структури. химии», 1967, 8, № 2, 233—238

С помощью методов ИК-спектра и ПМР установлено, что вода, входящая в состав эпидимита — $\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{BeO} \cdot 6\text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (I), представляет собой удаленные друг от друга молекулы, образующие координационные связи с атомами Be и весьма слабые H-связи с атомами O анионного каркаса. ИК-спектр воды в I отличается близостью частот асим. и сим. вал. кол. OH ($3522, 3470 \text{ см}^{-1}$), равенством интенсивностей и малой шириной (полуширина $24\text{—}27 \text{ см}^{-1}$) соответствующих полос и повышенным значением частоты деф. кол. (1662 см^{-1}). Спектр ПМР I характеризуется необычным для порош-

x. 1967. 19

ка разрешением трех компонент, не только при температуре жидкого азота, но и при комнатной. По интервалу между главными максимумами кривой поглощения ($8,7 \pm 0,2$ гс) вычислено расстояние между парами протонов — $1,59 \pm 0,01$ А. Близкое значение ($1,57 \pm 0,01$ А) получено по величине второго момента (24 ± 1 гс при -196°) без поправок на вклады, вносимые влиянием соседних молекул воды и атомов Ве и Na. Центральная компонента сигнала ПМР, частично сохраняющаяся при температуре -196° , приписана протонам неизвестной примеси (5—7% общего числа протонов). Высокая температура дегидратации I ($700—800^\circ$) объясняется наличием сильной координационной связи между молекулой воды и катионом в сочетании с жесткостью силикатного каркаса. Автореферат

$\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{BeO}$ (V)

76

1968

X4523

Vidossy M.

5

Russ. Chim. Akts, 1968, 42(2), 268-70

A study of the reaction of sodium peroxide on beryllium oxide by thermogravimetry, differential thermal analysis, and infrared absorption spectroscopy.

Na-Be

1970

(47944x) Mass-spectrometric study of the thermodynamic properties of a sodium fluoride-beryllium fluoride system. III. Interpretation of multicomponent lines and mass spectra of individual molecules. Belousov, V. I.; Sidorov, I. N. (Mosk. Gos. Univ. im. Lomonosova, Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1970, 44(10), 2495-9 (Russ). Multicomponent lines in a mass spectrum of the NaF-BeF₂ system and their interpretation are discussed. The system contains the complex mols. NaBeF₃, (NaBeF₃)₂, and Na₂BeF₄, together with those of the pure components. Z. M. Zochowski

M.C

C.A. 1971. 44.26.

На Вет₃₍₂₎ брезгин Ю. А.

1972

149

Назаренко
М. П.

Автор ~~реферата~~ диссерт. на ~~иск.~~
~~учен. степен~~ канд. хим. наук.
М.: МГУ, 1972.

1

На Вет₃₍₂₎ ●

М. П.

Na_2BeF_4

(структ)

2.1973
№3

$\gamma\text{-Na}_2\text{BeF}_4$, его кристаллическая структура при 25° и 74° и его анизотропное тепловое расширение. Deganello S. $\gamma\text{Na}_2\text{BeF}_4$, its crystal structure at 25° and 74° C and its anisotropic thermal expansion. «Z. Kristallogr.», 1972, 135, № 1—2, 18—33 (англ.; рез. нем.)

Проведено рентгенографич. (методы порошка и монокристалла, дифрактометр, λ Cu) изучение характера теплового расширения $\gamma\text{-Na}_2\text{BeF}_4$, обладающего структурным типом форстерита, в области т-р 25—140°. Параметры ромбич. решетки (при 25°); a 4,8946, b 10,9253, c 6,569 Å, $Z=4$, ф. гр. $Pbmm$. Коэф. термич. расширения вдоль трех кристаллографич. осей при т-ре 25—96° равны: α_a $4,7 \cdot 10^6$, α_b $10,6 \cdot 10^6$ и α_c $25,6 \cdot 10^6$ град⁻¹. При расширении т-рного интервала до 25—140° значения α_b и α_c почти не изменяются ($11,2 \cdot 10^6$ и $25,6 \cdot 10^6$), в то время как α_a существенно увеличивается ($7,4 \cdot 10^6$) за счет резкого аномального изменения т-рной зависимости параметра a при 120°. С целью объяснения найденных закономерностей т-рного изменения параметров принято трехмерное уточнение (МНК, анизотропное приближение) структуры при т-рах 25° ($R=0,049$ для 1495 отражений) и 74° (0,054 для 1246 отражений). Структура построена из октаэдров NaF_6 соединяющихся ребрами с образованием цепей, проходящих в направлении оси c , и тетраэдров BeF_4 соединяющихся меж-

1972

ду собой октаэдрич. цепи в направлении оси a (межатомные расстояния при t -ре 25° : Na—F 2,2526, 2,3806 Å, Be—F 1,5475; 1,5525; 1,5739 Å; при 74° : Na—F 2,2432—2,3811, Be—F 1,5269; 1,5481; 1,5761). Анализ t -рной зависимости тензора u , прямо пропорционального величине амплитуды теплового колебания атома и обратно пропорционального параметрам решетки, для атомов Na и Be не позволили объяснить экспериментально наблюдаемого характера теплового расширения. Наибольшее значение α_c объяснено тем, что структурные напряжения при нагревании снимаются гл. обр. в направлении оси c , поскольку увеличение оси b ограничено требованиями симметрии (один из двух кристаллографически независимых октаэдров располагается в центре симметрии), а расширению оси a существенно препятствует жесткий характер тетраэдров, соединяющих октаэдрич. цепи. Вследствие этого α_a характеризуется наименьшим значением. Резкое возрастание α_a при 120° предположительно обусловлено возникновением сильного потенциала отталкивания, вызванного изменением тетраэдрич. связи от конфигурации sp^3 к иной конфигурации, характеризующейся меньшей величиной орбитальной гибридизации. Поскольку плотнейшая упаковка этому препятствует, начинается фазовое превращение, которое завершается при 187° образованием монокл. модификации.

NaBeF₃(г) Ширяконов В.П., Бродкин В.В., 1972
969 Бредкин Ю.А.

М.П.
Назаренко

Журн структурн. химии, 1972, 13,
321.

2

NaBeF₃(газ) ●

М.П.

Na Be F₃ ray

1974

Giricheva N. I. et al.

u. n.

Zh. Fiz. Chim. 1974

48 (6) 1611-12 (Russ)

(cu Li Be F₃; III)

NaBeF_3 (2) Kana'an A.S., Mauge R.H., 1976
2918 Margrave J.L.

Газаренко
M.N.
J. Chem. Soc. Faraday Trans. II,
1976, ~~Part 2~~, 72, 1991.

3 NaBeF_3 (раз) ● M.N.

NaBeH_3

LiMgH_3

кв. мех.
расчет
структуры,
стабильн.

(+1) \square

ж. 1981. №5

56

[Оттиск 16402] 1980

5 Б56. Ab initio исследование структуры и стабильности комплексных гидридов типа $\text{L}[\text{MH}_3]$. Суханов Л. П., Болдырев А. И., Чаркин О. П. «Координац. химия», 1980, 6, № 11, 1631—1640

В рамках неэмпирич. метода Хартри — Фока — Рутана с использованием двухэкспонентного базиса Ро-са — Зигбана выполнены расчеты структуры, стабильности, участков потенциальных поверхностей (ПП) комплексных гидридов NaBeH_3 и LiMgH_3 . Экстремальные точки ПП уточнялись с более полным и гибким двухэкспонентным базисом Хузинга — Даннинга, расширенным поляризац. ф-циями. Показано, что NaBeH_3 , LiMgH_3 , как и ранее изученный комплекс LiBeH_3 , принадлежит к числу «глобально» жестких, но «локально» нежестких молек. систем; причем в ряду LiBeH_3 — NaBeH_3 миграц. барьеры на пути смещений внешнесферного катиона относительно аниона

уменьшаются, а в ряду LiBeH_3 — LiMgH_3 — увеличиваются. Стмечается корреляция между деформацией ядерного остова аниона и поляризацией его электронной структуры под влиянием катиона. Исследуется природа хим. связи в комплексах LMH_3 на основе анализа состава локаль. связанных МО. Обсуждаются вопросы энергетич. и кинетич. стабильности гидридов LMH_3 к различным видам мономолек. распада.

Автореферат

... вилл
, 71),
... те-

рас

Na_n [BeM_{k+n}]

1981

Na_n [BeF_{k+n}] Болдырев А. У.,
и др.

Мез. докч. 14-20 Всес.

(кв. мех.
расчѣт).

Чураевского совещ. по
жилищн. комплек. совещ.
1981. Ч. 2, Уварово, 1981,
558-559. ●

(ссыл. Lin) [BeM_{k+n}]; III).

BeNa⁺

[Commecca 11506] 1981.

Laurenzi B. J.

paper
(Do)

J. Chem. Phys., 1981,
74 (3), 1840-51.

На ВетН
На ВетНЗ

1981

Суржанов Н. Ф. и др.

Изв. Докл. 14²⁰ Всес. Чу-
гаевского совещ. по ди-
алектико-логическому комплексу сведений,
1981, Ч. 2. Иваново, 1981,

● 653 - 654.

(см. ЛиН; III)

шам; V;
см. по ст,
кв. лек.
разреш

На ВетЗ

Коммуна 12725 / 1981.

Закревский В.Г.

1987.

(Е) расст,
географ.
карта

Коржунев, Ж.А.
1981, в печати

Международная географическая конференция
"Географическая картография в СССР" -
1981

Na Be F₃ (зимнее 1974/1981)

Zakharovskii V.G.

et al.

кв. мех.
растёт
энергии
комплексо-
образования
геометрии

Sov. Phys. Lett.,
1981, 81, N1, 93-97.

(●
ссыл. LiBF₄; III)

Na(BeM_{k+1}) (Om. 16406) 1982

k=2,3 Boldyrev A.I.,
Sukhanov L.P.,

У,
морен.,
расчун.,
коорд. хим. 1982,
8 (4), 430-436.

сш. д. б. б. 3, III (сш. (MH_{k+1})⁻; III)

NaBeH₃ [Om. 16406] 1982.

Болдосрев А.И. и др.

у Координаты. Железя,
1982, 8, N 4, 430-436.

●
(см. LiBeH₃; III)

NaBeF_3

1982

теорет.
расчет.
Г.

Boldyrev A. I., Zakzhe-
skii V. G. et al.

Koord. khim. 1982,
8 (4), 437-444.

(сер. LiF_2^- ; III)

Na Be F_{k+1}

1982

расчёт,
помощь,
структ.,

Клеemannко Н.И., Зак-
шевский В.Т., Чапкин О.П.

Координат. химия, 1982,
8, №7, 903-912.

E

● (сер. Li F_k)₂; III

На ВетНЗ
На ВетНЧ

1984

расчет

Ларкин В. П.,
Зюбчик А. С. и др.
Тр. Моск. хим.-технол.
ин-та, 1984, № 134,
13-26

(ссыл. на H_2 \pm ; III)

LiBeM₃

1984

Суканов Л. П., Болды-
рев А. У.

расчет
смы.
носье.

Ис. Физ. Земли, 1984,

58, N3, 654-660.

(см. LiBeM₃; III)

Nabe (NH_2)₃

(OM 29339) 1988

теорет.
практич.
эксперим.
параллельно.

Armstrong D. R.,
Benham H. L., et al:
J. Mol. Struct. Theo-
chem., 1988, 165,
● N1-2, 65-86.

BeNa⁺

(DM 32488)

1989

Pyykko P.,

Mol. Phys. 1989, 67, N4,
871-878.

ab initio
program

Ab initio study of bonding
trends among the 14-electron
diatomic systems: from
B₂⁴⁻ to F₂⁴⁺ ●

$\text{Na}^+ \text{BeF}_3$

$\text{Na}^+ \text{BeF}_3$

1991
Ramondo F., Bencivenni L;
et al.,

смагунт,
снрхрррр

Chem. Phys. 1991,
158 (1), 41-57

(all.

● BF_4^- ; III)

BeNa

[Un. 37214]

1992

BeNa⁻

Bauschlicher Ch. W., Jr.,
Stephen R. Langhoff et al.,

J. Chem. Phys., 1992, 96(2),
Ae, 1240 - 1247.

The Theoretical study of the
BeLi, BeNa, MgLi, MgNa, and

Albe molecules and their negative
ions.

Nabe

DM: 37773

1994

D:

және құрамы,

негізі

қазіргі

Soldyrev A.I., Gonzalez N.,
Simons J.,

J. Phys. Chem., 1994,

98, N40, 99 ● 31-9944

1995

F: NaBeH₃

P: 3

10B1117. Спектроскопические и электрооптические проявления внутренних вращений в комплексных молекулах L[MX[3]] / Романец А. В., Суханов Л. П. // Препр. / Рос. науч. центр "Курчат. ин-т" (Москва). - 1995. - N 5953/12. - С. 1-19. - Рус.; рез. Англ.

На основе рассчитанных неэмпирических поверхностей потенциальной энергии и функций дипольных моментов с помощью метода конечных элементов исследованы спектроскопические и электрооптические проявления внутримолекулярных вращений в LiPO[3], LiBeH[3] и NaBeH[3]. Доступные для колебательной спектроскопии высокого

РЖХ 1997

разрешения туннельные расщепления уровней энергии с номером n возникают у исследованных молекул лишь при $n=10$. Показано, что внутренние вращения в молекулах способны резко уменьшить их полярность на колебательно возбужденных уровнях, достаточно далеких от вершины потенциального барьера внутримолекулярных перегруппировок. Обсуждены трудности эксперим. наблюдения предсказанного электрооптического эффекта структурной нежесткости в рассмотренных молекулах.

Na BeF, NaBeCl, NaBeF

1998

Charkin D.P. et al.,

смп-ра,
группе
гидрог.

Di, меорем-
на ссм

Zh. Neorg. Khim. 1998,
43(3), 474-487

(All. Libet; III)