

Nan

V. 5460

4966

Ei (He I, Li, II, BeIII, BIV, CV, NVI, OVII, FVIII
NeIX, NaX, MgXI, AlXII)

Kelly R.L., Booth R.G.

J. Opt. Soc., American, 1966, 56, N 11, 1639

Some term values in the helium isoelectronic
sequence.

PJK., 1967 6D192

J.

Na_x

1967

10 Б71. Ионизационные потенциалы ассоциированных атомов натрия. Robbins E. J., Leckenby R. E., Willis P. The ionization potentials of clustered sodium atoms. «Advances Phys.», 1967, 16, № 64, 739—744 (англ.)

(J.)

Описан метод получения ассоциатов атомов Na (Na₂—Na₈) в газовой фазе, заключающийся в том, что ток Ar, проходящий над кипящим Na, пропускается через маленькое сопло в вакуумную камеру. Вследствие адиабатичности процесса происходит быстрое охлаждение пара и гомогенное нуклеирование, приводящее к образованию

Л. 1968. 10

молекулярного пучка с сверхравновесным содержанием ассоциатов Na. Этот пучок ионизируется УФ-светом и анализируется с помощью масс-спектрометра. В основном пучок состоит из атомов Na и диатомных группировок, а также ассоциатов Na_3 , Na_4 и т. д. в малых количествах. Путем изменения длины волны ионизирующего УФ-света определены пороговые значения длин волн и рассчитаны потенциалы ионизации ассоциатов, которые составляют: Na_2 4,9, Na_3 3,9, Na_4 4,2, Na_5 3,9—4,3, Na_6 4,05—4,35, Na_7 3,9—4,15 и Na_8 4,0 эв. Ионизационный потенциал Na_8 близок по величине к рассчитанному из данных по работе выхода значению энергии ионизации капли металла такого же размера (радиус ~ 4 А), из чего следует, что даже малые ассоциаты Na обладают свойствами металла. Ширина порога фотоионизации ассоциатов из 5, 6 и 7 атомов Na существенно выше, чем в случае других ассоциатов, что может быть связано с существованием нескольких конфигураций.

Ю. В. Киссин

Na_n^+

1967

2 Д49. Потенциалы ионизации групп атомов натрия. Robbins E. J., Leckenby R. E., Willis P. The ionization potentials of clustered sodium atoms. «Advances Phys.», 1967, 16, № 64, 739—744 (англ.)

(7)

Измерены потенциалы ионизации (ПИ) небольших групп атомов Na, возникающих при адиабатич. истечении паров Na из камеры, нагретой до 900°C (давление паров ~ 1 атм), в вакуум через канал диаметром и длиной $2,5 \cdot 10^{-3}$ см. Анализ состава истекающего газа производился с помощью масс-спектрометра с ионизацией электронами или УФ-светом. Величины ПИ (в вольтах) измеренные по пороговой энергии квантов УФ-света, соответствующей появлению ионов Na_n^+ в масс-спектре, найдены равными для $n=1-8$; 5,12; 4,9; 3,9; 4,2; 3,9—4,3; 4,05—4,35; 3,9—4,15; 4,0. Величина ПИ Na_8 , равная 4,0 в,

09.1968. 2Д

выше значения работы выхода Φ электрона в металлич. Na (2,3 э). Показано, что эта разница может быть связана с малым размером Na_8 , тогда как Φ измеряется для плоской поверхности металла. Из полученных данных следует, что Na_3 играет существенную роль в процессе конденсации паров Na. Этому наблюдению противоречит теоретич. вывод Тейлора и др. (Taylor H. S. et al., J. Chem. Phys., 1933, 1, 68), согласно которому Na_2 конденсируется сразу в Na_4 . Отмечена расплывчатость порога фотоионизации $\text{Na}_5, \text{Na}_6, \text{Na}_7$, указывающая, возможно, на образование различных наборов конфигураций атомов в группах этого состава. Резкость порога для Na_8 указывает с этой точки зрения на наличие одной формы группы вероятно с кубич. симметрией.

В. Е. Скурат

Li_3^+ ; Li_4^+ ; H_3 ; H_3^+ (по окисл. кривым, D_3 , I) 1973
 Na_4 (по м.п., расчёт)

Pickup B.T. 7716

Proc. Roy. Soc. London, 1973, A333, N1532
69-87 (англ.)

The symmetric group and the method
of diatomics in molecules:
an application to small lithium
clusters.

Pickup, 1973, 17521

ЕСТР Ф. Н.

50610.2002

Ph, TC, Ch

(Na)_n кластер

40534

1975

* 4-8970

Baetzold R.C., Mack R.E. Calculated properties of CuCl and Na clusters.

"Inorg. Chem.", 1975, 14, N 3, 686-689

(Ин. связи, Т, геометр) (см. (CuCl)_n, III)

(англ.) 0382 пик

353 355 374

ВИНИТИ

Na_n

Bep-9284-X

1975

$n = 2, 3, 4, 5, 6$

168775u Electronic structure of small clusters of sodium.
Gelb, A.; Jordan, K. D.; Silbey, R. (Dep. Chem., Massachusetts
Inst. Technol., Cambridge, Mass.). *Chem. Phys.* 1975, 9(1-2),
175-82 (Eng). By using the diatomics-in-mols. approach (e.g.,
B. T. Pickup, 1973), formulas were derived for the energies of
the various states of the mols. Na_n ($n = 3, 4, 5, \text{ or } 6$). The lowest
potential-energy surfaces were calcd. numerically for Na_n ($n = 2,$
4, 5, or 6). Numerical values were calcd. for the total binding
energies (E_B) and the atomization energies (E_B/n) (neglecting the
zero-point energy) for the most stable structures of Na_n ($n = 2,$
3, 4, 5, or 6).

кв. кл. х.
фактум

C.A. 1975. 83 N20

3 Б52. Электронное строение малых кластеров натрия. Gelb A., Jordan K. D., Silbey R. The electronic structure of small clusters of sodium. «Chem. Phys.», 1975, 9, № 1—2, 175—182 (англ.)

Метод двухатомных фрагментов в молекуле использован для расчета низших потенциальных Пв малых кластеров Na_n , для различного числа n и разных геометрий кластеров. Зависимости кулоновского и обменного интегралов от расстояния получены из эксперим. данных для Na_2 . Расчеты проведены для $n=2-6$. Результаты для Na_4 близки к полученным ранее для Li_4 , но предсказывают разную геометрию кластеров. Приведены значения энергий связи и энергий атомизации для наиболее стабильных структур в зависимости от n . Полная энергия связи растет с n , энергия атомизации растет, осциллируя: кластеры с четными n более стабильны, чем с нечетными $(n+1)$. Значение энтальпии атомизации оценено для Na_4 в 44 ккал/моль (эксперим. значение — 41,5 ккал/моль). Отмечено, что для рассмотренных кластеров наиболее стабильными не всегда оказываются наиболее плотно упакованные структуры.

Л. И. Ястребов

На_n

Электр.
Строение

X1976N3

1975

XI-4826-81
699

ВХ-549

1976

Li_x, Na_x крист. (красперт).

Борисов Ю.А.;

Chem. Phys. Lett. 1976, 44(1), 17-19.

The calculation of clusters of 10
alkali metals by the density func-

1976

Нах (пары)

11 Д358. Спектр электронов, испускаемых при возбуждении автоионизационных уровней натрия электронами с энергией 500 эв. Ottley T. W., Ross K. J. Ejected electron spectrum of sodium autoionizing levels obtained by electron impact excitation at 500 eV incident energy. «Phys. Lett.», 1976, A 56, № 4, 270—272 (англ.)

Приведены предварительные результаты исследования спектра электронов, испускаемых при возбуждении паров натрия электронами с энергией 500 эв. Выполнено сравнение спектра с вакуумным УФ-спектром поглощения натриевых паров. В спектре эжектированных электронов обнаружено 9 переходов, не наблюдающихся в поглощении. В отличие от других щелочных металлов, интенсивность некоторых из этих переходов сравнима с интенсивностью сильных переходов в спектре поглощения. Большинство из них расположено в той области спектра, где отсутствуют интенсивные оптич. переходы. Библи. 5.

В. М. Шен
М. И. Т.

Ф. 1976 № 11

1977

Na(n)

Torrini M.

Proc. 7th Int. Vac. Congr.
and 3rd Int. Conf. Solid
Surfaces Int. Union Vac.
Sci., Techn. and Appl.,
Vienna, 1977, 505-8

y

Cue Li(n) ; III

1978

12 Б98. Кластеры из атомов металлов. IV. Пороги фотоионизации и спектры многофотонной ионизации молекул щелочных металлов. Hermann André, Leutwyler Samuel, Schumacher Ernst, Wöste Ludger. On Metal-Atom Clusters IV. Photoionization Thresholds and Multiphoton Ionization Spectra of Alkali-Metal Molecules. «Helv. chim. acta», 1978, 61, № 1, 453—487 (англ.)

На установке, состоящей из источника молек. пучка атомов щел. металлов, ионизац. камеры, квадрупольного масс-спектрометра и комплекса источников фотонов (ртутная лампа мощностью 1 квт, лазер на красителях и лазер на ионах инертных газов), исследована фотоионизация кластеров из атомов щел. металлов. Методом расширения паров щел. металлов в вакууме через сверхзвуковое сопло получены кластеры $Na_n (n \leq 16)$, $K_n (n \leq 12)$ и $Na_n K_m (n+m \leq 16)$, о чем свидетельствуют фотоионизац. масс-спектры продуктов расширения, измеренные в режиме однофотонной широкополосной фотоионизации. Измерены кривые эффективности фотоионизации (КЭФ) этих кластеров. Измерены также кривые эффективности ионизации (КЭИ) электронным ударом кластеров Na_n с образованием $Na_m^+ (m=1-3)$. КЭИ показывают, что при электрои-

$Na_{(n)}$

$K_{(n)}$

$Na_{(n)}K_{(n)}$
(кластеры)

фотоионизация

(42) ☒

2, 1978, N 12

ном ударе происходит сильная фрагментация кластеров больших размеров. Из КЭФ определены Пт ионизации (ПИ) кластеров из Na и K. Установлено, что ПИ монотонно убывают от $4,934 \pm 0,011$ до $3,5 \pm 0,1$ при изменении n от 2 до 14 для Na и от $4,05 \pm 0,05$ до $3,4 \pm 0,1$ при изменении n от 2 до 8 для K. Для $n \leq 8$ у кластеров с четным n , ПИ больше, чем у соседних кластеров с нечетным n , что указывает на меньшую энергию связи у неспаренных электронов. ПИ смешанных кластеров $Na_n K_m$ связаны простым соотношением с ПИ(Na_n) и ПИ(K_m): $ПИ(Na_n K_m) = [n \cdot ПИ(Na_{n+m}) + m \cdot ПИ(K_{n+m})] / (n+m)$. Измерены спектры двухфотонной ионизации при возбуждении лазером на красителях с ионизацией Ag^+ (Kr^+) лазером или ртутной лампой. Измерены зависимости эффективности двухфотонной ионизации от мощности как возбуждающего, так и ионизирующего излучений при различ. длинах волн возбуждения и ионизации. На основе этих зависимостей установлена фотокинетич. модель процесса ионизации. Измерены КЭФ (двухфотонной) Na_3 и K_2 по отношению к изменению частоты ионизирующих фотонов. Полученные кривые имеют ярко выраженную автоионизационную структуру, наложенную на слабый континуум. Методом двухфотонной ионизации с большой точностью определен ПИ K_2 , равный $4,060 \pm 0,0005$ эв.

1978

Na_x

K_x

Na_xK_y

x ≤ 16

x + y ≤ 6

88: 197842x Preparation and photoionization potentials of molecules of sodium, potassium, and mixed atoms. Herrmann, A.; Schumacher, E.; Woeste, L. (Inst. Inorg. Phys. Chem., Univ. Bern, Bern, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(5), 2327-36 (Eng). In supersonic nozzle beams of Na, K, and Na/K mol. aggregates M_x were investigated by several techniques based on mass spectrometry. By electron impact ionization with energy of 20 eV clusters with x > 4 are not observable. Photoionization near the threshold allows identification of Na_x, x ≤ 16, K_x, x ≤ 12, and Na_xK_y, x + y ≤ 6. Single photon ionization thresholds for Na_x, x ≤ 14 are given, this being the hitherto longest contiguous series of any property as a function of cluster size. For K_x, x ≤ 8 and for 8 Na/K mixed clusters PI thresholds are similarly detd. Very accurate two photon photoionization thresholds for Na₂ and K₂ have been obtained. Theor. models of models of metal clusters from recent publications are not able to adequately interpret the electronic properties of these particles as reflected by the ionization potentials.

(+2) ~~⊗~~



C.A. 1978, 82, N2E

Näin)

1978

Ражер и саммелус

Nature, 1978, 274, N 5666, 17-18

См. прим.

ганное

с.л. Linn) -

статья 8814

1979

Na (n)

n = 2 ÷ 8

расчет
равнов.
геометрии

4 Д196. Вычисление равновесных геометрий и энергий ионизации натриевых кластеров, вплоть до Na_8 . Calculation of equilibrium geometries and ionization energies of sodium clusters up to Na_8 . Flad Jürgen, Stoll Hermann, Preuss Heinz Werner. «J. Chem. Phys.»; 1979, 71, № 7, 3042—3052 (англ.)

Комбинация метода самосогласованного поля, основанного на схеме псевдопотенциала, для расчета хартри-фоковского вклада в энергию и метода функционала плотности для оценки энергии корреляции использована для определения равновесных геометрий и потенциалов ионизации (ПИ) кластеров Na_n , $n=2-8$. Полученные данные для трех- и четырехатомных кластеров согласуются с результатами расчета методом конфигурац. взаимодействия. Общая черта всех найденных структур — отсутствие подобия с фрагментами решетки металлич. Na. Вычисленные ПИ кластеров с равновесной структурой, включающей наибольшее число единиц Na_2 , хорошо согласуются с экспериментальными ПИ и воспроизводят наблюдаемое альтернирование ПИ при изменении n .

А. Ф. Шестаков

7.1980 №4

Commun 8814

1973

Na_n

$n \leq 8$

fractal.
concepts,
(9)

91: 181829z Calculation of equilibrium geometries and ionization energies of sodium clusters up to Na_8 . Flad, Juergen; Stoll, Hermann; Preuss, Heinzwerner (Inst. Theor. Chem., Univ. Stuttgart, 7000 Stuttgart, 80 Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1979, 71(7), 3042-52 (Eng). Using a combination of 2 methods, a pseudopotential scheme and a d-functional approxn. for the correlation energy, equil. geometries of clusters Na_n , $n \leq 8$ were studied. The structures of small Na clusters do not show any resemblance to the metallic lattice. Exptl. ionization energies can be reproduced with a max. error of 3%; the alternancy in their dependence on n is described appropriately and is explained by means of structures composed of Na_2 units.



C.A. 1979, 91, N22

№ 8

оттиски 8844 1979

№ 7 Б799. Расчет равновесных геометрий и энергий ионизации кластеров натрия вплоть до Na_8 . Flad Iürgen, Stoll Hermann, Preuss Heinz Werner. Calculation of equilibrium geometries and ionization energies of sodium clusters up to Na_8 . «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 7, 3042—3052 (англ.)

В рамках метода локального модельного псевдопотенциала с использованием приближения функционала локальной спиновой плотности для учета корреляц. эффектов исследовано электронное строение и проведена оптимизация равновесных геометрич. параметров кластеров Na_n с $n=2-8$. Полученные геометрич. структуры

расчет
равнов.
геометрии
э. строения.

ган.

Л. 1980 № 4

кластеров Na_n практически никак не связаны с структурой крист. Na . Характерным св-вом малых кластеров является наличие подсистем Na_2 . В больших кластерах, начиная с кластера Na_8 , подсистемы Na_2 более не являются стабильными. С ростом числа атомов в кластере растет энергия связи (ЭС), приходящаяся на один атом; в кластере Na_2 ЭС составляет 27%, а в кластере Na_8 — 38% от значения ЭС в кристалле. Расчеты энергий ионизации (ЭИ) кластеров показали, что ЭИ зависят от структуры и размеров кластеров. С ростом n ЭИ уменьшается. В Na_2 ЭИ превышает на 79%, а в Na_{14} — ЭИ превышает на 27% значение работы выхода в металле. Сравнение ЭИ с эксперим. данными показало, что наилучшее согласие между теорией и экспериментом достигается для кластеров со структурами, соответствующими максим. числу подсистем Na_2 . Проанализированы различные возможности эксперим. обнаружения изомеров малых кластеров Na .

И. А. Тополь

Na(n)

$n \sim 30$

миллиметров.
спектроскопия

1979

V) 2 Д449. Миллиметровая спектроскопия гигантских атомов. Millimeter spectroscopy in giant atoms. Goy P., Fabre C., Haroche S., Gross M., Raimond J. M. «4th Int. Conf. Infrared and Millimeter Waves and their Appl., Miami Beach, Fla, 1979. Conf. Dig.» New York, N. Y., 1979. 259—260 (англ.)

Рассмотрены особенности исследования атомов в ридберговских состояниях. При значении главного квантового числа $n \sim 30$ переходы таких атомов попадают в миллиметровую область, а атомы имеют размеры $\sim 10 \text{ \AA}$, что определяет большую интенсивность таких переходов. Атомы легко ионизируются в электрич. полях напряженностью $\sim 500 \text{ в/см}$, что позволяет достаточно просто детектировать их по ионному току. При-

ф. 1980. № 12

ведено описание установки и результатов экспериментов по исследованию атомов Na в ридберговских состояниях (переходы лежат в области 50—310 Гц). Переходы между ридберговскими состояниями атомов могут быть использованы в качестве вторичных эталонов частоты в миллиметровой области, кроме того, такие атомы могут служить активной средой для микроволн. усилителей и нелинейных приемников микроволн. излучения.

В. В. Белякова

Оттиск. 8144

1979

12 Д334. Изоляция в матрице атомов и молекул, образующихся в сверхзвуковой струе паров натрия. Hofmann Manfred, Leutwyler Samuel, Schulze Wilfried. Matrix isolation/aggregation of sodium atoms and molecules formed in a supersonic nozzle beam. «Chem. Phys.», 1979, 40, № 1—2, 145—152 (англ.)

В области 400—800 нм получены спектры поглощения атомов Na и агрегатов Na_k ($k=2, 3, 4$), осажденных в Kr-матрицу из сверхзвуковой струи паров Na при $t \approx 4^\circ K$. Концентрация агрегатов Na_k в матрице изменялась в пределах $1/150—1/30\,000$. Полосы, обнаруженные в областях (в нм): 590, 655 и 473 отнесены к переходам в атомах Na и системам $X \rightarrow A$ и $X \rightarrow B$ в молекулах Na_2 соответственно. Хорошо согласуются со спектрами поглощения газообразных молекул Na_3 и Na_4 полосы в области 630 и 780 нм. Отмечены преимущества совмещения методик масс-спектрометрии и спектроскопии поглощения в исследованиях молекул, осаждаемых в матрицу из сверхзвуковой струи. Библ. 18. М. Т. А.

Na₄
Na₂
Na₃
Na(k)
(Di)



Р. 1979, 1512

Дтмжк 8310

1979

Na_n

(кластеры)

(спектр в матрице)

22 Б180. Матричные оптические спектры молекул натрия, содержащих от двух до четырех атомов. Ozin G., Huber H. The matrix optical spectra of sodium molecules containing from two to four atoms. «Inorg. Chem.», 1979, 18, № 5, 1402—1406 (англ.)

Методом матричной электрошей спектроскопии (200—900 нм) изучено образование кластеров Na₂₋₄ в зависимости от отношения M/A и в процессе отжига исходных Kr и Xe матриц. На основании выявленных спектральных тенденций и сопоставления с результатами аналогичных экспериментов с атомами Ag проведено отнесение полос поглощения. По крайней мере до стадии образования кластеров Na₄ при монохроматич. облучении в узком интервале (570 нм, 8 нм) обнаружена эффективная фотоагрегация. Обсуждены характер связывания и строение многоядерных молекул Na и др. металлов.

О. Г. Гаркуша

2.1979, 122

Наз

Витмиш 8310

1943

12 Д333. Оптические спектры находящихся в матрице молекул натрия, содержащих от 2 до 4 атомов. Ozine Geoffrey A., Huber Helmut. The matrix optical spectra of sodium molecules containing from two to four atoms. «Inorg. Chem.», 1979, 18, № 5, 1402—1406 (англ.)

В области 200—900 нм исследованы спектры поглощения матриц, полученных путем совместной конденсации паров Na с Kr или Xe на подложку из NaCl при $t_{ре}$ 10—12° K. Изучены зависимости спектров от относит. конц-ии атомов Na в матрице и проведено соотнесение отдельных деталей спектров с поглощением света в молекулах $Na_{2,3,4}$. Сделан вывод, что молекула Na₃ является химически реальным связанным образованием, а не просто трехатомным ван-дер-ваальсовым аддуктом. Подробно обсуждена возможная геометрич. структура этой молекулы. Библ. 46. С. Л.

геометрия
молекулы

Ф. 1049 N 12

Нац

~~Beckmann~~

1980

Beckmann H.-O., et al

расчет
эл. и геом.
структ.

J. Chem. Phys., 1980, 73,
N10, 5182 - 5190.

● (see Li4) III

1980

10 Б15. Расчеты строения кластеров натрия вплоть до Na_8 методом псевдопотенциала. Flad J., Stoll H., Preuß H. Strukturbestimmung von Na-Clustern bis Na_8 mit Hilfe von Pseudopotentialrechnungen. «Fresenius Z. anal. Chem.», 1980, 304, № 4, 262 (нем.)

Для кластеров Na_n ($2 \leq n \leq 8$) проведена оптимизация геометрии при различной симметрии. Расчеты выполнялись в валентном приближении неэмпирич. метода МО ЛКАО ССП с учетом роли остова из $1s^2 2s^2 2p^6$ -электронов при помощи псевдопотенциала, к-рый уточнялся по эксперим. спектроскопич. данным для свободного атома Na. Корреляц. эффекты учитывались в приближении функционала плотности. Для Na_2 энергия связи найдена равной 0,61 (0,73) эВ, длина связи 3,03 (3,08) А и вертикальный потенциал ионизации 5,01 (4,93) эВ (в скобках эксперим. данные). Для кла-

$Na(n)$

$n = 2 \div 8$

геометрия
у,
/



2-1981-110

стеров от Na_3 до Na_8 эксперим. данные отсутствуют. Согласно расчету энергетически наиболее благоприятными структурами являются: для Na_3 треугольная симметрия C_{2v} с валентным углом 97° и длинами двух связей по 3,2 А; для Na_4 ромбич. с длиной связей 3,5 А и короткой диагональю длиной 3,0 А; для Na_5 тригонально-бипирамидальная симметрии C_{2v} и длинами ребер 3,0; 3,4 и 3,7 А; для Na_6 квадратная бипирамида с высотой 3,0 А и восемь ребрами длиной 3,4 А; для Na_8 антипризма с высотой 3,1 А и длиной сторон квадрата по 3,4 А. Энергия связи в расчете на один атом для кластеров с нечетным числом атомов в целом несколько меньше, чем для след. кластеров с четным числом атомов, повышается с числом атомов и достигает у Na_8 38% от энергии когезии металлич. натрия.

Е. Розенберг

Оттиски 10485.

1980

Na_n

$n = 2 - 4$.

(2i)

Верхняя часть атмосферы континента

3 Д572. Новые полосы ИК-поглощения паров натрия. New infrared absorption bands of sodium vapor. Vasilakis A., Bhaskar N. D., Harper W. J. Chem. Phys., 1980, 73, № 4, 1490—1493 (англ.)

Исследован спектр поглощения насыщенных паров натрия в области 0,83—2,5 мк. Т-ра в большинстве опытов составляла 1061°С при давл. пара 300 мм рт. ст. Зарегистрированное поглощение в области 0,83—1,18 мк интерпретировано как проявление переходов ${}^3\Sigma^+_u - {}^3\Sigma^+_g$ в димерах натрия. Поглощение в области больших длин волн связано с присутствием в парах натрия его полимеров Na_n ($n \geq 3$). Библ. 24.

Ф. 1981 N 3

Na_n (кластеры)

$n=1-19$

1981

2 Б159. Времяпролетная масс-спектрометрия сверхзвуковых пучков паров металлов. Интенсивности и потенциалы появления агрегатов M_x . Ноагеаи А., Кабауд В., Мелинон Р. Time-of-flight mass spectroscopy of supersonic beam of metallic vapours; intensities and appearance potentials of M_x aggregates. Small Particles and Inorganic Clusters. Proc. 2nd Int. Meet., Lausanne, 8—12 Sept., 1980. «Surface Sci.», 1981, 106, № 1-3, 195—203 (англ.)

масс-
спектры
(А.Р.)

На установке, состоящей из печи, сверхзвукового сопла, ионизатора (методом электронного удара) и времяпролетного масс-спектрометра, измерены масс-спектры продуктов конденсации в сверхзвуковом пучке паров натрия, йода и ртути. В случае натрия в масс-спектрах доминируют кластеры Na_n^+ , $n=1-19$. Зависимость интенсивности I_n от n определяется $P_0 d$, где P_0 — давл. паров в печи, а d — диам. сопла. При больших $P_0 d$ в I_n проявляются эффекты четный — нечетный, заключающийся в увеличении I_n для нечетных n . Измерены

х. 1982, 194Б, 12.

также I_n для фотоионизации. Установлено, что сечения фотоионизации кластеров почти на 2 порядка выше сечений их ионизации электронным ударом. Для йода наблюдаются кластеры $I_n, n=1-46$ с резко выраженным доминированием кластеров с четным n . Измерены Пт появления кластеров для $n=1-8$. В случае ртути зарегистрированы кластеры $Hg_n, n=1-25$ и определены их Пт появления для $n=1-12$. Эффект чередования интенсивности у этих кластеров не обнаружен. Дано объяснение наблюдаемым закономерностям в спектрах кластеров, основанное на правиле четности Джойса.

Ф. Николаев

(С₂)

Na_x^+

1981

$2 \leq x \leq 19$

95: 89803w Time-of-flight mass spectroscopy of supersonic beam of metallic vapors; intensities and appearance potentials of M_x aggregates. Hoareau, A.; Cabaud, B.; Melinon, P. (Dep. Phys. Mater., Univ. Claude Bernard, F-69622 Villeurbanne, Fr.). *Surf. Sci.* 1981, 106(1-3), 195-203 (Eng). A supersonic mol. beam was constructed to provide a continuous supply of clustered species into a 10^{-7} torr ionization source of the Nier type. The M_x^+ aggregates are then analyzed by the time-of-flight technique. Clusters of Na, Na_x^+ ($2 \leq x \leq 19$), were obsd., and a comparison between photoionization and electroionization was made. For Hg, Hg_x^+ aggregates ($2 \leq x \leq 25$) were detected, and their appearance potentials for $x \leq 12$ were measured. For I, clusters I_x from $x = 2$ up to 46 are present in the spectrum with a very pronounced odd-even effect on the intensities.

(A.P.)

(41)

C.A. 1981, 95, 110

Na_n (кластеры) [ссыл. 12097] 1981

$n \leq 4$

Carz R., et al.

электрон.
св-ва,
кв. мех.
расчёты.

Surface Sci., 1981,
106, N 1-3, 280-286

●
(ссыл. Li_n (кластеры); III)

1981

Na_n

95: 68307x Variational spherical model of small metallic particles. Martins, J. L.; Car, R.; Buttet, J. (Lab. Phys. Exp., Ec. Polytech. Fed., Lausanne, Switz.). *Surf. Sci.* 1981, 106(1-3), 265-71 (Eng). The structural and electronic properties were studied of simple metal clusters with a model based on the d. functional formalism. This model takes into account electron relaxation effects and the lattice structure through the introduction of pseudopotentials. Results for the ionization potential and electron affinity, binding and surface energies and lattice relaxation are presented for bcc. and icosahedral Na clusters having up to 350 atoms.

J, Ae.

(meop. paper)

CA 1981, 95, N8.

May

1982

Gole J. L., Green G. J.

Metal Bond. and Interact.

High Temp. Syst. Emphasis

exemp; Alkali Metals. Symp. 181

Meet. Amer. Chem. Soc., Atlan-
ta, Ga, March 31-Apr. 3, 1981.

Washington, D.C., 1982, 125-
-152. (see No. 2; iii)

1982

May

Gole J.L., Green G.J.

Metal Bond. and Interact.

High Temp. Syst. Emphasis

crkmp

Alkali Metals Symp. 181st

prepop.

Meet, Amer. Chem. Soc., Atlan-
ta, Ga, March 31-Apr. 3, 1981.

Washington, D.C., 1982, 125-

-152. (see Na₂; III)

Оммуек 15519

1982

Na_x

(кластери)

$x \leq 65$

фотометри-
зация
масс спектр.

Karpus M.M.,
Kunz R., et al.,

Chem. Phys. Lett.,
1982, 91, No, 413-

● 418

Кластеры Na_x

1982

3 Д705. Образование больших кластеров натрия (Na_x, $x \leq 65$) при расширении в вакуум насыщенного пара металла газа-носителя. Production of large sodium clusters (Na_x, $x \leq 65$) by seeded beam expansions. Карре Manfred M., Kunz Roland W., Schumacher Ernst. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 91, № 6, 413—418 (англ.)

Описана установка для получения молекулярного пучка кластеров Na_x с повышенным содержанием частиц больших размеров. Использован метод смешива-

г;

ср. 1983, 18, № 3

ния газа-носителя (He, Ne, Ar, Kr или N₂) при давл. 1—3 атм с насыщенными высокотемпературными парами натрия и последующего истечения газовой смеси в вакуум через отверстие диаметром 0,2 мм. Коллимирование пучка производилось с помощью системы скиммеров и диафрагм с диффер. откачкой секций. Методом фотоионизационной масс-спектрометрии исследованы распределения кластеров Na_x по размерам частиц в разных эксперим. условиях. При использовании Kr, Ar и Ne максимумы распределений соответствовали массовым числам $m/z=161$, 437 и 874, а максимальный зарегистрированный размер кластера составлял $x=65$. Отмечено, что группа кластеров вблизи Na₁₉ имела значительно более высокий потенциал ионизации, чем кластеры вблизи Na₃₈, а последние — более высокий, чем группа Na_{55±10}. Обсуждены некоторые детали механизма формирования кластеров. С. Литке

Na_n

(красные)

n=4-6

структура

[Ommelt 15805]

1982

Richtsmeler S. C., Dixon
D. A.,
et al.,

J. Phys. Chem., 1982,
86, N 20, 3942-3946.

$\text{Na}_{n < 17}$

1982

Электр. и
ИК-спектры
в мафритце
и в ледя-
ной
пюре.

Schumacher E.,
Gerber W. H., et al.

ACS. Symp. Ser.
1982, 179, 83-87.

(сер. Lin < 7; III)

1982

Na \bar{n}
 $n < 17$

Schumacher E., Gerber W. H.,
et al.

Metal Bond. and Interact.

High Temp. Syst. Emphasis Al-

Kali Metals. Symp. 181st Meet.

Amer. Chem. Soc., Atlanta, Ga.

March 31 - Apr. 3, 1981. Washing-

ton, D.C., 1982, 83-107.

(see. Li \bar{n} ; III)

Электрон.
спектры и
ионизация

$Na_n^{\bar{n}}, Na_n^+$

$n = 2-4$.

роммер,
структ.,

До, м.п.

(Ом. 16522) 1983

Flad J., Igel G., et al.

Chem. Phys., 1983,

75, N3, 331-345.

●
(сер. $Li_n^{\bar{n}}, Li_n^+$; III)

Nay

[om. 16522]

1983

Nay⁺

Flad Y., Igel G.,
Dolg. M., et al.

u.n.

Chem. Phys., 1983, 75,

N3,

331-345.

Na n

1983

(Y, Ae)

99: 28268m Electronic and cohesive properties of small sodium clusters. Iniguez, M. P.; Baladron, C.; Alonso, J. A. (Dep. Opt., Univ. Valladolid, Valladolid, Spain). *Surf. Sci.* 1983, 127(3), 367-76 (Eng). The d. functional formalism is used to study the variation with size of the electronic and cohesive properties of small Na clusters. The ionization potential, electron affinity, electronic chem. potential and the cohesive and surface energies were calcd. for microparticles contg. up to 339 sodium atoms.

c.A. 1983, 99, 24

[OM. 18142]

1983

Нап
(краситель)

Fulg A., Laszlo I., et al.,

J. Mol. Struct., 1983, 105,

N 3-4, Suppl.: "Theorem",

14, N 3-4, 393-405.

теорем.
расчет.



Na₄
Кеасмерн

[Om. 16950]

1983

Racchioni G., Plavsic D.,
et al.

Хим. свѣтъ,
Информат.
Структура

Ber. Bunsenges. phys.
Chem., 1983, 87, N 6,
503-512.

10m. 16927

1983

Na \bar{n}

красноты

ESR спектры
в замкнутом

Thompson G.A., Tisch-
ler F., et al.,

J. Chem. Phys., 1983,
78, N10, 5946-
5953.

Na_3^+

Om. 16522

1983

Flad J., Igel G.,
Dolg M., et al.

u.n.

Chem. Phys., 1983, 75,

N3,

331-345.

Na₄

1983

Pacchioni G., Plavšić A.,
et al.

Электрон.
открытие.

Ber. Bunsenges. Phys.
Chem., 1983, 87, N 6,
503-512.

(Ser. Li⁺; III)

Нап

1984

Chou M. Y., Cleland
Andrew, et al.

Solid State Commun.
1984, 52(7), 645-8.

теорет.
расчет,
теорет
связи

● (see Lin; III)

Na_n
Na_n⁺

DM. 20 070

1984

2 Д147. Равновесная геометрия и электронная структура малых кластеров натрия. Equilibrium geometries and electronic structures of small sodium clusters. Martins José Luís, Buttet Jean, Car Roberto. «Phys. Rev. Lett.», 1984, 53, № 7, 655—658 (англ.)

Методом, основанным на приближениях самосогласованной локальной спиновой плотности и псевдопотенциала, рассчитаны электронная структура и равновесная геометрия (РГ) кластеров натрия Na_n и Na_n⁺ с $n \leq 8$ и $n = 13$. Для расчета сил, действующих на атомы, использована теорема Гельмана—Фейнмана, что позволяет определить геометрию без наложения каких-либо ограничений на симметрию кластера. Результаты обеспечивают ясную интерпретацию измеренным фотоионизационным потенциалом кластеров Na в вакууме и находятся в хорошем согласии с данными их спин-электронных резонансных спектров. В. В. Россихин

У, строение

CF. 1985, 18, N2.

Na7

[DM. 18899]

1984

Fantuzzi P.,

ab initio
calculations

J. Chem. Phys., 1984,
80, N1, 325 - 328.

Na_n^+
 $n=2,3,4$

1984

Flad J., Igel-Mann G.,
et al.

Surface Sci., 1985, 156,

N1: Small Part. and

сборник, Inorg. Clusters. Proc. 3

papers Int. Meet., Berlin (West,

9-13 July, 1984, Pt 1, 375
-385. (see Li_n^+ , Li_n^+ ; III)

Na_n^+
 $n=2, 3, 4$

1984
Flad J., Igel-Mann G.,
et al.

Surface Sci., 1985, 156, N1:
Small Part. and Inorg.

Сейрекм., Clusters. Proc. 3 Int. Meet.,
пәрім Berlin (West) 9-13 July,
1984, Pt 1, 379-385.

●
(с. Li_n^+ , Li_n^+ ; III)

1984

Na_n

Na_n^+

($n \leq 8$ и 13)

1 Б1055. Электронные и структурные свойства кластеров натрия. Electronic and structural properties of sodium clusters. Martins J. L., Buttet J., Car R. «Surface Sci.», 1985, 156, № 2: Small Part. and Inorg. Clusters. Proc. 3rd Int. Meet., Berlin (West), 9—13 July, 1984. Pt 2, 649 (англ.)

Методом локальной спиновой плотности с использованием приближения псевдопотенциала проведены расчеты кластеров Na_n , Na_n^+ ($n \leq 8$ и 13). Для $n \leq 5$ наиболее стабильной найдена плоская структура, построенная из треугольников, для $n > 5$ более стабильны 3-мерные структуры, с почти одинаковыми межъядерными расстояниями между ближайшими соседями. Связь в кластерах носит металлич. характер. Обсуждена электронная структура кластеров и эффекты Яна-Теллера.

М. Квзьминский

геометр.
структ., стаб.
(расчет)

X. 1986, 19, n1

Na_n^+

1984

$n \leq 8, n = 13$

Martins Jose Luis,
Buttet Jean, et al.

meop.

Phys. Rev. Lett. 1984,

pacrim.

53 (7), 655-8.

● (see Na_n ; III)

Na_n

1984

101: 137379d · Equilibrium geometries and electronic structures of small sodium clusters. Martins, Jose Luis; Buttet, Jean; Car, Roberto (Inst. Phys. Exp., Swiss Fed. Inst. Technol., CH-1015 Lausanne, Switz.). *Phys. Rev. Lett.* 1984, 53(7), 655-8 (Eng). Self-consistent local-spin-d. calcns. were made of the equil. geometries of the clusters Na_n and Na_n⁺ with $n \leq 8$ and $n = 13$, without making any a prior assumptions. Results are in excellent agreement with recently obtained photoionization appearance potentials and ESR spectra. There is rapid formation of the metallic bond with a dominance of closely packed structures in two and three dimensions. A simple model is given to account for it.

$n \leq 8, n = 13$

(incop. paper)



c.A. 1984, 101, N16

Классификация
Na_n

$$2 \leq n \leq 7$$

геометрия,
структура,
у

от. 19198 1984

17 B1049. Расчет геометрии кластеров с помощью сил Гельмана — Фейнмана. Calculation of cluster geometries with the help of Hellmann-Feynman forces. Martins José Luís, Buttet Jean, Car Roberto. «Ber. Bunsenges. Phys. Chem.», 1984, 88, № 3, 239—240 (англ.)

Рассчитаны равновесные геометрич. конфигурации кластеров Na_n и Na_n⁺ при 2 ≤ n ≤ 7. Волновые ф-ции получены в рамках формализма функционала плотности в приближении локальной спиновой плотности с использованием неэмпирич. основного псевдопотенциала. Геометрическая конфигурация в процессе минимизации энергии изменялась в соответствии с рассчитанными силами Гельмана — Фейнмана. Начальное приближение выбиралось случайным образом. Во избежание нахождения локальных минимумов расчет повторялся несколько раз с использованием различных начальных приближений. Получено, что кластеры с n ≤ 5 имеют плоские структуры; Na₆, Na₇ и Na₇⁺ имеют ось симметрии 5-го

(H) ⊗

x. 1984, 19, 417

● Кластер Na_n⁺
2 ≤ n ≤ 7

порядка (Na_6 — пентагон. пирамида, Na_7 и Na_7^+ — пентагон. бипирамиды); Na^+ имеет неправильную форму. Рассчитанные адиабатич. Пт ионизации хорошо согласуются с эксперим. данными. А. А. Сафонов

Na₄

1984

Peterson K. I., Dao P. D.
et al.

y;

J. Chem. Phys., 1984,
80, N5, 1780-1785.

( cell. Na₂; III)

Na_x

(Om. 27013)

1984

$2 \leq x \leq 8$

Peterson K. J., Dao P. D.,
Farley R. W., et al.,

орто-
ионизация. J. Chem. Phys., 1984,
8, N 5, ● 1780-1785.

Na_n

1984

8 Д283. Фотоионизации кластеров атомов натрия.
Photoionization of sodium clusters. Peterson K. I.,
Dao P. D., Farley R. W., Castleman A. W., Jr.
«J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 5, 1780—1785 (англ.)

Исследуются спектры фотоионизации кластеров атомов натрия Na_n с n в пределах 2—8. Кластеры образовывались в сверхзвуковом потоке паров Na в смеси с Ar. Фотоионизация производилась с помощью ксеноновой лампы, а анализ продуктов проводился масс-спектрометрически. Отмечается большая точность используемой методики, чем во всех предыдущих экспериментах. Для кластеров с n от 2 до 4 получено хорошее согласие измеренных потенциалов ионизации с литературными данными. В этом случае пороговая область характеризуется резким подъемом сечения и затем четкой структурой, обязанной, по-видимому, автоиониза-

(9)

ар. 1984, 18, № 8

ции ридберговских состояний. Для кластеров с $n=5, 6, 8$ полученные потенциалы ионизации оказались ниже, чем в предыдущих экспериментах. Часто обсуждаемое в литературе чередование потенциалов ионизации при переходе по n от четного значения к нечетному в данном эксперименте не обнаружено. Обсуждаются механизмы превращений кластеров и приводятся энергии связи атома Na в Na_n^+ .

А. А. Зембеков

Na_n

1985

1.103: 93173s Methods for generating neutral, mass-selected cluster beams. Arnold, M.; Kowalski, J.; Putlitz, G. Zu; Stehlin, T.; Traeger, F. (Phys. Inst., Univ. Heidelberg, D-6900 Heidelberg, Fed. Rep. Ger.). *Surf. Sci.* 1985, 156(1), 149-56 (Eng). Methods for generating a neutral, mass-selected, cluster beam are discussed, which involve charge exchange of mass-selected cluster ions, velocity selection of neutral clusters produced with the gas-aggregation technique, and deflection of clusters in inhomogeneous elec. fields. Expts. with these methods were done on Na_n and S_n clusters. S_2 beams were produced via electron exchange of mass-selected S_2^+ ions in K vapor.

неможе
втеперашній
моє. публік

(42) S_n ● S_2

с. А. 1985, 103, N 12

Na₉ (K)

1985

Na₁₅

Na₂₇

105: 12518z Electronic structure of small sodium clusters. Brener, N. E.; Callaway, J.; Blaha, P. (Dep. Phys. Astron., Louisiana State Univ.; Baton Rouge, LA 70803-4001 USA). *Int. J. Quantum Chem., Quantum Chem. Symp.* 1985, 19(Proc. Int. Symp. At., Mol. Solid-State Theory, Scattering Probl., Many Body Phenom.; Comput. Quantum Chem., 1985), 603-12 (Eng). The electronic structures were calcd. for 3 small clusters of Na consisting of 9, 15, and 27 atoms. These clusters had cubic symmetry for the first 3 shells of atoms as in fcc. metallic Na and were not allowed to relax. The total energy per atom decreased in going from Na₉ to Na₂₇; the difference between Na₁₅ and Na₂₇ was smaller than the difference between Na₉ and Na₁₅. The charge d. and d. of states (DOS) of these clusters were also calcd. The charge d. of the interior atoms became more spherical as more shells were added to the cluster. The cluster densities of states did not closely resemble the free-electron-like DOS of bulk metallic sodium.

неоп. проект
сфукт. и
стабильн.

С.А. 1986, 105, N 2

№13
№15

1985

2 Б1027. Расчет методом псевдопотенциала оболочечной структуры в кластерах натрия. Pseudopotential calculation of shell structure in sodium clusters. Cleland A. N., Cohen M. L. «Solid State Commun.», 1985, 55, № 1, 35—38 (англ.)

С целью оценки надежности результатов расчетов электронной структуры металлич. кластеров в рамках модели «желе» проведены расчеты электронного строения кластеров Na_{13} и Na_{15} методом неэмпирич. псевдопотенциала с использованием формализма функционала локальной плотности. Сопоставление результатов расчетов с данными, полученными в рамках модели «желе», показывают, что они численно согласуются в пределах 10%. Сделан вывод о применимости модели «желе» при качеств. интерпретации эксперим. данных для больших кластеров.

Г. Л. Гуцев

Электрон-
структурные
расчет

Х. 1986, 19, № 2

Над

LOM. 23591

1985

László J. Tily A.

неоп.
рацем
геомер.
емпикт.

Acta phys. hung., 1985,
58, N 3-4, 199-218.



Nay

(OM-23 591)

1985

Laszlo I., Juleq A.

снррурт.
нарар.,
тсрр.
рарурт.

Acta Phys. Hung.
1985, 58 (3-4), 199-
- 218.

(срр. Liz; III)

Na_n

1985

103: 129294y Electronic and structural properties of sodium clusters. Martins, Jose Luis; Buttet, Jean; Car, Roberto (Inst. Phys. Exp., Ec. Polytech. Fed. Lausanne, CH-1015 Lausanne, Switz.). *Surf. Sci.* 1985, 156(2), 649 (Eng). The structural and electronic properties of Na_n and Na_n⁺ clusters ($n \leq 8$ and $n = 13$) are studied using the pseudopotential and the local-spin-d. approxns. To obtain the equil. geometries, one starts with randomly generated cluster geometries and let them relax under the action of the forces on the atoms, which are derived from the Hellmann-Feynman theory. The clusters with five atoms or less have planar equil. geometries built from triangles, whereas the larger clusters are three dimensional with interat. distances in a given cluster almost equal. The bonding in the Na aggregates is metallic and there is no sign of dimerization, as previously reported. The influence of the electronic structure and the Jahn-Teller effect on the equil. geometries are discussed in detail. The calcd. adiabatic ionization potentials agree well with the exptl. values and the equil. geometries are consistent with the known ESR measurements.

структура

и спектры

с-та класт-

меров.

C. A. 1985, 103, N 16.

1985

Na_n

$n \leq 8$

Na_n^+

102: 138103s Electronic and structural properties of sodium clusters. Martins, Jose Luis; Buttet, Jean; Car, Roberto (Inst. Phys. Exp., Ec. Polytech. Fed. Lausanne, 1015 Lausanne, Switz.). Phys. Rev. B: Condens. Matter 1985, 31(4), 1804-16 (Eng). The structural and electronic properties of Na_n and Na_n^+ with $n \leq 8$ and $n = 13$ were studied by self-consistent pseudopotential local-spin-d. calcns. In order to obtain the equil. geometries without imposing any symmetry constraint, the calcn. starts from randomly generated cluster geometries which relax under the action of the forces on the atoms, which are derived from the Hellmann-Feynman theory. The clusters with ≤ 5 atoms have planar equil. geometries, the 6-atom cluster is quasiplanar, and real 3-dimensional structures only begin to occur when the no. of atoms is ≥ 7 . The results agree well with the measured photoionization appearance potentials and the ESR spectra. Metallic bonding is the dominant feature of the calcd. electronic structures, and the equil. geometries can be explained with a simple model having the delocalized nature of the metallic electrons and the Jahn-Teller effect as basic ingredients.

неоп. размер
 экстр. структуры
 мол. напарней

$(H) \otimes Na_n^+$ ●

$n \leq 8$

C. A. 1985, 102, N 16.

Нап

[Дм. 21449]

1985

Маслова М.Б., Тосеницкая
А.Я.,

Теор. и эксперим. химия,
1985, 21, №1, 89-94.

$n = 3 \div 8$

теор.
расчет

Na_n

1986

125.1025. Структура электронных оболочек в кластерах простых металлов. Electronic shell structure in simple metal clusters. Chou M. Y., Cohen Marvin L. «Phys. Lett.», 1986, A113, № 8, 420—424 (англ.)

В модели сферич. желе вычислены полные энергии нейтр. кластеров Na, Mg и Al. Распределение сферич. ~~остовов (ядра-остовные электроны)~~ описывали однородно заряженной сферой. Полные энергии кластеров вычислены по самосогласованной схеме с использованием приближения функционала локальной плотности. Исследована зависимость полной энергии от числа атомов N в кластере, причем N изменяли до 100 в Na, 60 — в Mg и 32 — в Al. Установлено, что в результате образования электронной оболочечной структуры полные энергии в зависимости от размеров кластеров при нек-рых магич. числах атомов в кластере резко изменяются. Это явление объясняет пики или ступени, обнаруженные в масс-спектре Na. И. А. Тополь

структура
электрон-
оболочек

(42) 12
X. 1986, 19, N 12

Mg_n, Al_n

Na₄.

[Om. 24633]

1986

Jllas F., Merchan M.,
et al.,

неоп.
патент:
мол.
оптима
м

Chem. Phys., 1986, 107,
Nd-3, 361-380.

Na_n

1986

13 Б1023. Магические числа кластеров натрия. Magic numbers of sodium clusters. Iñiguez M. P., Alonso J. A., Balbas L. C. «Solid State Commun.», 1986, 57, № 1, 85—88 (англ.)

В рамках метода функционала плотности (МФП) рассчитана энергия когезии (ЭК) многоатомных кластеров Na_n , имеющих структуру типа ОЦК и ГЦК. При расчетах ЭК с помощью МФП одноэлектронные орбитали вычислены при точном учете оператора кинетич. энергии. Найденные по максимуму зависимости $\mathcal{E} \sim n$ от n магич. числа точно соответствуют последоват. заполнению координац. сфер в соотв. крист. решетках. Для ОЦК-структуры магич. числа равны 9, 15, 27, 51, 59, 65, 89... , а для ГЦК-структуры — 14, 19, 43, 55, 79, 87 и т. д. Поскольку имеющиеся эксперим. данные не подтверждают полученные магич. числа, сделан вывод, что кластеры, обнаруживаемые экспериментально, должны иметь разупорядоченную структуру. И. А. Тополь

X. 1986, 19, N 13

Na_x

[OM. 23807]

1986

$x \approx 40,66$

Kappes M.M., Schär M.,
Radi P., et al.,

(9)

J. Chem. Phys., 1986,
84, N3. 1863-1875.

$Na\bar{n}$

(Om. 24396)

1986

$n=2$

Koutecky J., Fantucci P.,

теорет.
расчет
структ.
и
энергет.

Chem. Rev., 1986, 86,
N 3, 539-587.



Nay

1986

Rao B. K., Khanna
S. N., et al.

ab initio
pariem

Ultramicroscopy 1986,
20 (1-2), 57-4.

(cell. \hat{L}_n ; iii)

Na³⁺
Na₄

1986

† 4 Б1010. Структура ионных кластеров щелочных металлов. Structure of alkali metal ionic clusters. Sen P., Rao C. N. R., Thomas J. M. «J. Mol. Struct.», 1986, 146, 171—174 (англ.)

Методом ССП- $X\alpha$ рассеянных волн рассчитаны потенциальные кривые и распределения заряда кластеров M_4^{3+} ($M=Na, K, Rb$) в тетраэдрич. и плоской квадратной конфигурации. Для кластера Na_4^{3+} геометрия оптимизирована также неэмпирич. методом ССП в базисе ОСТ-3ГФ. Сделан вывод, что ионные кластеры типа M_4^{3+} имеют тетраэдрич. структуру, причем стабильность кластеров уменьшается в последовательности $Na_4^{3+} > K_4^{3+} > Rb_4^{3+}$. Вклад неспаренного электрона в полный заряд кластера составляет 48% в Na_4^{3+} и 72% в K_4^{3+} , что согласуется с эксперим. данными ЭПР. Результаты измерений спектра КР кластеров Na^{3+} в замещенном Na^+ цеолите — Y подтверждает данные теорет. анализа о тетраэдрич. структуре Na_4^{3+} .

И. А. Тополь

(м.п.)

42

X. 1987, 19, № 4

K_4^{3+} , Rb_4^{3+}

№ 3+
Науч

[Om. 24945]

1986

Sen P., Rao C.N.R., Thomas J.M.,

Кривые
потенц. энергии, J. Mol. Struct., 1986,
структура, 146, 171-174.
кв - мех.
расчет

Nan

(DM-28040)

1987

Cao W. L., Gatti C., et al.

neop.
pacrēm

Chem. Phys. Lett., 1987,
141, NS, 380-385.

$(Na_2)_4$

1987

108: 138047a Electronic structures and stabilities of sodium clusters: jellium-sphere dimer calculation. Ishii, Y.; Saito, S.; Onishi, S. (Dep. Phys., Harvard Univ., Cambridge, MA USA). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1987, 7(3), 289-92 (Eng). Bonding properties of Na-cluster dimers, $(X_4)_2$ and $(X_8)_2$, where X_n is a jellium sphere corresponding to a cluster of n atoms, were investigated by the linear-combination-of-jellium-orbitals method with local-spin-d.-functional approxn. The stability of $n = 3$ clusters, obsd. in the expt., is discussed in relation to the binding properties of dimers. The $(X_4)_2$ bonding has a covalent character, which makes the X_4 formation favorable, and X_8 has an inert property because the force between jellium spheres in $(X_8)_2$ is due to a weak dispersion force.

стабильность

C. A. 1988, 108, N 16

Na⁺

(DM. 28874)

1988

Balbas L.C., Rubio A., et al.,

стабильн.,
теорет.
расчет

Chem. Phys., 1988, 120,
N 2, 239-247.



Классификация

(OM. 29706)

1988

Наб

Bonačić - Koutecký V.,
Fantucci P., et al.,

сравнение
спектров.

и
теоретич.
структ.,
ab initio
param

J. Mol
Chem.,
221-228

Struct. Theo-
1988, 166,

Na_n

1988

/ 109: 27766k Systematic ab initio configuration-interaction study of alkali-metal clusters. II. Relation between electronic structure and geometry of small sodium clusters. Bonacic-Koutecky, V.; Fantucci, P.; Koutecky, J. (Inst. Phys. Theor. Chem., Freie Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 33 Fed. Rep. Ger.). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1988, 37(9), 4369-74 (Eng). The quantum-chem. investigation of the electronic and geometrical structure of neutral Na clusters carried out with the all-electron Hartree-Fock (HF) or effective-core-potential HF followed by multireference double-excitation configuration-interaction (MRD-CI) procedure demonstrates the complete analogy to the electronic properties of Li_n clusters. The general rules detg. the electronic properties of small alkali-metal clusters are confirmed. Under exptl. conditions which do not allow strong cluster fragmentation the large abundances of Na₈ and Na₉ can be expected.

meop. paper

C. A. 1988, 109, N 4

Na_n^+

От 31 367

1988

$n = 3-9$

10 Б1032. Изучение электронной структуры и геометрии малых катионных кластеров натрия с использованием неэмпирических расчетов с учетом конфигурационного взаимодействия. Ab initio configuration interaction study of the electronic and geometric structures of small sodium cationic clusters / Bonacic-Koutecky V., Boustani I., Guest M., Koutecky J. // J. Chem. Phys.—1988.—89, № 8.—С. 4861—4866.—Англ.

М.А.

Неэмпирическим методом ССП КВ с использованием многоэкспоненциальных базисов ($9s, 5p/3s, 2p$) и ($14s, 8p, 1d/6s, 6p, 1d$) рассчитаны электронные структуры и геометрии кластеров (Кл) Na_n^+ ($n=3-9$); оптимизация геометрии проводилась аналитич. градиентным методом. Установлено, что уд. энергия атомизации Кл увеличивается с ростом их размеров и испытывает осцилляции при четных и нечетных n (при нечетных n энергия увеличивается), причем эффект осцилляций

X.1989, N10

проявляется только при учете КВ. Пт ионизации Na_n^+ также испытывают осцилляции и в целом уменьшаются с ростом n . С этими эффектами связана также сильная осцилляция энергии фрагментации $Na_n^+ \rightarrow Na_{n-1}^+ + Na^0$, чем объясняется экспериментально наблюдаемое увеличенное содержание Кл с нечетным n . Показано, что для Кл с $n=5, 7$ и 9 более предпочтит. является фрагментация $Na_n^+ \rightarrow Na_{n-2}^+ + Na_2$. Отмеченная высокая относительная устойчивость плоских Кл с $n \leq 5$.

В. С. Миронов



Na_n^+
 Na_n

OM. 31367

1988

$n=3 \div 9$

неопределенно.
смысл. и
неопределенно.

[110: 13754p Ab initio configuration interaction study of the electronic and geometric structures of small sodium cationic clusters. Bonacic-Koutecky, Vlasta; Boustani, Ilhan; Guest, Martyn; Koutecky, Jaroslav (Inst. Phys. Theor. Chem., Freie Univ. Berlin, 1000 Berlin, 33 Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1988, 89(8), 4861-6 (Eng). The favorable geometries of Na_n^+ ($n = 3-9$) clusters are detd. with the anal. gradient method in the framework of the ab initio SCF approxn. The transition from the planar towards three-dimensional cluster geometries is understood in terms of some basic quantum theor. concepts. The binding energies per atom for Na_n^+ clusters calcd. with the MRD CI procedure increase, in general, as a function of n . Nevertheless, the atomization energy per atom as well as the ionization potential as functions of the nuclearity n exhibit well developed oscillations for even-odd n . Consequently, the fragmentation energy for the channel $\text{Na}_n^+ \rightarrow \text{Na}_{n-1}^+ + \text{Na}$ shows strong oscillations as well. This explains large abundances of cationic clusters with odd nuclearity found in some detection devices. The possible consequences for the fragmentation process of Na_n^+ is discussed. The process $\text{Na}_n^+ \rightarrow \text{Na}_{n-2}^+ + \text{Na}_2$ is favorable for Na_5^+ , Na_7^+ , and Na_9^+ .

C.A. 1989, 110, N 2

Na \bar{x}

[Om. 29 436]

1988

X<23

Kappes M.M., Schär M.,
et al.,

Chem. Phys. Lett.,

1988, 143, N 3, 251-258

Sodium Cluster[●]er Ionization

Potentials Revisited:
Higher-Resolution Measure-
ments for Na π ($X < 23$)
and their Relation to
Banding Models.

Na_n

n=6

От 31329

1988

10 Б1033. Неэмпирические расчеты электронной структуры малых кластеров Na_n , Na_n^+ , K_n и K_n^+ ($n < 6$) с учетом взаимодействия остова с валентными оболочками. Ab initio calculations of the electronic structure of small Na_n , Na_n^+ , K_n , and K_n^+ clusters ($n \leq 6$) including core-valence interaction / Spiegelmann F., Pavolini D. // J. Chem. Phys.—1988.—89, № 8.—С. 4954—4964.—Англ.

Методом псевдопотенциала с учетом поляризации остова и его взаимодействия с валентной оболочкой (учитываемого в рамках теории возмущений), а также конфигурац. взаимодействия проведены расчеты электронной структуры, геометрии, энергии связи и Пт ионизации кластеров (Кл) щел. металлов Na_n , Na_n^+ , K_n и K_n^+ ($n \leq 6$). Использован гауссовский базис ($3s1p/1d$) и неэмпирич. псевдопотенциал. Определены также энергии фрагментации Кл относительно различных каналов распада. Проведено сравнение параметров

М.А.

⊗ (+3)

X. 1989, N 10

Кл, рассчитанных в рамках последоват. приближений (НХФ; КВ в пределах s-оболочки; КВ для всей валентной оболочки; расчет по полной схеме). Подчеркнута важность учета корреляц. взаимодействия между остовом и валентной оболочкой для адекватного описания геометрий и устойчивостей этих Кл, особенно для Кл тяжелых щел. металлов. В. С. Миронов



Na_n

OM. 31329

1988

$n \leq 6$

109: 237330q Ab initio calculations of the electronic structures of small sodium and potassium atomic and ionic clusters (Na_n , Na_n^+ , K_n , and K_n^+ ($n \leq 6$)) including core-valence interaction. Spiegelmann, F.; Pavolini, D. (Lab. Aimé Cotton, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1988, 89(8), 4954-64. (Eng). The electronic structure of small Na_n , Na_n^+ , K_n , and K_n^+ alkali clusters ($n \leq 6$) is investigated using nonempirical core pseudopotentials, CI within a 3s/1p/1d Gaussian basis set per atom and including the core-valence interaction through a perturbative treatment. Equil. geometries, stabilities, ionization potentials, and fragmentation channels are derived and the role of electronic correlation in small alkali clusters is examd.

неопт.
расчет
структур,

Г.

(73) 18



C. A. 1988, 109, N 26

Na_n^+
 $n \leq 6$

Dm 31329

1988

Spiegelmann F.,
Pavolini D.

u. n.

J. Chem. Phys. 1988.

89, n 8. c. 4954-4964.

(see Na_n^+ ; III)

Na_n^-


(UM-31008)

1988

Na_n^+

Wang G., Shu X.,

Phys. Lett. A 1988, 133,
N 7-8, 425-429.

Different
Neutral and  sodium clusters.

Structures of
Charged

Na_n

DM 32360

1989

111:160743h Structure, ionization potentials, dissociation channels, and surface energy of sodium microclusters. Arvati, S.; Dona Dalle Rose, L. F.; Silvestrelli, P. L.; Toigo, F. (Dip. Fis., Univ. Stud. Padua, I-35131 Padua, Italy). *Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis., D* 1989, 11 D(7), 1063-87 (Eng). The ground-state properties of Na microclusters with a no. N of atoms up to 138 were studied within the d.-functional theory. For $N \leq 8$, the min. energy geometry of a cluster of simple pseudoions was found by resorting to a soln. of the Kohn-Sham equation on a 3-dimensional grid based on a relaxation method, and by simultaneously allowing ion relaxation via Hellman-Feynman forces. Geometries, ionization potentials, and binding and dissocn. energies were obtained, and compared with existing results. For $2 \leq N \leq 138$, a spherical jellium model (SJM) was used to calc. the cluster cohesive energy and the fragmentation channels, with a view to deepen the understanding of the mechanisms leading to the magic-no. clusters. The stabilization energy is discussed in terms of the face energy, whose value agrees with semi-infinite jellium value for moderately large N .

Г. Струкара,
номер
поверхности

с.А.1989, 111, N18

Na₂₀

1989

· 110: 141732s Temperature and segregation effects in alkali-metal microclusters from ab initio molecular dynamics simulations. Ballone, P.; Andreoni, W.; Car, R.; Parrinello, M. (Zurich Res. Lab., IBM Res. Div., 8803 Rueschlikon, Switz.). *Europhys. Lett.* 1989, 8(1), 73-8 (Eng). An ab initio mol. dynamics study was made of the ground state, finite temp., dynamical properties of Na₂₀ and Na₁₀K₁₀ microclusters. For Na₂₀ the lowest-energy structure has several bulklike features. The vibrational spectrum at 200 K is compared to that of the liq. From the results a rationale is derived for the so far unexplained dependence of the mass spectrum on the nozzle temp. and compositional abundance of the mixed clusters. The implications of these calens. on the validity of the shell model are discussed in detail.

ab initio
pacem

(A) ~~Na~~ Na₁₀K₁₀ ●

C.A. 1989, 110, N16.

Na₄⁻

Om 33513

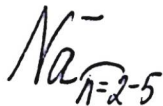
1989

Na₅⁻

111: 183466j Ab initio configuration-interaction study of the photoelectron spectra of small sodium cluster anions. Bonacic-Koutecky, V.; Fantucci, P.; Koutecky, J. (Inst. Phys. Theor. Chem., Freie Univ. Berlin, 1000 Berlin, 33 Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(6), 3794-5 (Eng). Ab initio direct CI calcns. on Na₂₋₅⁻ and Na₂₋₅ account for the obsd. photoelectron spectra patterns, reproduce the obsd. excitation energies in a semiquant. way, and permit an assignment of cluster geometries. It appears possible to account for the obsd. photoelectron spectra of Na_n⁻ in a semiquant. fashion by explicitly optimizing Na_n⁻ geometries and taking into account both spin multiplicities of the excited states of the neutral species and correlation effects. The dominant isomer of Na₄⁻ is proposed to be linear, but the presence of smaller amts. of the rhombic isomer cannot be excluded. In the case of Na₅⁻ linear and trapezoidal isomers might be responsible for the obsd. spectra.

kb. selx. part

C.A. 1989, 111, N 20



Um. 33514

1989

McHugb K.M., Eaton J.F.,
et al.,

фотознекны
снекны

J. Chem. Phys. 1989,
91, N 6, 3792 - 3793

Photoelectron ● spectra of the
alkali metal cluster anions:

$\text{Na}^-_{n=2-5}$, $\text{K}^-_{n=2-7}$ $\text{Rb}^-_{n=2-3}$,
and $\text{Cs}^-_{n=2-3}$.

Experiment
№ 8
(n=8)

(DM. 32949)

1989

Ray A.K.,

ab initio Solid State Commun.
paper 1989, FI, NY, 311-316.

Ab initio many body perturbation
theoretical study of
small sodium clusters.

Na_n^+
($n=2-7$)

М.П.

Х. 1990, № 9

1989

9 Б1065. Неэмпирическое исследование малых катионных кластеров натрия методом многочастичной теории возмущений. *Ab initio many body perturbation theoretical study of small sodium cationic clusters* / А. К. Ray // *Solid State Commun.*— 1989.— 72, № 10.— С. 1051—1056.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП с учетом электронной корреляции по теории возмущений Меллера—Плессета 4-го порядка с использованием базиса 6—21 ГФ рассчитаны равновесная геометрия, электронное строение, энергии атомизации, диссоциации и вертикальные Пт ионизации кластеров Na_n^+ ($n=2-7$). Обсуждена зависимость стабильности кластера по отношению к атомизации и фрагментации от размера кластера. Отмечены осцилляции энергий атомизации и Пт ионизации кластеров при переходе от кластеров с четным n к кластерам с нечетным n . Кластеры с четным числом электронов более стабильны, чем кластеры с нечетным числом электронов. При распаде кластеров с четным n образуются димеры натрия, а при распаде кластеров с нечетным n атомы Na. Н. В. Харчевникова

DM. 34818

1990

Na₂

Бонайк - Ковтецкий В.,

спектр, Карпес М.М. et al.,

св-ва
основн.

и волн.
длина.

составля.
номер

Chem. Phys. Lett.,
1990, 170, N1, 26-34.

Interpretation of the
absorption spectrum of Na₂

Na₄

10m. 33605

1990

Bonačič-Koutecký V., Fantuc-
ab initio ci P., et al.,

panem

Chem. Phys. Lett., 1990, 166,
N1, 32-38

An ab initio ● configuration
interaction study of the

excited states of the Na_4
cluster: assignment of the
absorption spectrum.

Na₈

DM 33606

1990

18 Б1213. Молекулярные возбужденные состояния как функция коллективных электронных осцилляций. Исследования оптического поглощения Na₄ и Na₈. Molecular excited states versus collective electronic oscillations: Optical absorption probes of Na₄ and Na₈ / Wang C. R. Chris, Pollack Stuart, Kappes Manfred M. // Chem. Phys. Lett.— 1990.— 166, № 1.— С. 26—31.— Англ.

Исследованы электронные переходы в кластерах Na₄ и Na₈ под действием излучения перестраиваемого (435—825 нм) импульсного лазера. Пучок нейтр. кластеров, получающихся при расширении нагретых паров натрия, облучался в противоположном направлении коллинеарным лазерным пучком расширенным до эффективного диаметра молек. пучка. Содержание определенных кластеров в пучке анализировалось квадрупольным масс-спектрометром. Близкая к пороговой однофотонная ионизация кластеров осуществлялась Хе или Хе/Hg дуговой лампой (с обрезаящим 230-нм светофильтром). Измерялось уменьшение содержания кластеров в пучке в зависимости от длины волны возбуждающего лазерного излучения. В случае Na₄ наблюдалось 6 широ-

М.А.

X: 1990, N 18

ких полос отнесенных на основании результатов неэмпирич. расчетов (// Chem. Phys. Lett.— 1990.— 166.— С. 32) к переходам из состояния 1A_g (ромбич. структура молекул) в состояния: 1^1B_{2u} (максимум полосы при 755 нм, сечение $0,25 A^2$); $1B^3_u$ (685 нм, $3,39 A^2$); 2^1B_{3u} (640 нм, $0,31 A^2$); 1^1B_{1u} (570 нм, $0,37 A^2$); 2^1B_{2u} (495 нм, $2,99 A^2$); 2^1B_{1u} (445 нм, $1,17 A^2$). В спектре Na_8 наблюдался один интенсивный переход с максимумом 490 нм и ранее неизвестные дополнит. слабые полосы 740 нм и 600 нм (плечо). Полоса 490 нм интерпретирована в рамках модифицир. теории M_u , как осцилляции поверхн. плазмы кластера. В кач-ве альтернативного подхода к интерпретации упомянуто приближение зависящей от времени локальной плотности.

В. М. Ковба

2+, и.
и атс

Nas

(OM. 35336)

1990

Wang C. R. C., Pollack S.,
et al.,

J. Chem. Phys. 1990, 93,
No. 3787-3801.

Optical absorption spectro-
scopy of sodium clusters as

measured by collinear molecular beam photodepletion.


Na₄

(DA 35336)

1990

Wang C.R.C., Pollack S.,
et al.,

J. Chem. Phys. 1990, 93,
N6, 3787-3801.

Optical absorption spectro-
scopy of sodium  um clusters as

measured by collinear molecular beam photodepletion.

Na_n

(n=2-14)

структура,
IP. параметры

1991

115: 263824x Electronic structure and stability of small sodium clusters. Chen, J.; Brink, D. M.; Wille, L. T. (Dep. Theor. Phys., Oxford Univ., Oxford, UK OX1 3NP). *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 1991, 206(Clusters Cluster-Assem. Mater.), 139-44 (Eng). The structural and electronic properties of small sodium clusters (Na_n, N = 2-14) are investigated. The electronic energy levels are calcd. within the tight-binding model based on a one-level Hubbard Hamiltonian, with transferable interaction parameters. The ground-state energy minimization is accomplished by means of the simulated annealing method in order to avoid local min. The resulting cluster radii, symmetries, magic nos. and ionization potentials compare very well with expt. and with other, more elaborate, theories. The structures are close-packed but do not necessarily maximize the local coordination. Since the simulated annealing algorithm corresponds to a random walk on the potential energy hypersurface, information about low-lying local min., saddle-points and phase transformations may be obtained as well. In particular, evidence is presented for the presence of relatively well-defined and distinct melting and freezing temps. in small sodium clusters.

C.A. 1991, 115, N24.


Nan

1991

Dugourd P.,
Ravane D. et al.

(7)

J. Phys. IV 1991, 1, C7/
509 - C7/512.

(see  Lin; III)

Nan

1991

116: 46645f Ionization energies of sodium clusters containing up to 22,000 atoms. Goehlich, H.; Lange, T.; Bergmann, T.; Naeher, U.; Martin, T. P. (Max-Planck-Inst. Festkoerperforsch., W-7000 Stuttgart, 80 Germany). *Chem. Phys. Lett.* 1991, 187(1-2), 67-72 (Eng). Recently it has been shown that the mass spectra of sodium clusters show evidence for magic nos. up to 22,000 atoms. The authors measured the ionization potential of large sodium clusters. The magic nos. obsd. earlier are caused by an increase in the ionization energy each time a geometric shell of atoms is completed.

число атомов
в кластере
 $n \leq 22000$

C. A. 1992, 116, N 6

Na_n

$n \leq 25$

1991

117: 34024k Ionization energies and stabilities of sodium clusters (Na_n, n < 25): shell structure from measurements on cold clusters. Homer, M. L.; Persson, J. L.; Honea, E. C.; Whetten, R. L. (Dep. Chem. Biochem., Univ. California, Los Angeles, CA 90024 USA). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1991, 22(1), 441-7 (Eng). The stability patterns found in alkali atom clusters, and their explanation in terms of electronic and structural factors have been controversial for some time. Generation of very cold Na_n clusters in a novel source, and use of a special photoion normalization method resolve the remaining questions by allowing precise detn. of photoionization thresholds. This is demonstrated here for several sizes in the 7 < n < 26 range, where in two crucial cases the interpretations of earlier ionization threshold measurements on oven-beam clusters (M. Kappes, et al., 1986) disagreed with the explanation of the obsd. stability pattern. Combining the new values with the charged-cluster fragmentation energies of C. Brechignac, et al., (1989) yields neutral cluster fragmentation energies that successfully account for the famous "magic-no." ledges (W. D. Knight, et al., 1984). Our measurements offer decisive support for the applicability of the spherical/spheroidal electronic shell-model to smaller Na_n clusters, even in their low-temp. form.

(З, емазунн,
мел. пункт)

C. A. 1992, 117, N 4

Na_n

1991

$(7 \leq n \leq 40)$

115: 99728w **Stability of isomeric sodium (Na_n) clusters.** Lopez, M. J.; Iniguez, M. P.; Alonso, J. A. (Dep. Fis. Teor. Fis. At. Mol. Nucl., Univ. Valladolid, Valladolid, Spain E-47011). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1991, 19(1-4), 141-3 (Eng). A method, which combines d.-functional theory and the use of pseudopotentials, is applied to obtain ground-state and low-lying metastable geometries of Na_n clusters ($7 \leq n \leq 40$). The large variation in the magnitude of energy gaps between isomers suggests that the melting temp. is not a simple monotonous function of size. A detailed study of the differences between electronically stabilized ($n = 8, 20, 40$) and structurally stabilized ($n = 13$) clusters suggests some clues to understand the intriguing behavior of Na_{13} .

стабильность
распад

C.A. 1991, 115; N10

Na_n

$$n = 2 \div 20$$

структура,
электрон.
составление.
расчет

С.А. 1991, 115, N 8

1991

115: 79297b Structural and electronic properties of sodium microclusters ($n = 2-20$) at low and high temperatures: new insights from ab-initio molecular-dynamics studies. Roethlisberger, Ursula (Inst. Inorg. Phys. Anal. Chem., Univ. Bern, 3000 Bern, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1991, 94(12, Pt. 1), 8129-51 (Eng). Extensive computer simulations are presented of several Na microclusters, using the Car-Parrinello method (unified d.-functional theory and mol. dynamics). Dynamical simulated annealing strategies are adopted in the search for low-energy min. of the potential energy surface. A detailed anal. of the results for both structural and electronic properties at 0-600 K is carried out, which allows for the first time to gain insight into the structural "growth" pattern, the extent of the validity of (spherical, spheroidal, and ellipsoidal) jellium models, and the effects of temp. In particular, new and unforeseen structures are discovered for $n = 10, 13, 18,$ and 20 . The const. presence is emphasized of arrangements with local pentagonal symmetry for the low-energy isomers as well as the similarity of the structural pattern with that of Lennard-Jones systems. Shape transformations with increasing temp. are obsd., "rigidity" and "nonrigidity" of the individual clusters examd., and the presence of distinct isomers is identified for the smaller ones. Closing of

electronic shells is confirmed for Na_8 and Na_{20} and—to a minor extent only—for Na_{18} . Hybridization of cluster states of different angular momenta, which represents a deviation from the spherical shell model, is discovered in several cases and discussed in detail, also in correspondence with the presence of anisotropy of the electronic potential. In most cases, this hybridization is obsd. to increase with increasing temp., in parallel with the increase of the eccentricity of the cluster shape. In spite of the relatively high at. mobility, the results do not support a spherical liq.-droplet picture for the at. distribution.



Na7

1992

Bonacic - Koutecky V. et al.,

ab initio NATO ASI Ser., Ser. C
param. 1992, 374. (Phys Chem.
chem. novels. Finite Syst: Clusters
Crest., vol. 2), 899-906

(all-Lib; III ●)

Na₅

DM 37425

1992

Na₆, Na₇

ab initio
расчет,
структура,
стабильность

/ 117: 76789u Quantum molecular interpretation of the absorption spectra of sodium pentamer, hexamer, and heptamer, clusters. Bonacic-Koutecky, V.; Pittner, J.; Scheuch, C.; Guest, M. F.; Koutecky, J. (Inst. Phys. Theor. Chem., Freie Univ. Berlin, 1000 Berlin, 33 Germany). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(11), 7935-58 (Eng). The configuration-interaction study of the excited states of the most-stable structures of Na₅, Na₆, and Na₇ clusters employing *ab initio* effective-core potential cor. by the core polarization potential predicts spectroscopic patterns which are in good agreement with the measured depletion spectra. A comparison of the transition energies and the oscillator strengths with the exptl. data makes possible tentative structural assignments. Planar Na₅ and Na₆ structures and the three-dimensional pentagonal bipyramid for Na₇ appear responsible for the recorded spectra. The full agreement between theory and expt. is present for Na₅ and Na₇. The measured cross sections and calcd. oscillator strengths for Na₅ compare better for lower transition energies than for higher ones. A many-electron description of the excited states of Na₅, Na₆, and Na₇ yields a complete quantum mol. interpretation of the absorption spectra. From a comparison of the exptl. and theor. results the conclusion has been drawn that a transition from planarity to the three dimensionality takes place for Na₇.

C. A. 1992, 117, N 8

1992

Na₇, Na₈, Na₉

116: 136599y Phase transitions in sodium (Na₇-Na₉) microclusters. Bulgac, Aurel; Kusnezov, Dimitri (Dep. Phys. Astron., Michigan State Univ., East Lansing, MI 48824-1321 USA). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1992, 45(5), 1988-97 (Eng). We present a wide range of properties of Na₇-Na₉ microclusters detd. in the framework dynamics was treated by means of an effective many-body potential, uses previously for clusters, surface, and bulk properties. We have computed rotational, vibrational, and potential energies and corresponding sp. heats, momenta of inertia, shapes parameters, and bond lengths of the Na microclusters over a wide range of temps., from 25 to 1500 K. We have detd. that sodium microclusters undergo two "phase transitions", one around 100 K from a crystal to a glassy or molten state, and a second on around 800 K, to a fluid state of the cluster. At low temps. Na microclusters are essentially incompressible; but relatively easy to deform. At high temps. Na clusters become extremely soft, and evapn. of atoms sets in.

(P, T, E, C,
 structure,
 parameters,

T₁₂, u.n. (H) □

• C. A. 1992, 116, N 14.

Na₅, Na₆, [Om-37424] 1992

Na₇ Chris Wang C.R., Pollack S.,
et al.,

J. Chem. Phys., 1992, 96(11),
7931-7937.

Photodepletion probes of Na₅, Na₆,
and Na₇. Mole ● cellular dimensionality
transition (2D \rightarrow 3D)?

Нах

дониме

1992

118: 176227y Ionization energies* of large sodium clusters: direct evidence for atomic shell structure. Goenlich, H.; Lange, T.; Bergmann, T.; Naeher, U.; Martin, T. P. (Max-Planck-Inst. Festkoerperforsch., 7000 Stuttgart, 80 Germany). NATO ASI Ser., Ser. C 1992, 374(Phys. Chem. Finite Syst.: Clusters Cryst., Vol. 1), 581-6 (Eng). Recently it was shown that the mass spectra of sodium clusters show evidence for magic nos. up to 2000 atoms. In the present investigation the authors have measured the ionization potential of large sodium clusters. The results indicate that magic nos. obsd. earlier are caused by an increase in the ionization energy each time a geometric shell of atoms is completed.

(9)

C.A. 1993, 118, N18

Na₂, Na₂₀, Na₄₀₃

1992

117:76917j Sodium-cluster periodic system. Hansen, Klavs
(Niels Bohr Inst., Den.). *Dan. Kemi* 1992, 73(2), 12-15 (Dan).
The cluster formation was studied for the Na system using gas
expansion and cooling. The cluster sizes were identified by mass
spectroscopy. Na₈, Na₂₀, and Na₄₀₃ have high stability while Na₂₉,
Na₃₁, and Na₄₁ have low stability. A cube-root law was derived
which predicted the magic nos. for larger clusters.

Магические
числа.

C.A. 1992, 117, N 8

Na₁₃

1992

116: 91865p Thirteen-atom clusters: equilibrium geometries, structural transformations, and trends in sodium, magnesium, aluminum, and silicon. Roethlisberger, Ursula; Andreoni, Wanda; Giannozzi, Paolo (Inst. Inorz., Phys. Anal. Chem., Univ., Bern, CH-3000 Bern, Switz). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(2), 1243-56 (Eng). The results are given of an extensive structural study of Na₁₃, Mg₁₃, Al₁₃, and Si₁₃ carried out with the Car-Parrinello method. Several and mostly unforeseen noncryst. structures are discovered to characterize the low portion of the potential energy surface. Cryst. structures are shown either to correspond to high-energy local min. or to be highly unstable. The low-energy structural pattern appears to change significantly from one element to the other. Specific characteristics as well as trends are discussed.

структура,
неопределен

(13)



Mg₁₃, Al₁₃, Si₁₃

C.A. 1992, 116, N 10

Na₃-кластеры

LOM: 36 861

1992

Schreiber E., Kühling H., et al.,

Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 1992,
96, N 9, 1301-1305.

Time-resolved TPI-spectroscopy of
the B⁻ and D⁻ state of
Na₃-clusters.

1992

119: 56420e The electronic structure of small sodium clusters. Wang, Feng; Wright, Neil; Von Nagy-Felsobuki, Ellak I. (Dep. Chem., Univ. Newcastle, Callaghan, 2308 Australia). *J. Cluster Sci.* 1992, 3(2), 229-46 (Eng). Ab initio MO calcns. using the STO3-21G basis set has been carried out for the cluster series Na_n^+ , Na_n , and Na_n^- (where $n = 2-7$). The basis set is shown to be reliable compared with more extensive basis sets at the Hartree-Fock level. Thirty-one optimized structures are reported and discussed, many of which (esp. for the anions) have not been considered. The STO3-21G//STO3-21G calcns. suggest that for most of the species the optimum geometries are planar. In particular, the optimized structures for the anionic species should provide a starting point for more sophisticated CI calcns.

Na_n^+
 Na_n
 Na_n^-

(ab initio
fractum)

C. A. 1993, 119, N. 6

Na_5 , Na_6 , Na_7

1992

117: 79030a Photodepletion probes of sodium pentamer, hexamer, and heptamer. Molecular dimensionality transition (2D — 3D)? Wang, C. R. Chris; Pollack, Stuart; Dahlseid, Tina A.; Koretsky, Geoffrey M.; Kappes, Manfred M. (Dep. Chem., Northwestern Univ., Evanston, IL 60208 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(11), 7931-7 (Eng). Photodepletion spectroscopy was used to obtain electronic absorption data for Na_5 , Na_6 , and Na_7 at 420-770 nm. Measurements were rationalized using several models, ranging from classical electrostatic to ab initio large-scale configuration-interaction calcs. As in previous studies of Na_4 , Na_8 , and Na_{20} , classical Mie-Drude theory applied to appropriately dimensioned metal droplets describes the gross but not a no. of fine-structure features of the spectra obsd. In contrast, ab initio large-scale configuration-interaction predictions of vertical electronic excitations from specific ground-state geometries can more fully account for the measurements. Theory-expt. comparison suggests that Na_6 is predominantly formed under the mol.-beam conditions in a planar or near-planar structure. In contrast, the spectrum obtained for Na_7 is consistent with a three-dimensional topol.

Ж. А. Черепанов -
ведущий,
См. журнал

C. A. 1992, 117, 118

Na₂₀

1993

119: 258539m Ab initio predictions of optically allowed transitions in sodium cluster (Na₂₀). Nature of excitations and influence of geometry. Bonacic-Koutecky, V.; Fantucci, P.; Fuchs, C.; Gatti, C.; Pittner, J.; Polezzo, S. (Institut fuer Physikalische und Theoretische Chemie, Freie Universitaet Berlin, Takustrasse 3, D-14195 Berlin, Germany). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 213(5-6), 522-6 (Eng). An ab-initio investigation shows that the deformed section of the fcc. lattice for Na₂₀ with T_d symmetry gives rise to 3 intense transitions with differing oscillator strengths due to excitations localized in different parts of the cluster. These predictions are in agreement with the exptl. findings by 2-photon femtosecond spectroscopy and the depletion technique. The study of different structures for Na₂₀ reveals that the spectroscopic patterns strongly depend on the position of the nuclei.

ab initio
(расчет)
суперкомп,
И. Черны

C. A. 1993, 119, N24

$N\pi$

$\boxed{\text{Dm. 37 190}}$

1993

$2 \leq N \leq 10$

Cordero N.A., Alonso F.A.,
et al.,

(Do) Nucl. Phys. 1993, 79, N2,
393 - 403.

(Na₁₉)₂

1993

119: 234504v Accurate numerical study of the stability of sodium (Na₁₉)-cluster dimers. Engel, E.; Schmitt, U. R.; Luedde, H. J.; Toepfer, A.; Wuest, E.; Dreizler, H. M.; Knospe, O.; Schmidt, R.; Chattopadhyay, P. (Inst. Theor. Phys., Univ. Frankfurt, 6000 Frankfurt/Main, 11 Germany). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1993, 48(3), 1862-9 (Eng). The structure of (Na₁₉)₂-cluster dimers is studied via soln. of the Kohn-Sham equations for a two-center jellium model. Results for the binding energy of the dimer as a function of the intercluster sepn. as well as the electronic correlation diagram of the (Na₁₉)₂ system are presented. In contrast to previous results, the calcns. indicate that the barrier which separates a local min. in the binding energy at an intercluster sepn. of about 15 a.u. from the abs. min., the united Na₃₈ cluster, is rather small.

структура.
стабильн.
теорет. расчет

C. A. 1993, 119, N 22

Нап

1993

119: 147017v Time-resolved spectroscopy of sodium (Na_n) cluster fragmentation. Kuehling, H.; Kobe, K.; Rutz, S.; Schreiber, E.; Woeste, L. (Inst. Experimentalphys., Freie Univ. Berlin, 1000 Berlin, 33 Germany). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1993, 26(1-4), 33-5 (Eng). Using picosecond pump and probe technique followed by mass-selective detection, the dynamics of excited states of cold $\text{Na}_{n-3...8}$ -clusters in a supersonic beam, excited at $\lambda = 422\text{nm}$, was studied by time-resolved two-photon-ionization expts. With growing cluster size a monotonous decrease of the decay times is obsd. except in the case of Na_7 known to be a very sym. cluster.

двухфотонная
ионизация

C.A. 1993, 119, N14, 147017V

Na₄

1993

119: 236892u Monte Carlo ab initio simulation of the absorption spectrum of sodium tetramer. Potesu, Romuald; Maynaud, Daniel; Spiegelmann, Fernand (IRSAMC, Laboratoire de Physique Quantique (URA 505 du CNRS), Universite Paul Sabatier, 118, route de Narbonne, 31062 Toulouse, Fr.). *Chem. Phys.* 1993, 175(2-3), 289-97 (Eng). The influence of the classical vibration of the nuclei on the visible absorption spectrum of the Na₄ cluster is investigated. The classical motion on the ground state potential energy surface at a given temp. is obtained from a Metropolis Monte Carlo simulation. This dynamic process makes possible a theor. detn. of the widths of the structures in the absorption spectra. The absorption spectrum is integrated from ab initio CI calcns. of excited states and oscillator strengths along the random trajectory. A first simulation was achieved at T = 150 K using an ab initio CI detn. of the ground and the excited states. The efficiency of the Metropolis process is improved with the use of an approx. representation for the ground state. Simulations are performed for several temps. T = 50, 150, and 500 K. The simulated spectra are discussed in relationship with the exptl. spectrum of Kappes et al.

Superficial
CNCMP
Non-representative

C.A. 1993, 119, N 22

Na₈

Dim. 37 678

1994

121: 92424j Ab initio molecular dynamics study on the thermal stability of Na₈ microcluster. Tse, John S.; Klug, Dennis D. (Steacie Institute Molecular Sciences, National Research Council of Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Chem. Phys.* 1994, 101(1), 473-5 (Eng). The thermal stability of a Na₈ microcluster was modeled with the first-principles, quantum mol.-dynamics technique. Three distinct transitions were obsd., and characterized with the calcn. of their phonon spectra. The results showed that a Na₈ cluster can exist in rigid, disordered, and liquidlike phases. These observations substantiate a previous classical mol.-dynamics calcn. using an empirical potential.

(стабильная)

C. A. 1994, 121, N 8

$(Na_{19}-Na)^+$

1995

номери, но-
референс,
неоп. пункт

122: 115536j The $^2\Sigma^+$ potential energy curves of the $(Na_{19}-Na)^+$ jellium-cluster-ion system. Guissani, M.; Sidis, V. (Lab. Collisions At. Mol., Univ. Paris XI, 91405 Orsay, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1995, 102(3), 1288-94 (Eng). A prototypical description of the $(Na_{19}-Na)^+$ system is reported. The Na atom, in its ground and first two excited states, is treated by the one-electron pseudopotential method. The cluster is first described in the spherical jellium background model (SBJM). A numerical Hartree-Fock approach is used to calc. the electronic wave function of the cluster in its ground state configuration. Singly excited Na_{19}^* states are obtained using an improved virtual orbital technique to allow for the distortions of the cluster electron cloud during the $Na_{19}-Na$ approach. The matrix of the electronic Hamiltonian in a (diabatic) basis of projected valence bond configuration state functions are detd. with an effective model potential method. As a first model case, the $(Na_{19}-Na)^+$ system is treated holding the isolated pos. background of the jellium cluster unchanged. This description pertains to rapid displacements of the atom relative to cluster. As a second case, the authors consider distortion and reconstruction of the pos. background as the Na^+ -ion core approaches and penetrates into the cluster core. The latter description is appropriate for slow displacements of the atom relative to the cluster. Potential energy curves are reported for the $^2\Sigma^+$ states.

C.A. 1995, 122, N10

Na_π

1995

K=3-27

Mitteilung K.

Z. Phys. Chem. (Munich),

сваблен.
тор.
рачѣт

1995, 190 (2), 299 -

393.

● (св. Li_π; III)

1996

F: Na(n)+

P: 3

18B162. Неэмпирическое изучение структурных и оптических свойств кластеров Na[n]{+}. Интерпретация спектров [фото]истощения при низких температурах. Ab initio predictions of structural and optical response properties of Na[n]{+} clusters: Interpretation of depletion spectra at low temperature / Bonacic-Koutecky V., Pittner J., Fuchs C., Fantucci P., Guest M. F., Koutecky J. // J. Chem. Phys. - 104, 4. - С. 1427-1440. - Англ.

Неэмпирическими методами квантовой химии рассчитаны равновесные геометрич. параметры и энергии основных и возбужденных состояний кластеров $\text{Na}[n]\{+\}$ ($n=2-9, 11, 21$). Использовано приближение эффективного потенциала остова. Для представления валентных орбиталей использованы базисы $(4s3p/3s3p)$ и $(4s3p1d/3s3p1d)$. Энергии электронных возбуждений и соотв-щие силы осцилляторов вычислены методами конфигурац. взаимодействия. Особое внимание уделено поиску изомерных конфигураций. Энергии вертикальных электронных переходов сопоставлены с эксперим. данными для низкотемпературных спектров фотонстощения.



$n=2-9, 11,$
21

ab initio
paccm

1996

124: 129975e Ab initio predictions of structural and optical response properties of Na_n^+ clusters: interpretation of depletion spectra at low temperature. Bonacic-Koutecky, V.; Pittner, J.; Fuchs, C.; Fantucci, P.; Guest, M. F.; Koutecky, J. (Walther-Nernst-Inst. Phys. Theor. Chem., Humboldt-Univ. Berlin, D-10117 Berlin, Germany). *J. Chem. Phys.* 1996, 104(4), 1427-40 (Eng). We show that a comparison of the depletion spectra of Na_n^+ ($n = 2-9, 11, 21$) clusters

recorded at low temp. and optically allowed transitions detd. for the stable structures using ab initio methods accounting for electron correlation allows the assignment of the cluster geometry to the measured features. Due to the large mobility of atoms in alkali metal clusters, the influence of temp. on structural and electronic properties is significant. The lowering the temp. reveals new spectroscopic features which are structure dependent. Optical response properties of small cationic Na_n^+ clusters are characterized by rich mol.-like spectroscopic patterns, also with increasing size, and differ substantially from those found for neutral clusters. It has been clearly demonstrated that not only the no. of valence electrons but its mutual interplay with the geometric properties det. optical response features.

C. A. 1996, 124, N10

Na_n

$$n = 2 \div 9$$

Y, meop.
pacem

1996

124:242840v Analysis of the odd-even alternation in simple metal clusters. Groenbeck, H.; Rosen, A. (Dep. Physics, Goeteborg Univ., S-412 96 Goeteborg, Swed.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1996, 36(2), 153-7 (Eng). A set of MO-LCAO calcns. within the LSDA formalism was performed for the anal. of the odd-even alternation in simple metal clusters. Electronic properties, including ionization potentials and partial d. of states analyses were evaluated for clusters of Na, K, Cu, and Ag ranging from 2-9 atoms. The present study focus on the differences in magnitude of the odd-even alternation, which is attributed to the electronic level sepn. close to the Fermi level of the clusters. For the coinage metals, the hybridization between s, d, and p states is shown to strongly influence the alternation, reducing the magnitude for Cu to about the same value as for Ag. The small redn. of the alternation magnitude due to a finite spin d. for the odd clusters is also investigated by comparative LDA calcns.

(+3) \otimes K_n, Cu_n, ● Ag_n

C. A. 1996, 124, N 18

1996

128: 93408p Theoretical investigation of neutral, anionic and cationic states of Na microclusters. Szaniszló, J.; Tamassy-Lentei, I. (Institute Theoretical Physics, Kossuth Lajos University, H-4010 Debrecen, Hung.). *Acta Phys. Chim. Debrecina* 1996, 31, 67-74 (Eng), Kossuth Lajos Tudományegyetem Könyvtárának. The structure and stability of the small neutral, anionic, and cationic sodium microclusters were investigated in the ground state using the ab initio FSGO method. The Na_n^- neg. charged systems proved to be linear; the Na_n neutral and the Na_n^+ cationic clusters ($n = 1-4$) are planar. All of the systems discussed at present are predicted to be electronically and geometrically stable. Calcns. were performed for the atomization energy and the dissociation energies of the clusters.

Na_n^-
 Na_n
 Na_n^+
 меоп.
 аарет
 сmp.
 сmat.

C.A. 1998, 128, N8

Классификация (Dm. 38843)

1997

Na^+
($n=3-9$)

Hideki Tanaka,
Tomoyuki Mizuno et al.

J. Chem. Phys., 1997, 106(10),
4002 -



1998

$N_{a\bar{n}}$
 $N_{a\bar{n}}^+$
 $N_{a\bar{n}}^-$

He, Fu-Cheng; et al.,

$N_{a\bar{n}}_{n \leq 5}$

Guodeng Xue Xiaos Hua-
Xue Xuebao 1998,

meop.
pavet

19(4), 622-625

Call-Lin; III, ●

Na₄⁺

1998

129. 33909p Isomers and Transition States of the Na₄⁺ Clusters. Ab Initio Studies of Geometries and Absorption Spectra. Mishima, Kenji; Yamashita, Koichi; Bandrauk, Andre (Department of Applied Chemistry Graduate School of Engineering, University of Tokyo, Tokyo, Japan 113). *J. Phys. Chem. A* 1998, 102(18), 3157-3161 (Eng), Ameri-

can Chemical Society. Stable isomers, transition states, and their photoabsorption spectra for the Na₄⁺ cluster are detd. by ab initio MRCI calcs. Three stable geometries of symmetry C_{2v}, D_{2h}, and D_{2d} and 2 transition states of symmetry C_s and C₂ are identified. The D_{2d} configuration is a new geometry not previously obtained in ab initio calcs. The photoabsorption spectra of the 3 isomers and the transition states are used to interpret exptl. absorption data. Dissocn. dynamics and possible laser control of isomer populations are discussed in terms of the electronic states of the cluster.

ab initio
расчет
спектров;
динамика
диссоциации
С.А. 1998,

129, №3

Na₄₀

1998

129:45542b Melting and Octupole Deformation of Na₄₀. Ryt-konen, A.; Hakkinen, H.; Manninen, M. (Department of Physics, University of Jyvaskyla, P.O. Box 35, FIN-40351 Jyvaskyla, Finland). *Phys. Rev. Lett.* 1998, 80(18), 3940-3943 (Eng), American Physical Society. The dynamics and electronic structure of the magic Na₄₀ cluster are studied as a function of temp. using an ab initio mol. dynamics method. Na₄₀ is found to undergo a structural transition which can be identified as melting by traditional indicators. Melting transition was obsd. in the region 300-350 K with a latent heat of melting of 11 meV/atom, which is 42% of the bulk value. Octupole deformation is the dominating type of multipole deformations in the temp. range studied (150-550 K). The stability of the deformation type is indicated by the persistently large HOMO-LUMO gap, both in the solid and liq. phases.

аb иницио
расцен


T_m, T_{z2} и др.
e-A. 1998, 129, NY

Na_n

1998

129: 153395q Properties of sodium clusters. Zhang, Fenshou; Ge, Lingxiao (Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou, Peop. Rep. China 730000). *Yuanzihe Wuli Pinglun* 1998, 15(1), 38-42 (Ch), Yuanzihe Wuli Pinglun Bianjibu. Based on tight-binding mol. dynamics, the structural, thermodyn., and collision properties are systematically studied for Na_n. Present calcns. are successful in reproducing some of the exptl. data and agree very well with some other ab initio calcns. We also investigate the transition from solid-like phase to liq.-like phase with increasing temp. for this finite system and the stability of dimer (Na_n)₂ formed in cluster collisions.

свойства,
термодина-
мика столкнов.+
+ ab initio
расчет

C.A. 1998, 129,  12

Na₆

1998

130: 173282z Comparison between 2D and 3D structures of Na₆. Zhang, Fengshou; Wang, Feng (Institute Modern Physics, Academia Sinica, Lanzhou, Peop. Rep. China 730000). *Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao* 1998, 15(4), 497-500 (Ch), Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao Bianjibu. The structural properties for the two lowest energy structures of the Na₆

mp-pa,
morem
panet

isomers (the first one is 2D structure with D_{3h} symmetry and the second one is 3D structure with C_{2v} symmetry) are studied using tight-binding mol. dynamics. The vibrational frequencies of these two structures are calcd. by diagonalization of the Hessian matrix and by using the Fourier transform of velocity auto-correlation function from the trajectories of the distance dependent tight-binding mol. dynamics. Although they have almost the same energy, they have very different eigenfrequencies which correspond to the different structures.

C.A. 1999, 130, NB

1999

F: Nan+

P: 3

132:98415 Electronic states of neutral and ionized
alkali clusters calcul on one-particle models.

Tamura, A. Department of Electronic
Engineering, Saitama Institute of Technology Saitama

369-0293, Japan Eur. Phys. J. D, 9(1-4), 249-252

(English) 1999 We propose a one-electron potential,
having a V-shaped valley at the surface, for an alkali
cluster. The energy levels calcd. by a perturbati

C. A. 2000, 132

method agree with those calcd. by a d. functional method. From those ene levels, we derive the sum of one-particle energies and clarify its correspondence to the total energy per atom. Three-fourths of the summed levels per atom agree with an oscillatory part of the total energy per at adding another perturbation potential, we obtain the size dependence of t ionization energy, which agrees with measured data and the data calcd. by functional method including self-interaction correction.

Nan

Om. 39.871

1999

($n=2-8$)

Zhang F.S., Surand E.
et al.,

смыкнута
и

констан.

cb-ba

Chem. Phys. Lett., 1999,
300, 595-602.

Vibrational properties of

sodium microclusters,



F: Nan+

P: 3 (131:65159 Optical spectra and their moments for sodium clusters, Nan+, with 3 .ltoreq. n .ltoreq. 64. Schmidt, M.; Haberland, H. (Fakultat fur Physik, Universitat Freiburg, Freiburg D-79104, Germany). Eur. Phys. J. D, 6(1), 109-118 (English) 1999 Photoabsorption cross sections for all Na cluster ions, Nan+, with n .ltoreq. 64, were measured at a temp. of ~105 K. The size dependence of the peak positions and widths is discussed. Triaxial deformations are unequivocally obsd. The moments of the optical response are calcd. from the data and their size dependence discussed. The width of the plasmon peak is not understood.

2000

Na₄
Na₈, 1

Kornath, Andreas;
et al.,

оправд.
краснотв
&
манжуре
15 (pt 1,
rials

Schr. Forschungszent,
Juelich, Reihe Energietechn
/ Energy Technol. 2000,
High Temperature Mate-
Chemistry, Part 1), 345-548
Teil. 24, III

2000

F: Nan

P: 3

133:313932 Ab initio calculations for structure and temperature effects on the polarizabilities of Nan (n.ltoreq.20) clusters. Kronik, Leeor; Vasiliev, Igor; Chelikowsky, James R. Department of Chemical Engineering and Materials Science, University of Minnesota, and Minnesota Supercomputing Institute Minneapolis, MN 55455, USA Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., 62(15), 9992-9995 (English) 2000. We present a rigorous, ab initio theor. calcn. of the dependence of Nan cluster



polarizability on cluster size (n.l.toreq.20) obtained by combining ab initio pseudopotentials with a gradient-cor. d. functional. Using mol. dynamics, we find that for clusters as small as 9 atoms, a multitude of degenerate isomers exists even at $T=0$. By calcg. the polarizability of these isomers, we reproduce the generally decreasing nature of the measured polarizability curve, as well as its dips at "magic" nos. corresponding to closed electronic shells. The effect of a finite temp. on the cluster structure suffices to account for most of the quant. discrepancy between theory and expt.

Na₄

Am. 40255, 8" 2000

Wang F., Zhang F.S., Ake Y.,

Chem. Phys. Lett.,

2000, 326, 461-467

Pseudorotating
temperatures:

● Na₄ at finite
light - bin -

ding molecular dynamics
studies.

2000

F: Nan

P: 3

133:64274 A distance dependent tight-binding
molecular dynamics model to collision and
thermodynamical properties of Nan. Zhang, Feng-
Shou; Wang, Feng; Suraud, Eric; Glowinski, Roland

Center of Theoretical Nuclear Physi National
Laboratory of Heavy Ion Lanzhou 730000, Peop.
Rep. China Prog. Theor. Phys. Suppl.,
138(Computational Physics and Related Topics), 72-
77 (English) 2000 A distance dependent tight-
binding mol. dynamics model is introduced. I
applications in studying cluster collisions and
finite temp. properties o are provided.

2000

F: (Na9)2

P: 3

133:125538 Cluster dimer (Na9)2 formation in
cluster-cluster collisions. Zhang, Feng-Shou; Wang,
Feng; Zhu, Zhi-Yuan; Ke, Xue-Zhi Center of
Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of
Heavy Ion Accelerator Lanzhou 730000, Peop. Rep. China
Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao, 17(2), 261-265
(Chinese) 2000. By using tight-binding mol.

dynamics simulations for head-on collisions, we find some evidences of the structure of $(\text{Na}_9)_2$ cluster dimers from the dynamical point of view. The $(\text{Na}_9)_2$ cluster dimer may exist as an intermediate state which decays to a compact structure. Based on a technique called "sharp cooling", a stable cluster dimer $(\text{Na}_9)_2$ is formed at 18 K, whose eigenmode frequencies are obtained with Fourier transform of the velocity auto-correlation function.

Na_n

$n \leq 20$

ab initio

naem

Comp- μ

C.A. 2001, 135, N18

2001

135: 262534d Ab initio structures and polarizabilities of sodium clusters. Kronik, Leeor; Vasiliev, Igor; Jain, Manish; Chelikowsky, James R. (Department of Chemical Engineering and Materials Science, and Minnesota Supercomputing Institute, University of Minnesota, Minneapolis, MN 55455 USA). *J. Chem. Phys.* 2001, 115(9), 4322-4332 (Eng), American Institute of Physics. We present quant. ab initio calcns. for Na cluster structures and polarizabilities, for all cluster sizes up to 20 atoms. Our calcns. are performed by combining an ab initio core-cor. pseudopotential and a gradient-cor. d. functional within a real space approach. We find the cluster bonding to be very floppy and catalog a host of low-energy quasi-degenerate isomers for all second-decade

clusters. The existence of these isomers results in a band of polarizability values for each cluster size even at zero temp. This eliminates any finer structure in the polarizability curve. We further show that the exptl. polarizability values are consistently underestimated by calcns. at zero temp. By computing the effects of structure expansion and distortion due to a finite temp. we arrive at a quant. agreement between theory and expt.

