

Li - Be

Li₂BeF₄
Фторобериллат

исследования
металлов
(фториды)

у:

5

X.1964.4

4 Б152. Колебательные спектры фторобериллатов щелочных металлов типа M_2BeF_4 . Григорьев А. И., Орлова Ю. В., Сипачева В. А., Новоселова А. В. «Докл. АН СССР», 1963, 152, № 1, 134—136

Исследованы ИК-спектры поглощения в твердом состоянии в области $300-1000\text{ см}^{-1}$ Li_2BeF_4 (I), Na_2BeF_4 (II), K_2BeF_4 (III), Rb_2BeF_4 (IV), Cs_2BeF_4 (V), а также спектр комб. расс. твердого III. Определены значения частот нормальных колебаний фторобериллатов (в см^{-1}): $\nu_1(A_1)$: I 616, II 550, 567; III 560; IV 551; V 540; $\nu_2(E)$: III 260; $\nu_3(F_2)$: I 785, 809, 864; II 767, 859; III 805, 835; IV 797, плечо; V 780, плечо; $\nu_4(F_2)$: I 364, 330; II 376; III 386; IV 379; V 372. На основании расщепления полосы трижды вырожденного вал. кол. $\nu_3(F_2)$ иону BeF_4^{2-} приписывается симметрия: в соединенных II, III, IV и V — C_{3v} ; в соединении I C_{2v} , C_s или C_1 . Значение силовой постоянной связи $Be-F$, вычисленной в простом приближении валентных сил, равно $3,5 \cdot 10^{-5}$ дн/см. Реферат авторов

1963



$\text{LiBeF}_3(2)$ Lorenzelli V., Gesmundo F. 1964
3310

u.n. Lincei - Rend. Sci fis. mat. e nat. ✓
Мазаренко 1964, 37, 70

6

$\text{LiBeF}_3(2a)$ ●

u.n.

LiBeF_3 , NaAlF_6 , KFeCl_3 (C. J. P. 1967)
to magnesium. (6-60) X-5827

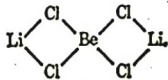
Buechler A., Bernowitz - Mattuck J.
U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Fed. Inform.
AD 653163, avail. CFSI, 122pp, 1967.

Basalus many compounds of
the alkali metals. (C. J. P. 1967, 10, 437397)

1968

Li₂BeCl₄
C. A. 1968. 69. 12

46415s Lithium tetrachloroberyllate. Semenenko, K. N.; Surov, V. N.; Alymova, T. E. (Mosk. Gos. Univ. im. Lomonosova, Moscow, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1968, 13(6), 1699-1701 (Russ). The phase diagram of the LiCl-BeCl₂ system was detd. at 20-60 mole % BeCl₂. The eutectic in this region is at 51-2% BeCl₂ and $\sim 312^\circ$, in contrast to the values of Schmidt (1926) of 56% BeCl₂ and $\sim 300^\circ$. Li₂BeCl₄ is not isomorphous with the Na and K analogs. The lattice parameters of Li₂BeCl₄ are a 6.32, b 7.16, c 5.92 Å., β $91^\circ 15'$; $Z = 2$. The ir spectrum of



Li₂BeCl₄ in the 400-600 cm.⁻¹ region suggests a structure of the
Mary Frances Richardson

C. A. 1968. 69. 12

LiBeLi

Kaufman Y. Y. 1969

кв-мех
расчет

U.S. Clearinghouse
Fed. Sci. Tech. Inform.,
AD 1969, AD-851300,
228.

● $(Cu. BeH_2)_{III}$

1970

Li Be Li
= -

15 Б20. Расчеты по самосогласованному методу МО ЛКАО с помощью гауссовых базисных функций. VI. LiBeLi. Kaufman Joyce J., Sachs Lester M. LCAO—MO—SCF calculations using Gaussian basis functions. VI. LiBeLi. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 2, 638—644 (англ.)

Do.
сим. и ант.

По методу самосогласованных МО ЛКАО произведен расчет линейной молекулы LiBeLi. На каждом из трех центров учитывалось 9 гауссовых s-функций и 5 p-функций. Минимум энергии возникает при расстоянии Li—Be 4,837 ат. ед. С учетом поправок на энергию корреляции определена энергия диссоциации по схеме $\text{LiBeLi} \rightarrow \text{Be} + \text{Li}_2$ (0,733 эв). Силовая постоянная связи Li—Be найдена равной 0,4249 мдин/А; ей соответствуют частоты сим. и антисим. валентных колебаний 322 см^{-1} и 513 см^{-1} . Пред. сообщ. см. РЖХим, 1970, 10Б13.
Т. К. Ребане

X. 1970 15

1970

Li Be Li

8 Д154. Расчеты по методу самосогласованных МО ЛКАО с гауссовыми базисными функциями. VI. LiBeLi. Kaufman Joyce J., Sachs Lester M. LCAO-MO-SCF calculations using Gaussian basis functions. VI. LiBeLi. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 2, 638—644 (англ.)

Методом Рутана в базисе из гауссовых ф-ций исследовано электронное строение LiBeLi в предполагаемом $^1\Sigma_g^+$ -основном состоянии для интервала расстояний Be—Li 4,0—10,0 ат. ед. Обнаружено, что LiBeLi является стабильной линейной системой с равновесной длиной связи 4,837 ат. ед. и энергией диссоциации на атомы 1,5165 эв. Валентная силовая постоянная найдена равной 0,4249 мдин/Å. С ее помощью в приближении валентно-силового поля без учета взаимодействия между связями

Уе.

До

вал. пост.

У;

ф. 1970. 88

частоты симметричных и антисимметричных валентных колебаний оценены в 322 и 514 см^{-1} соответственно, деформационных колебаний в 89,68 см^{-1} . Проведен анализ заселенностей и обсуждена природа связи в молекуле. Авторы полагают, что может быть получен сплав LiBeLi , который должен быть более плотным, чем металлич. Li и Be . Ч. V см. реф. 8Д153. В. Л. Лебедев

1970

Li Be Li

70740b LCAO-MO-SCF calculations-using Gaussian basis functions. VI. LiBeLi. Kaufman, Joyce J.; Sachs, Lester M. (Res. Inst. for Advan. Stud., Martin Marietta Corp., Baltimore, Md.). *J. Chem. Phys.* 1970, 52(2), 638-44 (Eng). A LCAO-MO-SCF investigation of LiBeLi utilizing Gaussian 9·5^p basis functions established LiBeLi to be a stable species, linear in its ground state. The equil. bond distance was detd., and force consts. and normal frequencies were obtained. By using a procedure for estg. the correlation energy similar to the one they employed successfully for BeH₂, they detd. the dissocn. energy of LiBeLi. It may be possible to form an LiBeLi alloy which would be denser than either Li metal or Be metal themselves.

RCJQ

Do
 ul. m.
 Courten

C.A. 1970

72.14

$\text{LiBeF}_3(2)$ Quist A. S., Bates J. B., Boyd ¹⁹⁷² G. E.
3906

и.п.
Мазаренко

J. Phys. Chem. 1972, 76, 78
p.

7

LiBeF_3 (gas) ●

и.п.

$\text{LiBeF}_3(1)$ 1972
969 Стриженов В.П., Брезник В.В.,
Брезник Ю.А.

Мазаренко
и.п. М. структурн. химия. 1972, 13, 321

2

$\text{LiBeF}_3(2)$ ●

и.п.

$\text{LiBeF}_3(2)$
149

Брезгин Ю. А.

1972

Авторед. дис. ... канд. хим. наук.
М.: МГУ, 1972

Автореферат диссерт. на соиск.
учен. степени канд. хим. наук.
Москва, МГУ, 1972.

м.п.

Мазаренко

1

$\text{LiBeF}_3(2)$

м.п.

LiCH_3 ; HBeCH_3 ; HBeNH_2 (M.H., U., L., Te, 1973)
IX 4370 paciem

Baird N.C., Barr R.F., Datta R.K.,

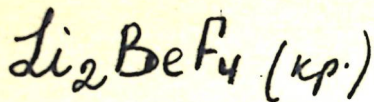
J. Organometal Chem., 1973, 59, 65-81
(anal.)

The bonding, structure and energetics of LiCH_3 , HBeCH_3 , HBeNH_2 and their dimers: Ab initio molecular orbital calculations.

Pte Xuu, 1974, 5538

10

(92)



1973

Сущ. ност.

Смп. нафад

7881y Crystal forces in lithium tetrafluoroberyllate. McGinnety, John A. (Sterling Chem. Lab., Yale Univ., New Haven, Conn.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(6), 3442-3 (Eng). Calcns., by the previously described (M., 1972) crystal-force-field method, of the charge d. on the F atom, the stretching force const. for the Be-F bond, and the length of the Be-F bond in cryst. Li_2BeF_4 showed that the Be-F bonds probably have some covalent character, and that there are probably weaker covalent interactions between the Li and F atoms in the crystal.

C.A. 1974. 80. N2

40715.1256

LiBe 29864

OL

1974

Ch, TC, Ph

*y5659

Blustin Peter H., Linnett John W.
Applications of a simple molecular
wavefunction. Part 6. FSGO open-shell
calculations on first-row diatomic molecu-
lar systems. (см. Li_2^+ ; III)

"J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1974,

Part 2, 70, N 5, 826-836 (англ.)

128

134

0151

ВИНИТИ

Li_2 ; Li_2^- ; LiH ; BeH^+ ; Be_2^- ; $\left(\begin{array}{l} \text{Ei, u.n.,} \\ \text{pacrim} \end{array} \right)$ 1974
 LiBe ; CH ; CH^+ ; NH^+ ; OH 4703

Blustin P.H., Linnett J.W., ~~IX~~ ~~6557~~

J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1974,
Part 2, 70, N5, 837-852 (ans.)

Applications of a simple molecular
wavefunction. Part 6. FSGO open-
shell calculations on first-row
diatomic molecular systems. 6

PrXIII, 1974, 23522 10

LiBeF_3 (raz)

1974

17062f Thermodynamic functions and molecular constants for some complex M^1BeF_3 fluorides. Giricheva, N. I.; Babkova, V. A.; Morozov, E. V.; Krasnov, K. S.; Danilova, T.; Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). Zh. Fiz. Khim. 1974, 48(6), 1611-12 (Russ). Addnl. data considered in abstracting and indexing are available from a source cited in the original document. Assuming C_{2v} symmetry for the BeF_3^- ion, thermodynamic functions of gaseous M^1BeF_3 ($\text{M}^1 = \text{Li, Na, K, Rb, and Cs}$) were calcd. over the temp. range 298.15-5000°K by using interat. distances and force consts. Vibrational frequencies of M^1BeF_3 were given. J. Hala

u.n,
T.gop

C.A. 1974. 8/ w26

(+5) (+6) m.gop.



LiBeF_3 (2) 223
Тиршова Н.И., Бобкова В.А., 1974
Миронова В.В., Краснов К.С.,
Данилова Т.Т.

Назаренко
~~Руководителем~~ деп. ВИНТИ. Деп. № 515-74.
М., 1974.

М.И.

М.Ф.

9

LiBeF_3 (202) ●

М.И.

М.Ф.-ИИИ

LiBeF_3 Li_2BeF_4

1975

11 Б272. Силовые постоянные плоских колебаний LiBeF_3 и Li_2BeF_4 . Cyvin B. N., Cyvin S. J. IN-plane force constants for LiBeF_3 and Li_2BeF_4 . «J. Mol. Struct.», 1975, 24, № 1, 177—185 (англ.)

Проведен анализ нормальных колебаний LiBeF_3 (I) и Li_2BeF_4 (II) (плоская мостиковая структура, симметрия C_{2v} для I и II). Получены алгебраич. и численные выражения, связывающие силовые постоянные в координатах симметрии и валентные силовые постоянные (вместе с соотношениями избыточности) для классов A_1 и B_2 в I и A_1 для II. Коэф. в этих выражениях в большой степени зависят от структурных параметров.

Резюме

X-5-8040
X-5588-5

x 1975 N11

сил.
пост.

LiBeF_3 , Li_2BeF_4

1975

5 Д269. Силовые постоянные для плоских колебаний молекул LiBeF_3 и Li_2BeF_4 . Cyvin B. N., Cyvin S. J. IN-plane force constants for LiBeF_3 and Li_2BeF_4 . «J. Mol. Struct.», 1975, 24, № 1, 177—185 (англ.)

Выполнен анализ норм. координат молекул LiBeF_3 и Li_2BeF_4 при предположении, что эти молекулы имеют плоскую циклич. структуру с симметрией C_{2v} . Приведены координаты симметрии, дополнительные соотношения между координатами и выражения симметризованных силовых постоянных через валентные силовые постоянные для плоских колебаний этих молекул.

М. Р. Алнев

Сил.
пост.

Х-4-8040
ВФ-8855-Х

ф. 1975. N5

LiBeF_3 ; Li_2BeF_4

1975.

77350q in-plane force constants for lithium trifluoroberyllate and lithium tetrafluoroberyllate. Cyvin, B. N.; Cyvin, S. J. (Tech. Univ. Norway, Trondheim, Norway). *J. Mol. Struct.* 1975, 24(1), 177-85 (Eng.). Comments are given on different representations of the force fields for LiBeF_3 and Li_2BeF_4 . For both structures a planar bridged C_{2v} model was adopted. A representation (F) in terms of symmetry coordinates is obtained by a transformation of a force-const. matrix which is based on valence coordinates with redundancies. Algebraical and numerical expressions for the connection between these 2 kinds of force consts. are derived in the cases of species A_1 and B_2 for the LiBeF_3 model and A_1 for Li_2BeF_4 . In the latter case, the influence of structural parameters on the relations in question was found to be substantial.

См. п. 1
на стр. 4.
Е. У. 1.
но см.

C.A. 1975 82 N12

X-5588-1
45-8040
bp-8855-X

LiBeF_3

Li_2BeF_4

$(\text{LiBeF}_3)_2$

(I)

1408-54

Х. 1475 N12

12 Б207. Спектры инфракрасного поглощения и анализ нормальных колебаний LiBeF_3 и родственных соединений Li_2BeF_4 и $(\text{LiBeF}_3)_2$. Snelson, Alan, Cyvin B. N., Cyvin S. J. The infrared matrix isolation spectra and normal coordinate analysis of LiBeF_3 and the related species Li_2BeF_4 and $(\text{LiBeF}_3)_2$. «J. Mol. Struct.», 1975, 24, № 1, 165—176 (англ.)

Получены и проанализированы ИК-спектры соединений LiBeF_3 (I), Li_2BeF_4 (II) и $(\text{LiBeF}_3)_2$ (III) в неоновой матрице в диапазоне частот $2000\text{--}190\text{ см}^{-1}$ при $t = 4,2^\circ\text{K}$. Идентификация изучаемых соединений проводилась на основе имеющихся масс-спектрометрических данных, без контроля конц-ии. Отнесение проведено на основе измерения частот и относит. интенсивностей полос. Исходя из предполагаемой симметрии C_{2v} для I вычислены значения силовых постоянных связей, на основе к-рых проведено отнесение полос в спектрах изотопозамещенных $^6\text{LiBeF}_3$ и $^7\text{LiBeF}_3$. Отнесение колебаний молекул II и III проведено в предположении, что их силовые постоянные одинаковы и равны силовым постоянным I. Отнесение сильно зависит от исходного силового поля и, следовательно, не однозначно для всех неплоских колебаний. Проведена оценка среднеквадратичных амплитуд колебаний при t -рах 25, 500 и 1000° .
Б. Г. Антипов

1975

X-2588-64

LiBeF_3 ; $(\text{LiBeF}_3)_2$

1975

Li_2BeF_4

№ 5 D579. ИК-спектры и анализ нормальных координат LiBeF_3 и соединений Li_2BeF_4 и $(\text{LiBeF}_3)_2$, изолированных в матрице. Snelson Alan, Cyvin B. N., Cyvin S. J. The infrared matrix isolation spectra and normal coordinate analysis of LiBeF_3 and the related species LiBeF_3 and the related species Li_2BeF_4 and $(\text{LiBeF}_3)_2$. «J. Mol. Struct.», 1975, 24, № 1, 165—176 (англ.)

Vi; till.
Koei.

Получены ИК-спектры поглощения в области 4000—200 cm^{-1} соединений LiBeF_3 , $(\text{LiBeF}_3)_2$ и Li_2BeF_4 , изолированных в матрице из неона при т-ре жидкого гелия. Исследованные молекулы образовывались при пропускании паров BeF_2 над расплавом LiF в двойной ячейке Кнудсена. Проведены эксперименты с образцами, обогащенными изотопом ^6Li . Выполнено отнесение экспери-

X-1408-5K
BP-8856-X

Ф. 1975. N 5

Ⓢ (+1) Енабу.

ментальных колебательных частот. Проведен анализ норм. координат и рассчитаны силовые постоянные всех трех соединений. При этом использовались модели LiBeF_3 и Li_2BeF_4 симметрии C_{2v} и $(\text{LiBeF}_3)_2$ симметрии D_{2h} . Полученный набор силовых постоянных для LiBeF_3 хорошо воспроизводит наблюдаемые колебательные частоты и изотопные сдвиги, что подтверждает правильность отнесения. Расчет для $(\text{LiBeF}_3)_2$ и Li_2BeF_4 авторы считают только предварительным, поскольку полученные силовые постоянные сильно зависят от структурных параметров, выбор которых в настоящее время достаточно произволен. Рассчитаны средние амплитуды колебаний для всех межатомных расстояний в $^6\text{LiBeF}_3$ и $^7\text{LiBeF}_3$. Библ. 17. Ю. М. Л.

1975

 LiBeF_3 ; Li_2BeF_4
 $(\text{LiBeF}_3)_2$

 J.
 C.S. No. 1.

49522d Infrared matrix isolation spectra and normal coordinate analysis of lithium trifluoroberyllate and the related species (lithium tetrafluoroberyllate and lithium trifluoroberyllate dimer). Snelson, Alan; Cyvin, B. N.; Cyvin, S. J. (Res. Inst., Illinois Inst. Technol., Chicago, Ill.). *J. Mol. Struct.* 1975, 24(1), 165-76 (Eng). BeF_2 vapor was reacted with ^6LiF and ^7LiF at $900-1000^\circ$ in an effusion tube. The ir spectrum of the effusate was obtained in a Ne matrix, at $190-4000\text{ cm}^{-1}$. One mixed halide, LiBeF_3 was identified and the existence of $(\text{LiBeF}_3)_2$ or Li_2BeF_4 inferred. For LiBeF_3 , 7 of the possible 9 ir frequencies were obsd. A normal coordinate anal. for LiBeF_3 is presented and used to assign the exptl. frequencies. Calcd. mean amplitudes of vibration and calcd. frequencies from normal coordinate analyses of Li_2BeF_4 and $(\text{LiBeF}_3)_2$ are reported.

 X-15-8041
 1508-54X
 8856-X
 BP-8856-X

C.A. 1975. 82 N8.

LiBeH₃

оттиски 5976

1976

Болдосерев А.И. и др.

кв. мех.
расчет
показат.
поверен.

тезисы: Всесоюзн. сим-
позиум по изучению свойств
и пер. м. и. в. простых
веществ. Сводный.

Москва, ВНИИХ, 1976, с 22.

$\text{LiBeF}_3(2)$ Jain Y. S.
2827

1976

M. N. Indian J. Phys. 1976, 50, 206

Mazarenko

8

$\text{LiBeF}_3(2a3)$ ●

M. N.

LiBeH_3

стти см 5720

1977

1 Д160. Неэмпирические расчеты структуры молекулы комплекса LiBeH_3 . Boldyrev A. I., Charkin O. P., Rambidi N. G., Avdeev V. I. Ab initio calculation of the structure of a complex LiBeH_3 molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 50, № 2, 239—242 (англ.)

расчет
структ.
молекулы

Методом Хартри—Фока—Рутана в гауссовом базисе исследованы электронная структура молекулы LiBeH_3 и основные характеристики потенц. поверхности движения иона Li^+ вблизи иона BeH_3^- . Наиболее устойчива плоская структура, в которой атом лития связан с двумя атомами водорода. Присутствие катиона сильно влияет на силовое поле аниона. Движение атома лития сопровождается существенным перераспределением («осцилляцией») электронной плотности в системе. Молекула LiBeH_3 является более жесткой относительно конформационных превращений системой, чем LiBH_4 .

В. И. Барановский

Ф. 1978
N 1

LiBeH_3

сттм 5720

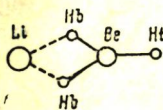
1977

3 Б46. Неэмпирический расчет структуры комплексной молекулы LiBeH_3 . Boldyrev A. I., Chargin O. P., Rambidi N. G., Avdeev V. I. Ab initio calculation of the structure of a complex LiBeH_3 molecule. Chem. Phys. Lett., 1977, 50, № 2, 239—242 (англ.)

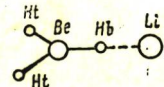
Выполнен неэмпирич. расчет электронного строения комплексной молекулы LiBeH_3 с различным расположением катиона Li^+ относительно аниона BeH_3^- (конфигурации а, б, в). Результаты, полученные при фиксиро-

геометрич.
кв. ласс.
расчет

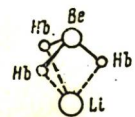
мол
ст



а



б



в

2. 1978,
N3

нр

ванной конфигурации аниона (симметрия D_{3h} , оптимизированная геометрия для изолированного BeH_3^-), показали, что наиболее стабильной является конфигурация а (теплота образования из LiH и BeH_2 32,5 ккал). Далее следуют конфигурации б и в с теплотами обра-

(7)

ΔH

зования 16,2 и 5,7 ккал, соотв. Из сравнения с аналогичными расчетами комплексной молекулы LiBH_4 («Chem. Phys. Lett.», 1976, 44, 20) следует, что LiBeH_3 является более жесткой по отношению к переходам между конфигурациями $a \rightarrow b$ и $a \rightarrow v$. Анализ заселенностей указывает на значит. различие в распределении электронной плотности для различных конфигураций (в основном в области связывания $\text{Li}-\text{Be}$). Полная оптимизация геометрии (в рамках симметрии C_{2v} для конфигураций a и b , и C_{3v} для конфигурации v) приводит к значит. деформации аниона. Расстояния $\text{Be}-\text{H}_a$ становятся короче (на $\sim 0,09 \text{ \AA}$), а связи $\text{Be}-\text{H}_b$ удлиняются, в соответствии с этим изменяются и силовые постоянные связей $\text{Be}-\text{H}$. Уменьшаются углы H_bBeH_b . Кроме того, конфигурация v становится более стабильной, чем b . Результаты исследования указывают на некорректность модельного ионного подхода к молекулам рассмотренного типа и на необходимость динамич. рассмотрения.

М. Гофман

LiBeH₃

ommuc 5720

1974

87: 189746h Ab initio calculation of the structure of a complex lithium beryllium hydride (LiBeH₃) molecule. Boldyrev, A. I.; Charkin, O. P.; Rambidi, N. G.; Avdeev, V. I. (Inst. New Chem. Probl., Chernogolovka, USSR). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 50(2), 239-42 (Eng). Ab-initio calcns. were made for the areas of the potential surface of the LiBeH₃ mol. in the vicinity of configurations where the Li⁺ cation is located over the edge, the vertex, and the plane of the BeH₃⁻ anion. Features of the polytopic bond in complex LiMH_{k+1} mols. are discussed.

Кб. max
факт

C.A. 1977, 87, N24

LiBeH_3

сттм 6134

1974

✓ 2 Д135. Ab initio расчеты потенциальных поверхностей и геометрии нежестких молекул. II. Комплексная молекула LiBeH_3 . Болдырев А. И., Чаркин О. П. «Ж. структур. химии», 1977, 18, № 5, 783—794

В рамках неэмпирич. метода Хартри—Фока—Рутана выполнены расчеты участков потенц. поверхности вблизи трех наиболее интересных конфигураций комплексной молекулы LiBeH_3 . Результаты сравниваются с данными, полученными ранее для LiBH_4 и NaBH_4 . Обсуждается природа политопной связи в комплексных молекулах типа LMX_{h+1} , состоящих из анкона MX_{-h+1}^- и внешнесферного катиона L^+ , связанных преимущественно ионными силами. Ч. 1. см. РЖФиз, 1977, 9Д196.

Резюме

потенц
поверхности
расчет

Ф. 1978 № 2

LiBeH_3

оттиск 6134

1974

(4 670.) Ab initio расчеты потенциальных поверхностей и геометрии нежестких молекул. II. Комплексная молекула LiBeH_3 . Болдырев А. И., Чаркин О. П. «Ж. структур. химии», 1977, 18, № 5, 783—794

В рамках неэмпирич. метода Хартри — Фока — Рута-на выполнены расчеты участков потенциальной поверхности вблизи трех наиболее интересных конфигураций комплексной молекулы LiBeH_3 . Результаты сравниваются с данными, полученными ранее для LiBH_4 и NaBH_4 . Обсуждается природа полиатомной связи в комплексных молекулах типа LMX_{k+1} , состоящий из аниона MX_{k+1}^- и внешнесферного катиона L^+ , связанных преимущественно ионными силами. Сообщ. I см. «Ж. структур. химии», 1977, 18, 16.

Резюме

расчет
потенциальной
энергии
поверхности

ж., 1978, N 4

LiBeH_3

number 6134

1977

Ref. acc.
facter

88: 27971w Ab initio calculations of potential surfaces and geometry of nonrigid molecules. II. Complex molecule of lithium trihydroberyllate. Boldyrev, A. I.; Charkin, O. P. (Inst. Nov. Khim. Probl., Moscow, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1977, 18(5), 783-94 (Russ). Sections of the potential surface near the 3 most interesting configurations of the complex mol. LiBeH_3 were calcd. by means of the nonempirical Hartree-Fock-Roothaan method. The results are comparable with data obtained earlier for LiBH_4 and NaBH_4 . The nature of polytopic bonds is discussed in complex mols. of the type LMX_{k+1} , consisting of the anion MX_{-k+1}^- and the externally spherical cation L^+ , bound predominantly by ionic forces.



C.A., 1978, 88, N4

0885
MCM

20. $\Delta H^\ddagger$ (Li_2 , LiBeH , LiBH_2 , LiCH_3 , LiNH_2 , LiOH ,
 HBeLi , HBe_2H , HBeBH_2 , HBeCH_3 , HBeCN , LiF
 HBeNH_2 , HBeCH , HBeF , Be_2 , BeBH , BeCH_2 , BeNH ,
 BeO)

see also (Li_2H_2 , LiHBeH , LiH_2BH_2 , BeH_2LiH ,
 BeH_3 ; BeH_2BH_2 , HLiNH_2 , HBeH_2NH_2 , HLiCH_2 ,
 HBeH_2OH_2 , HLiFH , HBeH_2FH) BX-1035

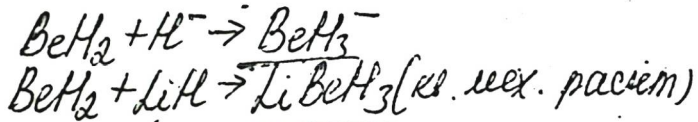
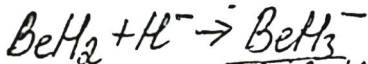
Dill J. D., Schleyer P. V. R., Binkley J. S.,

Pople J. A.,

J. Amer. Chem. Soc., 1977, 99, 119, 6159-6173 (accs)
 Molecular orbital theory of the electronic
 structure of mol-ecules. 34. Structures
 and energies of small
 MCM, 1978, 3 2 112 10, u (p)

ВХ-1804

1978



Болдырев А.И., Сухачев Л.М.,
Чаркин О.П.,

Всес. Чугаев. Совещ. по химии
координац. соед ич., 1978, 51.

Теорет. исследов. элементар. процессов

С.А. 1979, 90, N 16, 127924t

10



ВХ - 1392

1978

BeH_3^- , LiBeH_3 (потенц. поверхн.)

Болдырев А.И., Сухачев Л.П., Чар-
кин О.П.,

Коорд. хим. 1978, 4(11), 1626-34.

Потенц. поверхн. и электрон. плот-
ность в комплекс. реакциях,,

С.А. 1979, 90, N 6, 441472

10



статья, 104 аф

LiBeH_4

оттиски 9058

1979

9 Б12. Ab initio расчет потенциальных поверхностей и геометрии нежестких молекул. IV. Изоструктурный ряд — LiBeH_4^- — LiBH_4 — LiCH_4^+ . Болдырев А. И., Чаркин О. И. «Ж. структур. химии», 1979, 20, № 6, 969—977

В рамках неэмпирич. метода Хартри — Фока — Рута-на выполнены расчеты участков потенциальной поверхности (ПП) вблизи трех конфигураций, отвечающих экстремальным точкам ПП ионов LiBeH_4^- и LiCH_4^+ . Сравнение энергетич. характеристик и изменений распределения электронной плотности в рядах LiBeH_4^- — LiBH_4 — LiCH_4^+ и LiBeH_4^- — LiBeH_3 показало, что структурная нежесткость значительно сильнее зависит от геометрич. строения аниона, чем от природы связи как во внешней, так и во внутренней сфере комплекса. Сообщ. III см. «Ж. структур. химии», 1978, 19, 203.

Резюме

кв. мех.
расст

(+2) 17

2.1980.19



кв. мейх.
расчет

(+1)

Ф. 1980
N 5

Омичес 9058

1979

Болдырев А. И. и др.

5 Д156. Ab initio расчет потенциальных/поверхностей и геометрии нежестких молекул. IV. Изоструктурный ряд — LiBeH_4^- — LiBH_4^- — LiCH_4^+ . «Ж. структур. химии», 1979, 20, № 6, 969—977.

В рамках неэмпирич. метода Хартри — Фока — Рутана выполнены расчеты участков потенц. поверхности (ПП) вблизи трех конфигураций, отвечающих экстремальным точкам ПП ионов LiBeH_4^- и LiCH_4^+ . Сравнение энергетич. характеристик и изменений в распределении электронной плотности в рядах молекул LiBeH_4^- — LiBH_4^- — LiCH_4^+ и LiBeH_4^- — LiBeH_3 показало, что структурная нежесткость значительно сильнее зависит от геометрич. строения аниона, чем от природы связи как во внешней, так и во внутренней сфере комплекса. Ч. III см. Болдырев А. И. и др. «Ж. структ. химии», 1978, 19, 203.

LiBeH₃

1979

7 Б23. Теоретическое исследование элементарной реакции комплексообразования $\text{LiH} + \text{BeH}_2 \rightarrow \text{LiBeH}_3$. Чаркин О. П., Болдырев А. И., Суханов Л. П. «Координац. химия», 1979, 5, № 12, 1747—1758

кв. мех. расчет

В рамках неэмпирич. метода Хартри — Фока — Рутана в базисе гауссовых ф-ций Роса и Зигбана выполнены расчеты различных участков потенциальной поверхности элементарной р-ции комплексообразования $\text{LiH} + \text{BeH}_2 \rightarrow \text{LiBeH}_3$. Приведены карты потенциальной поверхности, с помощью к-рых рассмотрены электронный механизм элементарных процессов комплексообразования и влияние взаимной ориентации реагентов на механизм р-ции. Обсуждены стабильность молекулы LiBeH_3 к различным каналам диссоциации и различные аспекты структурной нежесткости комплексов $\text{L}[\text{X}_{k+1}]$ при надбарьерном возбуждении. Литературный обзор

Х. 1980. № 7

LiBeH₃

Omnick 16405

1979

92: 99850m Theoretical study of the elementary complexing reaction $\text{LiH} + \text{BeH}_2 \rightarrow \text{LiBeH}_3$. Charkin, O. P.; Boldyrev, A. I.; Sukhanov, L. P. (Inst. Nov. Khim. Probl., Moscow, USSR). *Koord. Khim.* 1979, 5(12), 1747-58 (Russ). An ab initio calcn. within the Hartree Fock-Roothaan method was made of the potential surface for the title reaction by taking into consideration various orientations of the approaching reactant mols. A Mulliken population anal. along the reaction min. energy path (MEP) was made. The monotonic redistribution of electron d. corresponds to a monotonic (barrierless) character of the potential surface along MEP. The energies of unimol. disocn. of LiBeH_3 into different sets of products were calcd. The energetically most favorable disocn. of LiBeH_3 is into LiH and BeH_2 .

(80)
kb. excx.
paccr

C.A. 1980. 92, N12

LiBeF_3

OMMUCK 9056

1979

Кб. учк
фактсм.

92: 65056s Theoretical study of the stability and structure of lithium trihydroberyllate, lithium trifluoroberyllate, and lithium nitrate molecules using ab initio calculations. Zakzhevskii, V. G.; Boldyrev, A. I.; Charkin, O. P.; Bozhenko, K. V.; Klimenko, N. M. (USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1979, 24(12), 3171-6 (Russ). Calcs. were made with the Hartree-Fock-Roothaan method and the B. Roos and P. Siegbahn (1970) basis. The bidentate structure of LiBeF_3 is the most stable one; interat. distances Li-F and Be-F agree within $\pm 0.03 \text{ \AA}$ with the exptl. data. Comparison is made with analogous calcs. for LiBeH_3 and LiNO_3 . The geometric structure of the anionic core is deformed by the cation. Thus, the assumption of rigid anion is incorrect.

I - 10421

C.A. 1080. 62, N8

LiBeH₃

LiBeF₃

LiNO₃

Оттиски 9056

1979

3 Д131. Теоретическое исследование стабильности и структуры молекул LiBeH₃, LiBeF₃ и LiNO₃ с помощью расчетов АВ INITIO. Закжевский В. Т., Болдырев А. И., Чаркин О. П., Боженко К. В., Клименко Н. М. «Ж. неорган. химии», 1979, 24, № 12, 3171—3176

В рамках метода Хартри — Фока — Рутана выполнены расчеты потенц. поверхности молекулы LiBeF₃. Найдено, что основная «бидентатная» структура (симметрия C_{2v}) значительно выгоднее остальных структур и молекула LiBeF₃ оказывается жесткой к миграции катиона вокруг аниона. Рассчитанная теплота комплексообразования и межъядерные расстояния Li—F и Be—F в пределах 2 ккал и 0,03 Å совпадают с эксперим. значениями.

Резюме

молекулы.
симметрия
кв. иск. расче

Уб, (АН Комитет по Физ.-Хим. Науч.)

X - 10421

Ф. 1980. №3

23 27

LiBeH_3

LiBeF_3

LiNO_3

1049

кв. лек. (2)
расчет

☑

X1980.N6

6 Б50. Теоретическое исследование стабильности и структуры молекул LiBeH_3 , LiBeF_3 и LiNO_3 с помощью расчетов АВ INITIO. Закжевский В. Г., Волдырев А. И., Чаркин О. П., Боженко К. В., Клименко Н. М. «Ж. неорганической химии», 1979, 24, № 12, 3171—3176

В рамках метода Хартри—Фока—Рутана выполнены расчеты (с использованием базиса Роса—Зигбана, экстремальные и седловые точки уточнялись с базисами Хузинаги—Даннинга 9s5p и 10s6p в двух- и трехэкспонентной контракции) потенциальной поверхности молекулы LiBeF_3 . Найдено, что основная «бидентатная» структура (симметрия C_{2v}) значительно выгоднее остальных структур и молекула LiBeF_3 оказывается жесткой к миграции катиона вокруг аниона. Рассчитанная теплота комплексообразования и межъядерные расстояния Li—F и Be—F в пределах 2 ккал и 0,03 Å совпадают с эксперим. значениями. Результаты сравниваются с результатами аналогичных расчетов для молекул LiBeH_3 и LiNO_3 . Отмечается значит. деформация геометрич. остова аниона под влиянием катиона и непригодность приближения правильного жесткого аниона при описании структуры комплексных фторидов $\text{L}[\text{MF}_{k+1}]$.

Резюме

1943

9056

См. также

LiBeH_3

LiBH_4

LiCH_5

BeBH_5

кв. мех.
расчет

(+3) IX

Х. 1981 N2

статья 9879

1980

2 Б64. Исследование некоторых систем с водородными мостиками с использованием модели плавающих сферических гауссовых орбиталей. LiBeH_3 , LiBH_4 , LiCH_5 и BeBH_5 . Bhargava Shobha, Ray N. K. Floating spherical Gaussian orbital model study of some hydrogen-bridged systems: LiBeH_3 , LiBH_4 , LiCH_5 , and BeBH_5 . «Int. J. Quantum Chem.», 1980, 17, № 5, 907—914 (англ.; рез. франц., нем.)

Выполнены неэмпирич. расчеты молекул LiBeH_3 , LiBH_4 , LiCH_5 и BeBH_5 в рамках модели плавающих сферич. гауссовых орбиталей (ПСГО). Для каждой молекулы исследованы три геометрич. конфигурации, отвечающих наличию одного, двух и трех водородных мостиков. Согласно полученным результатам, для LiBeH_3 , LiCH_5 и BeBH_5 наиболее устойчивы конфигурации с двумя мостиками, а для LiBH_4 — конфигурация с тремя мостиками, причем для BeBH_5 различие в энергиях между изомерами с двумя и тремя мостиками очень мало. Определены равновесные значения геометрич. параметров для всех устойчивых конфигураций. Отмечено хорошее согласие с результатами расчета в

миним. базисе ОСТ — ЗГФ. Показано, что для рассмотренных систем между орбитальными энергиями модели ПСГО и хартри-фоковскими орбитальными энергиями существует линейная корреляция. Следуя Матликену, авторы рассматривают этот факт как подтверждение сбалансированности базиса ПСГО, к-рая и

позволяет успешно предсказывать молек. св-ва, несмотря на значительную ошибку в полной энергии.

А. В. Абраменков



LiBeH_3

оттиски 9879

1980

LiBH_4

LiCH_5

BeBH_5

раскрит

эл. строения

геометрич.

ф. 1980 № 11

11 Д132. Исследование в модели плавающих сферических гауссовых орбиталей ряда систем с водородными мостиками: LiBeH_3 , LiBH_4 , LiCH_5 и BeBH_5 . Floating spherical Gaussian orbital model study of some hydrogen-bridged systems: LiBeH_3 , LiBH_4 , LiCH_5 , and BeBH_5 . Bhargava Shobha, Ray N. K. «Int. J. Quantum Chem.», 1980, 17, № 5, 907—914 (англ.; рез. франц., нем.)

В модели плавающих сферических гауссовых орбиталей исследовано электронное строение LiBeH_3 (I), LiBH_4 (II), LiCH_5 (III) и BeBH_4 (IV). Рассмотрены структуры, в которых тяжелые атомы связаны друг с другом одним, двумя и тремя водородными мостиками (структуры а, б, в) и проведена оптимизация геомет-



рин. Обнаружено, что для I все 3 структуры стабильны по отношению к распаду на $\text{LiH} + \text{BeH}_2$, но наиболее выгодна Iб, а для II—IIв. Для III по отношению к распаду на $\text{LiH} + \text{CH}_4$ стабильна только IIIб, а для IV — по отношению к распаду на $\text{BeH}_2 + \text{BH}_3$ — IVб и IVв, а IVа вообще нестабильна. Полученные результаты хорошо согласуются с данными других неэмпирич. расчетов. Рассчитанные полные энергии с хорошей точностью аппроксимируются выражением $3/7 (2V_{nn} + V_{ne})$, где V_{nn} и V_{ne} — энергии отталкивания ядер и притяжения электронов к ядрам. Отмечено, что образование комплексов приводит к искажению геометрии гидридов (LiH , BeH_2 , BH_3 и CH_4) и с ростом числа водородных мостиков расстояние металл — металл укорачивается.

В. Л. Лебедев

LiBeH_3

Оттиск 10389

1980

В. 1980 Неэмпирические расчеты поверхностей потенциалов энергии для реакций образования комплекса $\text{BeH}_2 + \text{H}^- \rightarrow \text{BeH}_3^-$ и $\text{BeH}_2 + \text{LiH} \rightarrow \text{LiBeH}_3$. Boldyrev A. J., Sukhanov L. P., Charkin O. P. Ab initio calculations of potential energy surfaces for complex formation reactions $\text{BeH}_2 + \text{H}^- \rightarrow \text{BeH}_3^-$ and $\text{BeH}_2 + \text{LiH} \rightarrow \text{LiBeH}_3$. «Chem. Phys.», 1980, 51, № 1—2, 205—212 (англ.)

поверки
потенц.
энергии.

Для определения пути миним. энергии в р-ции образования комплекса $\text{BeH}_2 + \text{H}^- \rightarrow \text{BeH}_3^-$ и $\text{BeH}_2 + \text{LiH} \rightarrow \text{LiBeH}_3$ выполнены неэмпирич. расчеты соотв-щих Пв потенциальной энергии по методу Хартри — Фока — Рунгана. Показано, что в обоих случаях отсутствует потенциальный барьер. Во всем диапазоне расстояний между реагентами (от бесконечных до равновесных) исследуется влияние взаимной ориентации, а также деформации реагентов на энергию взаимодействия и перераспределение электронной плотности в ходе образования комплекса. Обсуждаются различные пути диссоциации комплекса LiBeH_3 . А. И. Маергойз

В

2:1981.N6

LiBeH_3

omnuch 10389

1980

93: 225807p Ab initio calculations of potential energy surfaces for complex formation reactions beryllium hydride + hydride ion $\rightarrow$ beryllium hydride (BeH_3^-) and beryllium hydride + lithium hydride $\rightarrow$ lithium beryllium hydride. Boldyrev, A. I.; Sukhanov, L. P.; Charkin, O. P. (Inst. New Chem. Probl., 142432 Chernogolovka, USSR). *Chem. Phys.* 1980, 51(1-2), 205-12 (Eng). The potential energy surfaces of complex formation reactions of BeH_3^- ion and LiBeH_3 mol. were calcd. by the Hartree-Fock-Roothaan non-empirical method. The min. energy pathways of both reactions were detd., and both reactions have no barrier. The effect of the mutual orientation and geometric deformation of the LiH and BeH_2 reactants on their interaction energy and the electron d. redistribution during complex formation are investigated. Different pathways of the LiBeH_3 complex dissocn. are briefly discussed.

св. сек.
факт

C.A. 1980. 93, N24

LiBeH

1980

Collins J. B., et al

Кв. мех.
расчет

J. Comput. Chem., 1980, 1,
~~N 1~~, N 1, 81-87.

● (see CH₃H) III

LiBe

omnium 10625

1980

gug R, et al.

Theor. chim. acta, 1980
57, N2, 137-44

кб. мех.
расс. J,
24. 1980

ев. FH-II.

LiBe

LiMg

LiCa

кривые
потенц.
энергии.

□ (+2)

ф. 1980 N 12

оттиск 9940, 36670 1980

12 Д135. Связь в молекулах LiBe, LiMg и LiCa. Molecular bonding in LiBe, LiMg, and LiCa. Jones R. O. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 5, 3197—3200 (англ.)

Методом функционала плотности исследованы основное $2\Sigma^+$ и возбужденное 2Π электронные состояния молекул LiBe, LiMg и LiCa. Построены потенц. кривые, рассчитаны спектроскопич. постоянные и изучено распределение электронной плотности в молекулах. Установлен немонотонный характер изменения энергии связи с ростом заряда ядра атома II группы. Длины связей в молекулах близки к суммам атомных радиусов, определенных по минимальному межатомному расстоянию в кристаллич. металле. Показано, что образование связи сопровождается переносом отрицат. заряда к атому II группы и $s-p$ -поляризацией электронной плотности вблизи этого атома. Рассчитаны также спектроскопич. постоянные молекулы LiNa, причем их значения хорошо согласуются с экспериментальными и ранее опубликованными теоретич. данными.

А. И. Дементьев

LiBe
LiMg
LiCa

Страница 9940, 36670 1980

23 Б28. Молекулярное связывание в LiBe, LiMg и LiCa. Jones R. O. Molecular bonding in LiBe, LiMg, and LiCa. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 5, 3197—3200 (англ.)

В рамках метода локальной спиновой плотности (МЛСП) исследованы молекулы LiNa, LiBe, LiMg и LiCa. Для LiNa расчет по МЛСП дает хорошее соответствие характеристик потенциальной кривой основного состояния с соответствующими эксперим. данными. Рассчитаны потенциальные кривые $^2\Sigma^+$ - и $^2\Pi$ -состояний LiM, где M=Be, Mg, Ca. Основным для всех молекул найдено $^2\Sigma^+$ -состояние. Энергия связи LiM ведет себя монотонно с увеличением заряда ядра M и максимальна для LiBe (0,46 эВ). Эта нерегулярность объясняется величиной s-p (а для Ca и s-d)-поляризации, максимальной для LiBe. При этом одноэлектронные уровни энергии LiBe в целом лежат выше, чем в других молекулах LiM.

М. Кузьминский

Мв, мек,
расчет.
Потенциал.
кривые
и.п.
Х. 1980
№ 23

(+2)

LiBe

LiMg

LiCa

OMMUCK 99401, 36670 1980

93: 13537a Molecular bonding in lithium-beryllium (LiBe), lithium-magnesium (LiMg), and lithium-calcium (LiCa). Jones, R. O. (Inst. Festkoerperforsch., KFA, Juelich, D-5170 Juelich, Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1980, 72(5), 3197-200 (Eng). Binding energy curves for the $2\Sigma^+$ and 2Π states of LiBe, LiMg, and LiCa were calcd. using the d. functional formalism. The bonding is characterized by transfer to and s-p polarization of the charge d. near the Group IIA atom. The bonding trends show similarities to those evident in earlier calcs. for Group IIA dimers.

Do; naming,
is pub'd

(+2)



CA 1980 93 x2

LiBeF_3

v92: 169067h Ab initio investigations of structure and stability of the lithium beryllium fluoride molecule, Zakhevskii, V. G.; Boldyrev, A. I.; Charkin, O. P. (Inst. New Chem. Probl., 142432 Chernogolovka, USSR). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 70(1), 147-50 (Eng). Calcs. of the potential energy surface of LiBeF_3 were performed by using the basis set of B. Roos and P. Siegbahn (1970). The extremum and saddle points were made more precise with Huzinga-Dunning basis sets in double- and triple-zeta contractions. The bidentate structure (symmetry group C_{2v}) has the lowest energy and is much more advantageous than the others, and the mol. turns out to be rigid with respect to migration of the cation around the anion. The calcd. internuclear distances and the energy of complex formation are in agreement with exptl. values within 0.03 Å and 2 kcal/mol. The results are compared with similar ab initio data for LiBeH_3 and LiNO_3 .

Кб. сссх.
пачет

1980

ОМ МУК 9332

CA 1980 92 NAD

X-10385

LiBeF_3

Оттиск 9352

1980

13 Б50. Неэмпирические исследования строения и устойчивости молекулы LiBeF_3 . Zakzhevskii V. G., Boldyrev A. I., Charkin O. P. Ab initio investigations of structure and stability of the LiBeF_3 molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 70, № 1, 147—150 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО проведены расчеты поверхности потенциальной энергии молекулы LiBeF_3 (I). Расчеты выполнены с использованием трех базисных наборов. В расчетах большинства точек и для оптимизации геометрии использован набор $[7s3p]$, сгруппированный в $[4s2p]$. Экстремальные и седловые точки рассчитывали более точно с использованием базиса $\text{Li}[9s4p]$, Be , $\text{F}(9s5p)$, сгруппированного в $[4s2p]$ и базиса $\text{F}[10s6p]$, сгруппированного в $[5s3p]$ базисы II и III соответственно. Пригодность базисных наборов про-

Кв. мех.
расчет

58561
X-10385

№ 1980 N 13

верена путем расчета равновесных геометрий и энергетических параметров молекул LiF , BeF_2 и Li_2F_2 . Наиболее устойчивой найдена «бидентатная» структура I, к-рая оказалась достаточно жесткой относительно миграции катиона вокруг аниона. Рассчитанные значения межатомных расстояний и энергии образования комплекса с точностью до 0,03 Å и 2 ккал/моль согласуются с эксперим. данными. Полученные результаты сопоставлены с аналогичными расчетами молекул LiBeH_3 и LiNO_3 . Показано, что барьеры миграции падают в ряду $\text{LiBeH}_3 > \text{LiBeF}_3 > \text{LiNO}_3$. Для последней молекулы обнаружена также большая зависимость энергии от угла LiNO . Проанализированы изменения геометрич. параметров в различных конфигурациях соотв-щих солей по сравнению с изолированными ионами MX_3^- .

С. Долин

LiBeF_3

LiF

BeF_2

Li_2F_2

кв. мех.
расчет

(+3) $\square$

Ф 1980 №6

011114 (74) 3332
✓ 6 Д123. Неэмпирическое исследование строения и стабильности молекулы LiBeF_3 . Ab initio investigations of structure and stability of the LiBeF_3 molecule. Zakzhevskii V. G., Boldyrev A. I., Charkin O. P. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 70, № 1, 147—150 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в 3 базисах гауссовских ф-ций, наибольший из которых есть $\text{Li}/9s4p/\text{Be}/9s5p/\text{F}/10s6p$, сгруппированный в $4s2p/4s2p/5s3p$, исследовано электронное строение LiBeF_3 (I). Для сравнения проведены расчеты LiF (II), BeF_2 (III) и Li_2F_2 (IV). Обнаружено, что для I и IV наибольший базис воспроизводит эксперим. энергии комплексообразования (из II и III) с точностью ~ 2 ккал/моль, а длины связей $\text{A}-\text{F}$ с точностью 0,02—0,05 Å. Для I рассмотрены структуры с присоединением Li к вершине и ребру плоского треугольника BeF_3 и тригональная бипирамидальная. Обнаружено, что наиболее выгодна вторая структура (симметрия C_{2v}), причем I является жесткой системой по отношению к миграции катона

1980

58601-1

X

вокруг аниона. Полученные результаты сопоставлены с аналогичными расчетными данными для LiBeH_3 (V) и LiNO_3 (VI). Отмечено, что барьер миграции катиона уменьшается в ряду $\text{V} < \text{I} < \text{VI}$. При этом средние расстояния $\text{M}-\text{X}$ в LiMX_3 близки к таковым в изолированных анионах MX_3^- .

В. Л.

оя

Li Be F₃

1980

Lakshinskii V. G., et al.

Zh. Neorg. Khim. 1980,
25(10), 2614-18

номинирован
исследоват.
(M)

суд. Li PO₃ - III

LiBeF_3

X - 10422

1980

Закревский В. 2. и др.

ис. неоплач. химии,

1980, 25, NS, 1171-5

расчет
мол-л
структ.
кв. мк

См LiBF_4 ; III

Li_2BeH_4

оттиски 11608

1981

10 Д107. Теоретическое исследование структурной нежесткости и неклассических перегруппировок молекулы Li_2BeH_4 . Theoretical study of structural non-rigidity and non-classical rearrangement of the complex Li_2BeH_4 molecule. Boldyrev A. I., Sukhanov L. P., Zakhzevskii V. G., Charkin O. P. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 79, № 3, 421—426 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в двух-экспонентном базисе сгруппированных гауссовых ф-ций, а также в базисе, включавшем дополнительно поляризационные 2p-ф-ции для всех атомов, исследована поверхность потенц. энергии Li_2BeH_4 (I). Обнаружено, что наиболее выгодна плоская циклич. структура (6-членный цикл, в котором 3 атома H расположены между атомами Be и Li и четвертый экзоциклический атом H присоединен к атому Be). Классич. структура $\text{Li}^+ \cdot \text{BeH}_4^{2-} \cdot \text{Li}^+$ на 2,5 ккал/моль менее выгодна. Исследован механизм внутримолекулярной перегруппировки. I найдена стабильной по отношению ко всем рассмотренным путем мономолек. распада. В. Л. Л.

кв. мех.
расчет

ф. 10. 1981

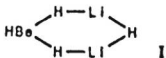
Li_2BeH_4

отмечен 11608

1981

' 95: 30738a Theoretical study of structural nonrigidity and nonclassical rearrangement of the complex dilithium beryllium hydride molecule. Boldyrev, A. I.; Sukhanov, L. P.; Zakzhevskii, V. G.; Charkin, O. P. (Inst. New Chem. Probl., 142432 Chernogolovka, USSR). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 79(3), 421-6 (Eng). The structure and stability of different configurations

кб. мех.
фрагмент.



of the Li_2BeH_4 mol. were calcd. within the Hartree-Fock-Roothaan method by using double-zeta basis sets. The cyclic plane structure of I is the ground state. The classical structure $\text{Li}^+[\text{BeH}_4]^{2-}\text{Li}^+$ is ≈ 2.5 kcal/mol higher. An intramol. rearrangement is predicted.



С.А. 1981. 98 N 4

LiBeH_4

От. 11608

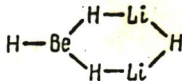
1981

17 БЗЗ. Теоретическое исследование структурной жесткости и неклассической перестройки комплекса LiBeH_4 . Boldyrev A. I., Sukhanov L. P., Zakhzevskii V. G., Charkin O. P. Theoretical study of structural non-rigidity and non-classical rearrangement of the complex Li_2BeH_4 molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 79, № 3, 421—426 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО с использованием двух-экспонентного базиса (ДЭ) сгруппированных гауссовых функций Рооса—Зигбана рассчитаны полные энергии для ряда геометрич. конфигураций комплекса Li_2BeH_4 . В экстремальных точках потенциальной поверхности расчеты проводились также в базисе ДЭ с учетом поляризац. $2p$ -функций на атомах Li, Be и H (ДЭП). Наиболее стабильной конфигурацией Li_2BeH_4 найдена

Молеку.
геометрия

кв. лех.
расчет, ДЭ.



X. 1981 N 17

плоская циклическая. Классич. структура $\text{Li}^+ [\text{BeH}_4^{2-}]$ - Li^+ с тетраэдрич. координацией BeH_4 по энергии лежит на $\sim 2,5$ ккал/моль (расчет в базисе ДЭП) выше, чем циклич.: плоская структура. Исследованы различные возможные перестройки молек. структуры. Установлено, что ряд перестроек может происходить без преодоления сколь-либо существенных барьеров. Предсказана аномальная, температурная зависимость дипольного момента Li_2BeH_4 . Рассчитаны энергии различных каналов мономолекулярного распада Li_2BeH_4 . Показано, что энергии комплексообразования для различных каналов реакции превышают 30 ккал/моль, на основании чего сделан вывод о том, что молекула Li_2BeH_4 является стабильной относительно любого типа мономолекулярного распада.

И. А. Тополь

LiBeHy - Оттиск 13589 1979

потенц.
поверхн.,
кв. мех.
расчет

Болдырев А.И., Чаркин О.
2л. структур. хим.,
1979, 20, N6, 969-977

Li_2BeF_4

1981

Болдосрев А. Ч. др.

Мез. док. 14²⁰ Век. Чуга-
евского совещ. по жемч.

кв. шех.

расч. и,
равновес.
геометрия.

Комплексе. создан, 1981,
Ч. 2. Иванова, 1981, 655.

(см. Ве H_3^- ; III)

Li_2BeH_4

1981

Болдырев А.И. "гр.

Мез. докл 14^{го} Всес Чугаевского
совещ. по химии. комплекс.

Кв. мех.
расст,
равновесная
геометрия.

соедин., 1981,

Ч. 2. Иваново, 1981, 655



(см. BeH_3^- ; III)

LiBeH_4^-

Кв. мех
расчет,
равновесн.
геометрии.

1981.
Белодубров А.И. и др.
Тез. докл. 14^ю Всес. Чуга-
евскому съезду. по химии,
компл. соедин., 1981,
42. Иллюстр., 1981, 655

● (см. BeH_3^- ; III)

У. Ве F₃

1981

Болдырев А. И. и др.

Тез. докл. 14²⁰ Весс. Чуга-
евского совещ. по химии
компл. соедин., 1981,

4.2. Цибакено, 1981, 655

Кв. мех.
расшир.
равновесия.
геометрия.

● (101. Ве H₃; III)

LiBeH_3

Кб. мех.
раств.
равновес.
пометрии.

1981

Болдырев А.И. и др.
Тез. докл. 14^{ое} Всес. Чувш.
евского совещ. по химии

комплек. соединений, 1981,
Ч. 2. Иваново, 1981, 655

● (см. BeH_3^- ; III)

LiBe_4F^-

1981

Болдырев А.И. и др.

Тез. докл. 14^{ого} Всес. Чув-
шевского совещ. по химии
комплексов. соедин., 1981,

Кв. мех.
расшир.
равновесия.

Ч. 2. Иваново, 1981, 655

геометрия.

● (см BeH_3^- ; III)

1981

22 Б55. Теоретическое исследование структурной нежесткости газообразных комплексных молекул. Болдырев А. И., Чаркин О. П. «Тез. докл. 14-го Всес. Чугаевского совещ. по химии комплекс. соедин., 1981. Ч. 2», Иваново, 1981, 558—559.

Проведены систематич. хартри-фоковские расчеты равновесных геометрий, энергий комплексообразования, дипольных моментов, силовых полей, частот нормальных колебаний и др. св-в более 40 комплексных гидридов и фторидов легких элементов типа $L_n[MX_{k+n}]$ и $(L_n[MX_{k+n}])_2$; $L = \text{Li, Na}$; $M = \text{Be, Mg, B, Al, Si, P}$; $X = \text{H, F}$; $k = 2, 3, 4, 5$. Рассчитаны потенциальные Пв, отвечающие миграции внешнесферных катионов вокруг аниона, а также внутримолек. перегруппировкам, сопровождаемым перестройкой аниона. Рассмотрены возможные проявления указанных типов структурной нежесткости комплексных молекул в их р-ционной способности; аномальной т-рной зависимости дипольных моментов, термодинамич. ф-ций и др. св-в; в необычно больших амплитудах колебаний; в особенностях колебательных и колебательно-вращательных спектров, спектров ЯМР, ЯКР и т. д. Из резюме

$\text{Li}_n[\text{BeH}_{k+n}]$
 $\text{Na}_n[\text{BeH}_{k+n}]$
 (Кв. мех. расч.)

+23

X

X.1981
 w22,19AB

$L_i^n [Be F_{k+n}]$

1981

Болдырев А.И., и др.

Плез. докл. 14²⁰ Всес. Чувств-
ского совещ. по химии
(кв. мех.
размет).
комплекс. соед., 1981. 4.2.,
Иваново, 1981, 558-559.

(ср. $L_i^n [Be F_{k+n}]$; III).

Li₂BeH₄

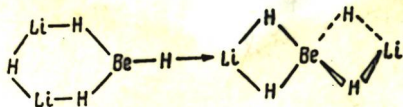
~~Оксиды~~ ~~70524~~ 1991
13 Б36. Теоретическое исследование неклассической структурной нежесткости с разрушением аниона в комплексной молекуле Li₂BeH₄. Болдырев А. И., Суханов Л. И., Закжевский В. Г., Чаркин О. П. «Ж. неорганич. химии», 1981, 26, № 3, 565—572

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП в базисах двухэкспонентного типа рассчитаны участки потенциальной Пв, структура и стабильность различных конфигураций молекулы Li₂[BeH₄]. Наиболее выгодной найде-

расчет
гексаэдрич.
на плоская 6-членная циклич. структура H—Be—H—Li—H—Li—H. На 2,5 ккал/моль выше лежит структура с двумя внешнесферными катионами Li⁺, координированными к граням искаженного тетраэдрич. аниона

2.1981.13

Am.



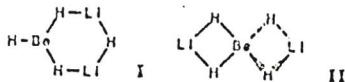
BeH₄²⁻, в к-рой существует большая область, где катионы могут двигаться квазисвободно, практически независимо друг от друга. Предсказан новый тип структурной нежесткости, связанный с внутримолек. перегруппировкой, в ходе к-рой структура аниона претерпевает непрерывную перестройку, идущую с малым барьером.

По резюме

Li_2BeH_4

кб. сек.
период,
сфуктура,
номен.
г-ус

UM. 16405 1981
9H 163651a Theoretical study of nonclassical structural flexibility with anion breakdown in a complex dilithium tetrahydroberyllate molecule. Boldyrev, A. I.; Sukhanov, I. P.; Zakhevskii, V. G.; Charkin, O. P. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). Zh. Neorg. Khim. 1981, 26(3), 567-72 (Russ). The potential surface, mol. structure, and stability of



various configurations of $\text{Li}_2[\text{BeH}_4]$ were calculated by the Hartree-Fock-Roothaan method by using 2-exponential basis sets. The most stable configuration is a 6-membered cyclic structure I. At 2.5 kcal/mol above I, a structure is possible with 2 outersphere Li^+ coordinated to the edge of distorted tetrahedral $[\text{BeH}_4]^{2-}$. In the latter structure a wide region exists in which the cations can move quasi-freely and independently. A new type of structural flexibility is predicted related to a low-barrier $\text{I} \rightarrow \text{II}$ intramolecular rearrangement.

Р.Д. 1981.94, N20

LiBe_2H_5

Омск 13104

1981

4 Д104. Неэмпирические расчеты структуры и ста-
бильности комплексной молекулы LiBe_2H_5 . Ab initio
calculations of the structure and stability of the
 LiBe_2H_5 complex molecule. Kirillov Yu. B., Bol-
dyrev A. I., Klimenko N. M., Charkin O. P.
«Chem. Phys. Lett.», 1981, 84, № 3, 604—608 (англ.)

равновесная
геометрия

Методом ССП для различных базисных наборов рас-
смотрены типы равновесных геометрий молекулы
 LiBe_2H_5 и иона Be_2H_5^- . Найдено, что эти системы
устойчивы относительно любых путей распада. Энер-
гетически наиболее выгодная конформация иона
 Be_2H_5^- симметрии D_{3h} под влиянием Li^+ переходит в
неплоскую конформацию симметрии C_{2v} , для которой
осуществляется бидентантная координация Li^+ по двум
атомам Н. Обсуждается характер энергетич. поверхно-
сти при миграции Li^+ в молекуле LiBe_2H_5 и сопровож-
дающие ее структурные изменения. А. Ф. Шестаков

(4) 

ф. 1982, 18, № 4. Be_2H_5^-

LiBe_2H_5

Оттиск 13104 1981

8 Б32. Неэмпирический расчет структуры и ста-
бильности комплексной молекулы LiBe_2H_5 . Kiril-
lov Yu. B., Boldyrev A. I., Klimentko N. M.,
Charkin O. P. Ab initio calculations of the structure
and stability of the LiBe_2H_5 complex molecule. «Chem.
Phys. Lett.», 1981, 84, № 3, 604—608 (англ.)

Методом МО ССП в базисе 4—31 ГФ выполнены
расчеты поверхности потенциальной энергии Be_2H_5^- и
 LiBe_2H_5 . Равновесные и седловые точки пересчитывали
в базисах Руса и Зигбана (ДЭРЗ) и Хузинаги и Дан-
нинга (ДЭХД) с учетом и без учета поляризац. d -АО
на атоме Be. Для Be_2H_5^- выполнена полная оптимиза-
ция геометрии трех наиболее стабильных configura-
ций, в к-рых атомы Be связаны через один (m), два (b)
или три (t) мостиковых атома H, а для LiBe_2H_5 опти-
мизировались конфигурации (m , b); (b , b) и циклич. с.
Найдено, что Be_2H_5^- и LiBe_2H_5 стабильны по отноше-
нию к различным каналам мономолек. распада.

расчет
структуры
и стабиль-
ности

(+1)

х. 1982, 19, № 8



BeH_5^- (поверхн.
поверхн.)

У Be_2H_5^- наиболее стабильна конфигурация t , а b и m лежат выше на $\sim 6,6$ и 12 ккал/моль, соотв., а у LiBe_2H_5 наиболее стабильна конфигурация (b, b) с двумя мостиковыми атомами H_b между атомами Be внутри аниона. Альтернативные конфигурации (m, b) и c лежат на 22 и 9 ккал/моль выше. Сделан вывод, что молекула LiBe_2H_5 обладает структурной нежесткостью по отношению к перегруппировкам, в к-рых движение внешнесферного катиона Li^+ сопровождается существенной перестройкой аниона Be_2H_5^- .

В. Г. Закжевский

LiBe_2H_5

1981

Кирпичев Ю. Б. и др.

Корреляция. химия,
структура 1981, 7, N12, 1832-
-1840.

●
(сер. B_2H_5^- ; III)

LiBeH_2^+

1981

Озерова В. М. и др.

(геом., Vi,
см. шет).

Тез. докл. 14 го Всес. Чу-
гаевского совещ. по химии
комплекс. соедин., 1981,
4.2. Иваново, 1981, 599-
— 600.

(см. Li_2H ; III)

LiBeH₃

Ommuck 16401 1981

ab initio
param

/96: 94107x Ab initio calculation of a force field and the frequencies of normal vibrations in the complex molecule lithium trihydroberyllate (LiBeH₃). Sukhanov, L. P.; Boldyrev, A. I.; Zakzhevskii, V. G.; Charkin, O. P. (USSR). Opt. Spektrosk. 1981, 51(5), 798-804 (Russ). The Hartree-Fock-Roothaan ab initio calcn. gave the harmonic force field parameters and normal vibration frequencies for LiBeH₃ and BeH₃ as well as for the model compds. LiH and BeH₂. The effect of cation-anion interactions on LiBeH₃ spectra was studied theor. and the anharmonic terms were obtained for the vibrations with the lowest force consts. The validity of the harmonic approxn. for these vibrations was confirmed.

C.A. 1982, 96, N/2

LiBeM₃

1981

Сураков Л. П. и др.

Пиз. докл. 14²⁰ Всес. Чу-
гаевского совещ. по химии
комплекс. соеден., 1981, 4.2.
Иваново, 1981, 653-654.

теом; Vi,
ссл. поет,
кв. мех.
расчет.

(ссл. LiH; III)

LiBeH

1981

Суханов Л. Т. и др.

поч; Vi;
сч. поет,
кв. мех-
рачелн.

Тез. докл. 19.20 Век. Чу-
гаевского совещ. по те-
мам конструктор. соедин.
1981, Ч. 2. Иваново, 1981,

● 653-654,
(сеч. LiH; III)

LiBeH_3

Оптика 13057

1981

Сухатов Л.П. и др.,

Оптика и спектроскопия 1981,
51, вып. 5, 798-804

ν_i ,
сил. пост.



(сч. LiH ; III)

LiBeH₃

1981

4 Д51. Исследование стабильности молекулы LiBeH₃ методом плавающих сферических гауссовых орбиталей. Investigation of the stability of the LiBeH₃ molecule using the FSGO method. Tamássy-Lentei I., Szaniszló J. «Acta phys. et chim. debrec.», 1981(1982), 24, pars I, 69—77 (англ.; рез. венг., рус.)

Проведены исследования геометрич. данных молекулы LiBeH₃ в линейной и в самой стабильной конфигурации. Определена энергия диссоциации для нескольких возможных процессов.

Резюме

дл.п.

сф. 1986, 18, №4

LiBeH_3
 LiBeH_4

Оммуер 13188

1981

[95:15699]w Structures of complex beryllium hydrides and fluorides, LiBeX_3 and Li_2BeX_4 . Wuerthwein, Ernst Ulrich; Krogh-Jespersen, Mary Beth; Von Rague Schleyer, Paul (Inst. Org. Chem., Friedrich-Alexander-Univ., D-8520 Erlangen, Fed. Rep. Ger.). *Inorg. Chem.* 1981, 20(11), 3663-7 (Eng). Alternative structural possibilities for LiBeX_3 and Li_2BeX_4 (X = H or F) monomers were examd. at various levels of ab initio MO theory. For LiBeX_3 , there is a decided preference for attachment of Li at the edges of BeX_3 triangles, rather than to corners or to faces. For Li_2BeX_4 , the results are not as clear-cut. At the highest theor. level employed, MP2/6-31G+//4-31G+, Li_2BeH_4 prefers Li attachment to two faces of a BeH_4 tetrahedron; the opposite edge arrangement is next best energetically. Planar six-membered ring structures for both Li_2BeF_4 and Li_2BeH_4 are preferred at the 4-31G//4-31G level (the highest feasible for the former species). The corresponding anions BeX_3^- and BeX_4^{2-} (in both planar and tetrahedral geometries) were also examd., and the energies of various possible dissocn. reactions were calcd.

Кв. мех. пакет

⊗ (+1) LiBeF_3 , LiBeF_4

C.A. 1981, 95, N 18.

LiBeH_3

Li_2BeF_4

Оттиск 13188 1981

9 БЗЗ. Структуры комплексных гидридов и фторидов бериллия. Würthwein Ernst-Ulrich, Krogh-Jespersen Mary-Beth, Schleyer Paul Ragué. Structures of complex beryllium hydrides and fluorides, LiBeX_3 and Li_2BeX_4 . «Inorg. Chem.», 1981, 20, № 11, 3663—3667 (англ.)

Методом Хартри—Фока в базисе из сгруппированных гауссовых ф-ций рассчитаны различные структуры комплексных соединений LiBeX_3 и Li_2BeX_4 ($\text{X}=\text{H}, \text{F}$). Предпочтительной конфигурации LiBeX_3 отвечает положение лития над стороной треугольника BeX_3 . Для Li_2BeX_4 результаты зависят от базиса.

Б. И. Жилинский

геометр.
структура

⊗
(+3)

X. 1982, 19, №9.

$\text{LiBeF}_3, \text{Li}_2\text{BeH}_4,$
 Li_2BeF_4

LiBeF_3 [оттиск 12725] 1981.

Закревской В. Г.

и др.

ДФ раект,
геометрия,
параметры

Координаты, Холл,
1981, в печати.

теоретическая исследование структуры
газообразного соединения

Li Be F₃

ommien 1974 1981
Zakzhevskii V.G. et al.

Chem. Phys. Lett, 1981,
81, N 1, 93-97.

кв. сек.
рачий
энергии
комлексо-
образования
геометрии

●
(сер. Li B F₄; III)

LiBeF_3

Оттиск 13315 1982

10 Б65. Теоретический расчет колебательных спектров нежесткой молекулы LiBeF_3 . Boldyrev A. I., Solomonik V. G., Charkin O. P. Theoretical calculations of the vibrational spectra of the complex LiBeF_3 molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 86, № 1, 51—54 (англ.)

равновесн.
геометрич.
структура,
сил. поле

Методом ССП в двухэкспонентном гауссовом базисе рассчитана равновесная геометрич. структура, силовое поле, ~~колебательные частоты и интенсивности~~ для молекулы LiBeF_3 . Результаты согласуются с данными по ИК-спектрам этой молекулы в матрице инертного газа.
Б. И. Жилинский

X. 1982, 19, N10.

Li_2BeHy

1982

LiBeHy^-

Boldyrev A.I., char-
kin O.P.

исорее.

расее

структур

Koord. khim. 1982,
8 (5), 618-626.

сйабмв-
кеее.

(LiBeHy^{2-} ; III)

$\text{Li}_2 \text{BeF}_4$

1982

LiBeF_4^-

Boldyrev A. I., Char-

теорет.

Kir O. P.

расчёт
структуры

Koosol. Khim. 1982,

8 (5), 618-626.

стабильные -
ны.

(сер. BeH_4^{2-} ; III)

LiBeF₃

1982

96: 189896t Theoretical calculations of the vibrational spectra of the complex lithium beryllium fluoride molecule. Boldyrev, A. I.; Solomonik, V. G.; Charkin, O. P. (Inst. New Chem. Probl., 142432 Chernogolovka, USSR). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 86(1), 51-4 (Eng). Ab initio calcns. of the structure, force field, frequencies and intensities of normal modes of the LiBeF₃ mol. were carried out, using basis sets of Huzinaga and Dunning (Zakzhevskii, V. G., et al., 1980) in a double-zeta contraction. The calcd. results are compared with the IR spectrum of LiBeF₃ in an inert matrix obtained by A. Snelson et al. (1975).

ab-initio
parcém

C. A. 1982, 96, v22

LiBeF_3

1982

з 6 Д372. Теоретический расчет колебательных спектров сложной молекулы LiBeF_3 . Theoretical calculations of the vibrational spectra of the complex LiBeF_3 molecule. Boldyrev A. I., Solomonik V. G., Chargin O. P. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 86, № 1, 51—54 (англ.)

Методом ab initio выполнен расчет частот норм. колебаний и значения силовых постоянных для плоской циклич. структуры молекул LiBeF_3 (I) типа симметрии C_{2v} . Определены относит. величины интенсивностей полос в колебательных спектрах I. Проведено сопоставление данных расчета и эксперим. ИК-спектров:

молекул I, изолированных в Ne-матрице. Вычислены средние значения амплитуд колебаний и термодинамич. ф-ции I в диапазоне т-р 298—2000 К для газообразных молекул I в рамках модели гармонич. осциллятора — жесткого волчка. И. В. А.

В. И. М. П.

Ф. 1982, 18, № 6.

LiBeH₃

Am. 16406

1982

15 Б39. Орбитальные энергии и структурная жесткость комплексных гидридов по данным ab initio расчетов. Болдырев А. И., Суханов Л. П., Чаркин О. П. «Координац. химия», 1982, 8, № 4, 430—436

В приближении Купменса неэмпирич. методом Хартри—Фока—Рутана с использованием нескольких базисов гауссова типа рассчитаны потенциалы ионизации комплексных гидридов LiBeH₃, NaBeH₃, LiMgH₃, LiBH₄, NaBH₄ и LiAlH₄. Рассмотрен вопрос о проявлении в фотоэлектронных спектрах структурной нежесткости комплексных молекул $L[MX_4]$ с тетраэдрич. анионами $[MX_4]^-$. Автореферат

у

15

15

X. 1982, 19, N 15.

LiBeH_3

[Om. 16406]

1982

8 Д147. Орбитальные энергии и структурная жесткость комплексных гидридов по данным ab initio-расчетов. Болдырев А. И., Суханов Л. П., Чаркин О. П. «Координац. химия», 1982, 8, № 4, 430—436

В приближении Купманса неэмпирич. методом Хартри—Фока—Рутана с использованием нескольких базисов гауссова типа рассчитаны потенциалы ионизации комплексных гидридов LiBeH_3 , NaBeH_3 , LiMgH_3 , LiBH_4 , NaBH_4 и LiAlH_4 . Автореферат

у

(+5) 

ф. 1982, 18, N 8.

LiBeF₃

1982

Болдырев А.И., Захар-
жевский В.Т. и др.

у

Координат. химия,
1982, 8, № 4, 437-444.

(сер. Li₂F₂; III)

Оммуек 16052

1982

Li BeF₃

Болдырев А.И., Соломо-
нук В.П. и др.,

ab initio
расчет
сильного
поля и
колебат. спектра

Вестн. неорганич. хим.,
1982, ● 27, N4,
864-867.



1982

13 Б35. Ab initio исследование силового поля и колебательного спектра молекулы LiBeF_3 . Болдырев А. И., Соломоник В. Г., Чаркин О. Н. «Ж. неорганич. химии», 1982, 27, № 4, 864—867

Li , сил. пост.

Методом Хартри—Фока—Рутана в двухэкспонентном базисе Хузипаги—Данинга $(9s4p/4s2p)_{\text{Li}}$, $(9s5p/4s2p)_{\text{Be, F}}$ выполнены расчеты коэф. наиболее общего силового поля и производных дипольного момента по координатам симметрии молекулы LiBeF_3 . Вычислены частоты и формы нормальных колебаний, интенсивности в ИК-спектре и сдвиги частот при изотопич. замещении (^6Li — ^7Li).

Резюме

х. 1982, 19, N 13.

LiBeF_3

1982

неопрем.
расчет,
виз. спектр.

' 96: 207650q Ab initio study of a strong field and the vibrational spectrum of lithium beryllium fluoride. Boldyrev, A. I.; Solomonik, V. G.; Charkin, O. P. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1982, 27(4), 864-7 (Russ). A calcn. was executed, using the Hartree-Fock-Roothan method, for the calcn. of the coeff. of the most general strong field and derivs. of the dipole moment according to the coordinate symmetry of LiBeF_3 mols. The frequency and form of normal vibrations, IR spectra intensities and isotopic shifts (^6Li - ^7Li) were calcd.

C. A. 1982, 96, N 24.

LiBeF_3

1982

8 Д88. Ab initio исследование силового поля и колебательного спектра молекулы LiBeF_3 . Болдырев А. И., Соломоник В. Г., Чаркин О. Н. «Ж. неорганич. химии», 1982, 27, № 4, 864—867

Методом Хартри—Фока—Рутана в двухэкспонентном базисе Хузинаги—Даннинга $(9s4p/4s2p)_{\text{Li}}$, $(9s5p/4s2p)_{\text{BeF}}$ выполнены расчеты коэф. силового поля и производных дипольного момента по координатам симметрии молекулы LiBeF_3 . Вычислены частоты и формы норм. колебаний, интенсивности в ИК-спектре и сдвиги частот при изотопич. замещении (^6Li — ^7Li). Резюме

ab initio
расчет,
 D_3

ср. 1982, 18, № 8.

LiBe_2M_3

1982

Kirillov Yu. B., Bol-
dyrev A. I., et al.

теор.
расчета

Koord. Khim. 1982,
8(9), 1203-10.

(ср. Be_2M_3^- ; III)

LiBeF_{k+1}

1982

Клименко Н. И., Закшев-
ский В. Г., Харкин О. П.

расчет

поле

структ.

Координат. химия,

1982, 8, № 7, 903-912.

E

● (сер. LiF_k)₂; III)

Li Be H₂⁺

Оттиск 13558
Оттиск 16049

1982

геометр.,
спел. пост.,
i, кв. мех-
расчет

Озерова В.М., Соломо-
них В.П. и др.,

д. геотан. химии,
1982, 27, N 3, 571-576.

LiBeF_2^+
 LiBeF_3

ab initio
расчет.

LiBeH_2^+

номера 571-1982.
(в печати)

В. Г. Соломонов,
Методические по ЛКАО
расчету силовых полей и
колебаний, спектров много-
атомных молекул, селек-
ции.

LiBeH₃

1982

98: 167259b Investigation of the stability of the lithium beryllium hydride (LiBeH₃) molecule using the FSGO method. Tamassy-Lentei, I.; Szaniszlo, J. (Inst. Theor. Phys., Kossuth Lajos Univ., H-4010 Debrecen, Hung.). *Acta Phys. Chim. Debrecina* 1982, 24, 69-77 (Eng). Geometrical data for the linear, as well as the most stable configuration of the LiBeH₃ mol. are investigated using the FSGO method. The dissociation energies for some possible processes are detd. The results are in good agreement with other theor. values available.

(структ.
стабильн.)

моп. расчѣт

C. A. 1983, 98, N 20.

$\text{LiBeH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

1983

100:109353b Ab initio study of lithium beryllium hydride monohydrate ($\text{LiBeH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$). Boldyrev, A. I. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1983, 28(11), 2768-73 (Russ). The mol. structure and total energy of $\text{LiBeH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ were calcd. within the Hartree-Fock-Roothan method by using 4-31 G basis. On the example of a model system $\text{LiBeH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$, the effect of hydration on the potential surface, structure, and stability of LiBeH_3 was studied. The most preferable coordination site for H_2O is at the cation. The coordination of H_2O decreases the energy of heterolytic disocn. The geometrical parameters, effective charges, overlap populations, and force consts. of BeH_3^- in $\text{LiBeH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ are closer to the corresponding values in the isolated anion than in LiBeH_3 . The insertion of a H_2O mol. between Li^+ and BeH_3^- is energetically unfavorable.

prop. paper

c. A. 1984, 100, N 14

$\text{LiBeH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

1983

7 Б1024. Ab initio. исследование моногидрата $\text{LiBeH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ Болдырев А. И. «Ж. неорганич. химии», 1983, 28, № 11, 2768—2773.

В рамках метода Хартри—Фока—Рутана с базисом 4—31 ГФ рассчитаны структура и стабильность молекулы $\text{LiBeH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$. На примере модельной системы $\text{LiBeH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ исследовано влияние моногидратации на потенциальную Пв, структуру и стабильность комплексной молекулы LiBeH_3 . Найдено, что наиболее предпочтительным местом координации воды является катион. Координация молекулы воды уменьшает энергию гетеролитич. диссоциации. Геометрич. параметры, эффективные заряды на атомах, заселенности перекрывания и силовые постоянные аниона BeH_3^- в моногидрате $\text{LiBeH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ближе к соотв-щим значениям в изолированном анионе, чем в комплексе LiBeH_3 . Резюме

геометрия,
структура

X. 1984, 19, № 7

LiBeF_2^+

[оп. 18443]

1983

Расчет
симв.
костозн.
и потенц.
поверх-
ностей.

Краснов К. С.,

ж. Структур. Химии,
1983, 24, №1, 3-8.

LiBeF_k^+

Om. 17711, 17984 1983

$k=1\div 3$

100: 93618d Ab initio study of the structure of force fields and vibrational spectra for the complex fluorine-containing ions LiAF_k^+ (A = lithium, beryllium, boron). Ozerova, V. M.; Solomonik, V. G. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). Zh. Neorg. Khim. 1983, 28(10), 2477-81 (Russ). The potential surfaces of the complex ions LiAF_k^+ (A = Li, Be, B, $k = 1-3$) were calcd. using the Hartree-Fock-Roothaan method in a 2-exponent basis $9s4p/4s2p\text{-Li}$ and $9s5p/4s2p\text{-Be, B, F}$. Linear equil. configurations of the symmetry D_{3h} and C_{2v} were obtained for the Li_2F^+ and LiBeF_2^+ ions, resp. For LiBF_3^+ , a plain monodentate configuration of the symmetry C_{2v} was indicated. The force field const., vibrational frequencies, IR spectral intensities, and thermodyn. functions of the Li_2F^+ and LiBeF_2^+ ions were calcd. The results were compared to the earlier reported investigations on the corresponding Li hydrides.

номери.

номеров,

номеров.

LiBF_k^+ Li_2F_k^+

C.A. 1984, 100, N12

$k=1\div 3$

1983

LiBe
LiBe⁺

17 БЗ1. Расчет потенциальных кривых низколежащих электронных состояний LiBe и LiBe⁺ в смешанном орбитальном базисе методом ССП. Сафонов А. А., Хрустов В. Ф., Степанов П. Ф. «Ж. структур. химии», 1983, 24, № 2, 168—169

Методом ССП рассчитаны потенциальные кривые состояний $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$ молекулы LiBe и состояний $1^1\Sigma^+$, $^3\Sigma^+$ и $2^1\Sigma^+$ иона LiBe⁺. Использован смешанный орбитальный базис, состоящий из слейтеровских орбиталей, центрированных на ядрах, и двухцентровых функций — приближенных решений задачи о состоянии электрона в поле двух фиксированных кулоновских центров. Показано, что для ряда состояний смешанный базис дает лучшие результаты, чем слейтеровский базис той же размерности. Основное состояние $^2\Sigma^+$ молекулы LiBe — несвязанное; состояние $^2\Pi$ LiBe и все рассмотренные состояния иона LiBe⁺ — связанные, для них приведены основные спектроскопич. постоянные, рассчитанные по ф-лам Данхема.

А. А. Сафонов

расчет
м.п.

④ ⊗

X. 1983, 19, 117

LiBe

1983

9 Д46. Расчет потенциальных кривых низколежащих электронных состояний LiBe и LiBe^+ в смешанном орбитальном базисе методом ССП. Сафонов А. А., Хрустов В. Ф., Степанов Н. Ф. «Ж. структур. химии»; 1983, 24, № 2, 168—169

Методом ССП МО ЛКАО рассчитаны потенц. кривые состояний $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$ LiBe (I) и $1\ ^1\Sigma^+$, $^3\Sigma^+$ и $2\ ^1\Sigma^+$ иона LiBe^+ (II). Использован смешанный орбитальный базис, включавший слэтеровские орбитали $3s$ для Li и $4s1p$ для Be , а также по 4 двухцентровые ф-ции, являющиеся приближенным решением задачи о состоянии электрона в поле двух кулоновских центров. Для проверки эффективности базиса проведены расчеты с включением в базис вместо двухцентровых аналогичных 4 поляризационных ф-ций. Для I оба базиса дают практически одинаковые результаты, тогда как для II смешанный базис дает выигрыш в полной энергии на

М.П.

(4) 

99.1983, 18, 29

$(1-5) \cdot 10^{-3}$ а. е. По полученным потенц. кривым с помощью ф-л Данхема рассчитаны спектроскопич. постоянные. Проведен также расчет основного состояния $^1\Sigma^+$ иона LiBe^- , для которого получена потенц. кривая с пологим и неглубоким минимумом при 3,64 А, однако эти результаты нельзя считать достоверными из-за неадекватности схемы ССП. В. Л.

1983

/ 99: 11168f Calculation of potential curves of low-lying electron states of lithium beryllide and lithium-beryllium(1+) ion in a mixed orbital base by the SCF method. Safonov, A. A.; Khrustov, V. F.; Stepanov, N. F. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1983, 24(2), 168-9 (Russ). Potential curves for $2\Sigma^+$ and 2π states of LiBe and for $1\Sigma^+$, $3\Sigma^+$, and $2\Sigma^+$ states of LiBe⁺ were calcd. by the SCF method by using a mixed orbital basis composed of STO and 2-center functions. The calcd. spectroscopic parameters (mol. rotation, vibration, disson. energy; for the various states are presented.

④ LiBe⁺

C.A. 1983, 89, v2

LiBe
LiBe⁺
romerels. Kru-
ber, M. A. De;
meop. pacem

di bet3

[om. 18437]

1983

Соломонов В. Б.,

де, те;
см. пост.
ab initio
расчет.

ж. Структур. химии,
1983, 24, N1, 29-38.



Libet⁺ 10m. 18437 1983

Соломонов В.Г.,

~~Ск~~ ζ ;
ср. пост.,
ab initio
расчет.

ис. Структур. химии,
1983, 24, N1, 29-38.



[LiBeH₃]₂

От. 16746

1983

22 Б43. Неэмпирический расчет строения и устойчивости димера [LiBeH₃]₂. Альтернативные конфигурации с моно- и биядерными анионами. Ab initio study of structure and stability of the dimer (LiBeH₃)₂. Alternative configurations with mono- and bi-nuclear anions. Sukhanov L. P., Boldyrev A. I., Charkin O. P. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 97, № 4—5, 373—377 (англ.)

расчет геометр.
стр. до.

Методом Хартри—Фока—Рутана выполнены расчеты электронного и геометр. строения димера [LiBeH₃]₂. Рассмотрено семь различных геометр. конфигураций димера и найдено, что наиболее устойчивой является структура димера диборанового типа с двумя мостиковыми ионами лития с симметрией димера D_{2h}. Отмечено, что полученный вывод не меняется при переходе от миним. ОСТ-3 ГФ к двухэкспонентному базису [7s3p (Li, Be), 4s (H) → 4s2p; 2s]. Показано, что еще четыре конфигурации лежат всего на 10—20 ккал/моль выше оптимальной. Рассчитаны энергии диссоциации

Х. 1983, 19, № 2, 2

молекулы $\text{Li}_2\text{Be}_2\text{H}_6$ при образовании различных про-
дуктов. С. Долин



$(\text{LiBeH}_3)_2$

Om. 16746

1983

/ 99: 77151b Ab initio study of structure and stability of the lithium beryllium hydride dimer $((\text{LiBeH}_3)_2)$. Alternative configurations with mono- and binuclear anions. Sukhanov, L. P.; Boldyrev, A. I.; Charkin, O. P. (Inst. New Chem. Probl., 142432 Chernogolovka, USSR). *Chem. Phys. Lett.* 1983, 97(4-5), 373-7 (Eng). The structures and stabilities of different configurations of the $(\text{LiBeH}_3)_2$ dimer were calcd. within the Hartree-Fock-Roothan method with STO-3G and double- ζ basis sets. The structure with a diborane-like anion $[\text{Be}_2\text{H}_6]^{2-}$ and 2 bridge Li^+ cations is favored. The 4 nearest configurations are 10-15 kcal/mol higher. A possible intramol. rearrangements is discussed.

ab initio
расчет
структ.
и стабильн.

С. А. 1983, 99, N 10

$(\text{LiBeH}_3)_2$

геометрия,
структура

ср. 1983, 18,
N10

Ом. 16746 | 1983

10 Д58. Неэмпирическое исследование строения и стабильности димера $(\text{LiBeH}_3)_2$. Альтернативные конфигурации с моно- и ~~бидерными~~ анионами. Ab initio study of structure and stability of the dimer $(\text{LiBeH}_3)_2$. Alternative configurations with mono- and bi-nuclear anions. Sukhanov L. P., Boldyrev A. I., Charkin O. P. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 97, № 4—5, 373—377 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах ОСТ-3ГФ и двухэкспонентном исследовано электронное строение 7 конфигураций $(\text{LiBeH}_3)_2$. Наиболее стабильной найдена структура, в которой Be_2H_6 обладают конфигурацией диборана, а 2 атома Li образуют симметричные мостики с расстояниями Be—H (терминальные) 1,36 Å, углом H—Be—H между терминальными связями 130°, Be—H (мостиковые) 1,47 Å, углом H—Be—H между мостиковыми связями 83°, Li—Be 2,24 Å и Li—H (терминальные) 1,82 Å (симметрия D_{2h}). 4 ближайшие по энергии конфигурации симметрии C_{2v} и D_{2h} расположены выше по энергии на 13—17 ккал/моль.

В. Л. Лебедев

LiBeH_3
 LiBeH_4

1984

расчет

Паркин О. П.,
Зюбчик А. С. и др.
Тр. Моск. хим.-технол.
акад.-т, 1984, N 134,
13-26

(см. Литтк $\pm$; III)

LiBeH₃

1984

2 Б1012. Эффект электронной корреляции и относительные энергетические характеристики комплексных гидридов легких элементов. I. Гидриды бериллия. Electron correlation and relative energetic characteristics of complex hydrides of light elements. I. Beryllhydrides. Cimiraaglia R., Persico M., Tomasi J., Charkin O. P. «J. Comput. Chem.», 1984, 5, № 3, 263—271 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 6—31 ГФ с учетом и без учета эффектов электронной корреляции (ЭК) в 3-м порядке теории возмущений Меллера—Плессета рассчитаны энергии различных конформаций простых и комплексных гидридов бериллия. На примере LiBeH₃ проанализировано влияние расширения базиса 6—31 ГФ и методов ЭК на расчеты энергий различных конформаций и продуктов диссоциации Li⁺+BeH₃⁻. Показано, что расширение бази-

X. 1985, 19, N2.

са и учет ЭК не изменяет качеств. закономерностей
рассчитанных относит. энергий и тепловых эффектов
р-ций. Предложена аддитивная схема для расчета корреляц.
энергий гидридов бериллия в базисе 6—31 ГФ,
к-рая в пределах 2 ккал/моль позволяет оценивать
рассчитанные по теории возмущений энергии корреляции.

А. Е. Смоляр



1984

$(\text{LiBeH})_2$

Hodoscek M., Sol-
majer T.

первый
гидриза-
ции, ab
initio
pacem

J. Am. Chem. Soc.
1984, 106 (6), 1854-6.

●
(см. $(\text{LiXH}_n)_2$; III)

LiBeH

1984

Kaufmann Elmar,
Clark Timothy, et al.

мерная
димери-
зация

J. Am. Chem. Soc.
1984, 106 (6), 1856-8.

(сер. Li₂; III)

Li_2BeH_4

1984

Kello V., Urban M.,
et al.

ab initio
calculations

Chem. Phys. Lett.,
1984, 106 (5), 455-9.

(see LiBH_4 ; III)

$\text{Li}_2\text{Be}_2\text{H}_4$

1984

Киреев Ю. Б.,
Бодырев А. Ч. и др.

Координат. химия,
1984, 10, № 9, 1178-1181.

структ.,
теорет.
расчет

(ср. $\text{Be}_2\text{H}_4^{2-}$; III)

LiBeH_3

1984

13 Б1075. Расчет колебательных спектров комплексных гидридов LiBeH_3 , NaBeH_3 и LiMgH_3 . Суханов Л. П., Болдырев А. И. «Ж. физ. химии», 1984, 58, № 3, 654—660

В рамках неэмпирич. метода Хартри—Фока—Рутана с двухэкспонентным базисом Роса—Зигбана рассчитаны гармонич. силовое поле, частоты и интенсивности нормальных колебаний комплексных гидридов LiBeH_3 , NaBeH_3 и LiMgH_3 . Проведено отнесение типов колебаний на основе рассчитанных форм и распределения потенциальной энергии колебаний по внутренним координатам. Вычислены изотопные сдвиги при всевозможных изотопных замещениях в $\text{L}[\text{MH}_3]$. Показано, что замещение внешнесферного катиона L^+ в основном слабо сказывается на структуре колебательного спектра комплексных гидридов типа $\text{L}[\text{MH}_3]$, тогда как при замещении центрального атома M структура колебательного спектра изменяется существенно. Автореферат

расчет М.А.

(42) X

х. 1984, 19, N 13

LiBeH₃

1984

6 Д91. Расчет колебательных спектров комплексных гидридов LiBeH₃, NaBeH₃ и LiMgH₃. Суханов Л. П., Болдырев А. И. «Ж. физ. химии», 1984, 58, № 3, 654—660

Неэмпирическим методом Хартри — Фока — Рутана с двухэкспонентным базисом Роса — Зигбана рассчитаны коэф. гармонич. силового поля, частоты и интенсивности норм. колебаний комплексных гидридов LiBeH₃, NaBeH₃ и LiMgH₃. Проведено отнесение типов колебаний. Вычислены изотопные сдвиги при различных изотопзамещениях в L[MH₃]. Обсуждается влияние на колебательный спектр природы как внешнесферного катиона L⁺, так и центрального атома М. Резюме

расчет

Сил. пост.

(+2) 

ср. 1984, 18, N 6

LiBeH_3

1984

100: 200073w Calculation of vibrational spectra of complex lithium beryllium hydride (LiBeH_3), sodium beryllium hydride (NaBeH_3), and lithium magnesium hydride (LiMgH_3). Sukhanov, L. P.; Boldyrev, A. I. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1984, 58(3), 654-60 (Russ). By the Hartree-Fock-Roothan method with the 2-exponent basis of B. Roos and P. Siegbahn the coeffs. of the harmonic force field, frequency and intensity of normal vibrations of the complex mols LiBeH_3 , NaBeH_3 and LiMgH_3 were calcd. Isotopic shifts were calcd for various isotopic substituents.

ν_i , calc. freq.
meop. paries

☒ (72)

C.A. 1984, 100, N 24

LiBeH_3

1985

8 Б1013. Стабильность и структура молекул LiBeH_3 и LiBH_4 по данным неэмпирических расчетов с учетом электронной корреляции. Горбик А. А., Чаркин О. П. «Ж. неорган. химии», 1985, 30, № 12, 3011—3015

Выполнены неэмпирич. расчеты относит. энергий альтернативных моно-, би- и тридентатных конфигураций молекул LiBeH_3 и LiBH_4 , а также энергий различных каналов их мономолек. распада на более простые продукты. Расчеты выполнены в базисе 6—31Гф** в приближении ССП и с учетом электронной корреляции в рамках метода самосогласованных электронных пар. Обсуждено влияние учета электронной корреляции на точность неэмпирич. расчетов простых и комплексных гидридов легких элементов.

Резюме

(4) ☒

Х. 1986, 19, N 8

структура

LiBeH_3

1985

Горбик А. А., Чаркин О. П.

(1)

Стабильность и структура молекул LiBeH_3 и LiBH_4 по данным неэмпирических расчетов с учетом электронной корреляции

мисск.
носк.

//Журн. неорган. химии. — 1985. — Т. 30, вып. 12. — С. 3011—3015.

Библиогр.: 6 назв.

— — 1. Литий, гидриды двойные — Структура — Расчет. 2. Бериллий, гидриды двойные — Структура — Расчет. 3. Литий, борогидриды — Структура — Расчет.

№ 15735

УДК 539.194

14 № 1080

ВКП 10.02.86

ЕСКЛ 18.5

Изд-во «Книга»

LiBeH₃

1985

104: 566198 Stability and structure of lithium beryllium hydride (LiBeH₃) and lithium tetrahydroborate (LiBH₄) calculated by a nonempirical method which takes into account electron correlation. Gorbik, A. A.; Charkin, O. P. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). Zh. Neorg. Khim. 1985, 30(12), 3011-15 (Russ). A nonempirical calcn. of the relative energies of alternative mono-, bi-, and tridentate configurations of LiBeH₃ and LiBH₄ is presented along with a calcn. of the energies of different paths for unimol. decompn. to more stable products. An SCF approxn. applied to a 6-31G** basis set was used taking into account electron correlation by using the method of self-consistent electron pairs. The influence of electron correlation on the accuracy of these calcns. is discussed.

смысл,
смакуешь,
неоп. продукт

⑦ LiBH₄

с. А. 1986, 104, № 8

LiBeH3
LiBeH5
Li2BeH4
расчет
потенци-
альной,
термодина-
мической
и
характер

Керсновой Н.Б., 1985
Автореферат диссертации
на соискание ученой степени
к.х.н., Москва, 1985.

Медиапричные расчеты
стабильности и структуры
комплексных гидридов легких
металлов с молекулярными
и атомными.

LiOBe

10м. 230501

1985

Мельник А.В., Любков -
ский С.В. и др.,

геометрия,
энергия.
характер;
изменения
и скле
расчет

ис. физ. химии, 1985,
59, N 12, 3012-3016.

LiBeH

1985

Reed Alan E.,
Weinstock Robert B., et al.

ab initio
param

J. Chem. Phys. 1985,
83(2); 735-46.

($\bullet$ CH_3F ; III)

LiBeH_3

1985

Зюбин А. С., Чабан Т. М.,
и др.

струк-
тура

Ж. Структур. химии,
1985, 26, N5, 12-18.

(см. $\bullet$ BeBH_4^+ ; III)

Be Li₂
Be Li₄

1986

Клименко М. М.,
Мусаев Д. Т. и др.

и. п.
теор.
расчет

Координат. химия,
1986, 12, N5, 601-607.

(см. ● Ca Li₂; III)

LiBeH₃ u gp.

1986

/ 105: 49280s Electronic correlation and relative energy characteristics in nonempirical calculations of light metal hydroberyllates. Charkin, O. P.; Chimiral'ya, R.; Persiko, M.; Tomasi, J. J. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). *Koord. Khim.* 1986, 12(3), 291-306 (Russ). The effect of electronic correlation on the relative energy characteristics (relative energy of alternate geometric configurations, energies of monomol. dissocn. of complexes, etc.) was studied in nonempirical calcs. for light-metal hydroberyllates (LiBeH₃, LiBe₂H₅, Li₂BeH₄, LiBe₂H₃, Li₂Be₂H₆) and of Be₂H₄¹⁻, Be₂H₆²⁻. The calcd. values of the total energies, the energies of dissocn., the relative energies, and the approx. additivity of the correlation contributions are presented. Quantum chem. calcs. on hydride salts are discussed.

(meop. pacis)

C.A. 1986, 105, N 6

LiBeF₃

1986

105: 199275h Determination of the basic configuration of gaseous inorganic salts from the nature of the splitting of the core levels of the ligand atoms. Gutsev, G. L.; Boldyrev, A. I. (USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1986, 31(9), 2200-4 (Russ). An inversion in the splitting of core levels of ligand atoms was found upon transition from F- to O-contg. inorg. salts. Discrete variation $X\alpha$ and Hartree-Fock-Roothaan calcns. were conducted for gaseous LiBeF₃, LiMgF₃, LiBF₄, LiAlF₄, LiClO₄, TiNO₃, and LiNO₃. The contributions of the principal factors, affecting the character and magnitude of the splitting of 1s-levels of ligand atoms, were estd.

El. Mex.
pacem.

(+6) ☒

~~LiMgF₃~~

C.A. 1986, 105, N 22.

LiBeH

1986

Kaufmann Elmar,
Tidor Bruce, et al.

u. n. J. Comput. Chem., 1986,
7, N3, 334-344.

(see  LiH; III)

LiBeF

(от. 25401)

1986

Яковсон В.В., Мусатов Д.Т.,
Чаркин О.Т.,

изомеризация,
теорет.
расчет.

ж. структур. химии,
1986, 27, № 6, 18-30.

$BeLi_{2k}$
 $k=1, 2, 3$

неоп.
расчѣм
же;

1986
Klimenko N. M.,
Musaev D. G., et al.

Кoord. Khim. 1986,
12(5), 601-7.

(ср. $BeLi_{2k}$; III)

BeLi₂

1986

$\kappa = 2 \div 2$

Koutecky J.,
Fantucci P.

св. ф. к. м.,
теор.
расчет.

J. Phys. D: At., Mol.
Clusters 1986, 3 (2-3),
147-53.

(см. также расчеты Li_n; III)

1986

BeLi₂
BeLi⁺
BeLi₄

(М.П.)

18 Б1029. Неэмпирические расчеты структуры и стабильности литиевых кластеров ALi_{2n} элементов второй группы. Клименко Н. М., Мусаев Д. Г., Горбик А. А., Зюбин А. С., Чаркин О. П., Вюртвайн Э. Ю., Шлойер П. ф. Р. «Координац. химия», 1986, 12, № 5, 601—607

Выполнены неэмпирич. хартри-фоковские расчеты геометрич. и относит. энергетич. х-к линейных молекул ALi_2 и квадратных ALi_4 , где $A = Be, Mg, Ca$ и Zn . Для $BeLi^+$, $BeLi_2$, $BeLi_4$ и $MgLi_2$ результаты уточнены с учетом электронной корреляции в рамках метода самосогласованных электронных пар. Показано, что стабильность ALi_{2n} возрастает с увеличением размера кластера, энергия синглет-триплетных переходов везде не превышает 0,5—1,5 эВ. Взаимодействия между атомами в кластерах имеют кооперативный характер: перекрывание между атомами Li не менее существенно, чем перекрывание между Li и центральным атомом A. Автореферат

(+3) ☒

X. 1986, 19, N 18

1) $MgLi_4$, $MgLi_2$ 2) $CaLi_4$

3) ZnLi_4



$\text{Li}^+ \text{Be} \text{F}^-$

1986

Яковлев В.В.,
Мусаев Д.Т. и др.

М.П. М. структур. химии,
1986, 27, № 6, 18-80.

(сер.  $\text{Li}^+ \text{CN}^-$; III)



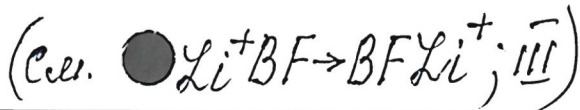
Yakobson V.V.,

Musaev D.G., et al.

теорет.
раб.

Zh. Strukt. Khim.

1986, 27(6), 18-30.



LiBeH_3

1986

Знобим А.С., Горбик А.А.
и др.,

Ж. неорг. химии,
1986, 31, N5, 1091-1097.

(ср. LiAlH_4 ; III)

LiBeH₃

(DM 26553)

1987

De Frees D. J., Raghava-
chari K., et al.,

эксперим.,

Δi, ΔfH,

теорет.

расчет

J. Phys. Chem., 1987,

91, n 7, 1857-1864.

LiBeH_3

1987

DeFrees D. J., Raghava-
chari Krishnan, et al.

meop.
pacrim. J. Phys. Chem., 1987,
91, N 7, 1837-1864.

(Cor. Li_2H_2 ; III)

Li Be Li

[от: 27553]

1987

Зюбина Т.С., Чаркин О.П.,
Зюбин А.С.,

струк-
тура
и
стойчивы.

Жс. неорганич. химии,
1987, 32, N 11, 2616-
-2624.

LiBe (NH₂)₃ (DM. 29339) 1988

теорет.
расчет
эксперим.

параметр.

Armstrong D. R.,
Berham H. L., et al.
J. Mol. Struct. Theo-
chem., 1988, 165,
● N 1-2, 65-86.

BeLi⁺

(DM. 29508)

1988

теорет.
расчёт,
характер.
хим. связи

Кеермейеро Н. И.,
Аллеев А. И.,
Чаркин О. П.

ЖС. структур. химии,
1988, ● 29, № 22-27.

BeLi⁺

[om. 29507]

1988

Медель А.М., Клименко Н.М.
и др.,

структура,
стабильн.

М. структур. химии,
1988, 29, N 3, 12-21.



BeLi_k
 BeLi_k^+
($k=1-9$)

011 31033

1988

№ 10 Б1041. Неэмпирическое исследование методом конфигурационного взаимодействия смешанных кластеров BeLi_k ($k=1-9$). Ab initio configuration interaction study of mixed BeLi_k clusters ($k=1-9$) / Pewestorf W., Bonačić-Koutecký V., Koutecký J. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 9.— С. 5794—5802.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП в базисах 3—21 ГФ, 6—31 ГФ, 6—31 ГФ* с оптимизацией геометрии проведены расчеты кластеров BeLi_k и BeLi_k^+ ($k=1-9$). Энергию кластеров уточняли методом конфигурац. взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями. Найдено, что энергия атомизации (в расчете на 1 атом) сильно возрастает с увеличением k от 1 до 7 для нейтр. кластеров (и от 1 до 8 — в случае катионов), а затем стабилизируется. Найдено, что кластеры BeLi_6 и BeLi_7^+ , имеют высокую стабильность по отношению к процессам фрагментации. Геометрия, стабильность кластеров, вертикальные и адиабатич. Пт ионизации связаны с узловыми св-вами МО кластеров. Проанализирована природа хим. связи в рассчитанных системах.

М. Б. Кузьминский

Х. 1989, № 10

LiBeH

1988

Sannigrahi A. B.,
Kar T.

u. n. J. Mol. Struct. Theo-
chem. 1988. 180. C.

149-160.

(see. LiH; III)

$(\text{LiBeH})_2$

1988

Sannigrahi A. B.,
Kar Tapas.

теорет.
расчёт
структур. и
связи.

THEOCHEM. 1988,
49, 149-60.

($\bullet$ сел. $(\text{LiH})_2$; III)

LiBeH_3
 Li_2BeH_4
 LiBe_2H_5

1989

' 112: 125569c Ab initio theoretical study of the structures and stabilities of the lithium beryllium hydride (LiBeH_3 , Li_2BeH_4 and LiBe_2H_5) molecules. Tamassy-Lentei, I.; Szaniszlo, J. (Inst. Theor. Phys., Kossuth Lajos Univ., 4010 Debrecen, Hung.). *Acta Phys. Hung.* 1989, 65(2-3), 265-70 (Eng). The geometry and the stability were studied of some small mols. contg. Li and Be. Among others, properties of the LiBeH_3 , Li_2BeH_4 and LiBe_2H_5 were detd. using the FSGO method. The structure and the stability of the above mentioned systems are discussed and the dissocn. energies for some possible chem. processes are detd.

расчет
структур
и стабильн.
С.А. 1990, 112, N 14

LiBeH

УД 31585 1989

17 Б1036. Неэмпирические расчеты потенциальных поверхностей внутримолекулярных перегруппировок в системах LiMH_{x-1} / Тикиляйнен А. А., Зюбин А. С., Чаркин О. П. // Ж. неорган. химии.— 1989.— 34, № 5.— С. 1091—1095.— Рус.

В рамках приближения ССП с валентно-двухэкспонентными базисами рассчитаны сечения потенциальных Пв (ПП) внутримолек. перегруппировок LiMH_{k-1} (классич. структура со связью $\text{Li}-\text{M}) \rightarrow \text{MH}_{k-1}\text{Li}$ (мостиковая структура, где Li^+ координирован к атомам H) в системах LiBeH , LiMgH , LiNH_2 , LiOH , LiPH_2 , LiSH , LiNH_3^+ , LiOH_2^+ , LiFH^+ , LiPH_3^+ , LiSH_2^+ , LiClH^+ . Энергии особых точек ПП уточняли с учетом электронной корреляции в рамках приближения МПЗ/ДЭХД+ПП. Результаты сравниваются с данными аналогичных расчетов для соединений III и IV групп, выполненных ранее. Сформулированы качеств. критерии возможности существования структур LiMH_{k-1} и MH_{k-1} в виде изомеров.

Резюме

М. А.

(41) 17

X. 1989, N 17

Li BetH

[OM 31585]

1989

незмур.
расчет
потери.
поверх.

Тиккляйнен А.А., Зю-
бин А.С., Чаркин О.П.,

И. Неотак. Кемпи, 1989,
34; N 5, 1091-1095.

Li_2BeH_4

DM 33123

1990

1 13 Б1010. Теоретическое исследование стабильности и структуры комплексных гидридов Li_2BeH_4 , Li_2MgH_4 , Li_2BH_4^+ и $\text{Li}_2\text{AlH}_4^+$ / Чаркин О. П., Клабо А., Шлойер П. ф. Р., Зюбин А. С. // Координац. химия.— 1990. — 16, № 3.— С. 309—317.— Англ.

Выполнены неэмпирич. расчеты «ключевых» альтернативных структур комплексных гидридов Li_2BeH_4 , Li_2MgH_4 , Li_2BH_4^+ и $\text{Li}_2\text{AlH}_4^+$. Геометрия оптимизировалась в приближении ССП/6—31ГФ*, энергии особых точек уточнялись в приближении Меллера—Плессета 4-го порядка; рассчитаны частоты колебаний, проанализированы участки потенциальной ПВ между «ключевыми» структурами и локализованы переходные состояния. Обсуждается структурная нежесткость к миграции катионов вокруг анионов MH_4^{2-} и перегруппировкам с непрерывной перестройкой катионов и аниона. Анализируются различия в структурных и энергетич. х-ках у нейтр. молекул Li_2MH_4 и изоэлектронных ионов Li_2MH_4^+ .

Резюме

М.П.

(73)

Р

X. 1990, N 13

Li₂BeH₄

от 33123

1990

6 Д158. Теоретическое исследование стабильности и структуры комплексных гидридов Li₂BeH₄, Li₂MgH₄, Li₂BH₄⁺ и Li₂AlH₄⁺ / Чаркин О. П., Клабо А., Шлойер П. ф. Р., Зюбин А. С. // Координац. химия.— 1990.— 16, № 3.— С. 309—317

Выполнены неэмпирич. расчеты «ключевых» альтернативных структур комплексных гидридов Li₂BeH₄, Li₂MgH₄, Li₂BH₄⁺ и Li₂AlH₄⁺. Геометрия оптимизировалась в приближении ССП/6-31ГФ*, энергии особых точек уточнялись в приближении Меллера — Плессета четвертого порядка МП40ДТК/6-31ГФ**, рассчитаны частоты колебаний, проанализированы участки потенц. поверхности между «ключевыми» структурами, локализованы переходные состояния. Обсуждается структурная нежесткость к миграции катионов вокруг анионов MH₄²⁻ и перегруппировкам с непрерывной перестройкой катионов и аниона. Анализируются различия в структурных и энергетич. характеристиках у нейтральных молекул Li₂MH₄ и изоэлектронных ионов Li₂MH₄⁺.

Резюме

М. А.

43

ср. 1990, № 6

Li_2BeF_4

Im 33176

1990

115: 287532b Nonempirical study of the structure and stability of fluoro complexes; Li_2BeF_4 , Li_2MgF_4 , Li_2BF_4^+ and $\text{Li}_2\text{AlF}_4^+$. Clabo, A.; Schleyer, Paul v. R.; Charkin, O. P. (Inst. Nov. Khim. Probl., USSR). Zh. Neorg. Khim. 1990, 35(3), 639-47 (Russ). The structure was calcd. for Li_2BeF_4 , Li_2MgF_4 , Li_2BF_4^+ , and $\text{Li}_2\text{AlF}_4^+$. The cation migration around tetrahedral ions is considered, as well as intramol. transformations with continuous restructuring of the anion ($\text{BeF}_4^{2-} \rightleftharpoons \text{BeF}_3^-$) and of the cation ($2\text{Li}^+ \rightleftharpoons \text{Li}_2\text{F}^+$).

смыслна,
пацен

(43) ☒

C.A. 1991, 115, N 26

LiBeF_4
 Li_2

DM 33176

1990

№ 15 Б1038. Неэмпирические исследования структуры и стабильности комплексных фторидов Li_2BeF_4 , Li_2MgF_4 , Li_2BF_4^+ и $\text{Li}_2\text{AlF}_4^+$ / Клабо А., Шлойер П.ф.Р., Чаркин О. П. // Ж. неорганич. химии.— 1990.— 35, № 3.— С. 639—647.— Рус.

В рамках приближения ССП/6—31Г* оптимизирована геометрия «ключевых» альтернативных структур молекул солей LiBeF_4 , Li_2MgF_4 и ионов Li_2BF_4^+ , $\text{Li}_2\text{AlF}_4^+$, отвечающих три (I, C_{2v})-, би (II, D_{2d})- и моно (III, C_{2v})-дентатным координациям двух катионов Li^+ к тетраэдрич. анионам типа BeF_4^{2-} и BF_4^- , а также плоской структуры типа $\text{Li}_2\text{F}^+ \cdot \text{BeF}_3^-$ — и $\text{Li}_2\text{F}^+ \cdot \text{BF}_3^-$ (IV, C_{2v}). Относит. энергии особых точек уточнялись с учетом электронной корреляции на уровне МП2/6—31Г*. Показано, что для ионов Li_2BF_4^+ и $\text{Li}_2\text{AlF}_4^+$ основной является симм. структура II, а нейтр. молекулы Li_2BeF_4 и Li_2MgF_4 д. б. структурно-нежесткими (первая — в большей, вторая — в меньшей степени) как к миграции ка-

М.П.

43

Х. 1990, № 15

тионов вокруг тетраэдрич. аниона, так и к самосогла-
сованной внутримолек. перегруппировке $\text{II} \rightleftharpoons \text{IV}$ с не-
прерывной перестройкой аниона ($\text{BeF}_4^{2-} \rightleftharpoons \text{BeF}_3^-$) и
катиона ($2\text{Li}^+ \rightleftharpoons \text{Li}_2\text{F}^+$). Результаты сравниваются с
данными аналогичных МП4/6—31Г**-расчетов для род-
ственных гидридов Li_2BeH_4 , Li_2MgH_4 , Li_2BH_4^+ и $\text{Li}_2\text{-AlH}_4^+$.

Резюме



BeLi⁺

1990

Nicolaides C.A.,
Chrysos M. et al.

et al.
J. Phys. B. 1990. 23,
NS.C. 791-800.

(see Be²⁺; III)

LiBe

DM 34844

1990

— 4 B1232. Простейший гетероядерный кластер металлов. LiBe. The simplest heteronuclear metal cluster: LiBe / Schlachta R., Fischer I., Rosmus P., Bondybey V. E. // Chem. Phys. Lett.— 1990.— 170, № 5—6.— С. 485—491.— Англ.

Электронный переход с началом при $19\,203\text{ см}^{-1}$ наблюдавшийся в спектре лазерного возбуждения ФЛ продуктов лазерного испарения смеси порошкообразных Li и Be (1:2) в поток инертного газа отнесен к экспериментально обнаруженной молекуле LiBe ($C^2\Pi \leftarrow \leftarrow X^2\Sigma^+$). В колебат. структуре наблюдались полосы $v'=0-7 \leftarrow v''=0$ и $0-1$. Величины колебат. интервалов $\Delta G'_{1/2}$ и $\Delta G''_{1/2}$ равны соотв. 188 и 295 см^{-1} . Измерена и проанализирована вращат. структура полосы $0-0$. Значения B_0' , B_0'' (в см^{-1}), R_0' , R_0'' (в Å) равны соотв. 0,463; 0,637; 3,04; 2,59. Результаты сопоставлены с эксперим. молек. параметрами Li_2 ($X^1\Sigma_g^+$) и Be_2 ($X^1\Sigma_g^+$) и с данными различных неэмпирич. расчетов молекулы LiBe.

В. М. Ковба

М.П.

X-1991, № 4

BeLi

Fischer I., Bondyke V.E.
et al.,

1991

M.N.

J. Chem. Phys. 1991, 151,
N3, C. 295-308

● (all-Be⁺; III)

Be Li

Om 35 770

1991

115: 99687g Theoretical study of the electronic states of beryllium lithium and beryllium dimer ion(1+). Fischer, I.; Bondybey, V. E.; Rosmus, P.; Werner, H. J. (Inst. Phys. Theor. Chem., TU Muenchen, W-8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1991, 151(3), 295-308. (Eng). The potential energy, elec. dipole and electronic transition moment functions have been calcd. from highly correlated MRCI electronic wavefunctions for low lying doublet and quartet states of the simplest heteronuclear metal diat., BeLi and the isoelectronic ion Be_2^+ . The ground state of BeLi was calcd. to be bound by 0.31 eV. The MRCI values for the equil. bond length r_0 of 2.619 Å is in good agreement with the exptl. value of 2.59 Å. The dipole moment of the $X^2\Sigma^+, v = 0$ state is calcd. to be 2.417 D. The results are compared with the isoelectronic 7 electron system Li_2 . Spectroscopic consts. and radiative transition probabilities are given for most of the calcd. states.

основное
состояние
 D_0 , 2 $\boxtimes$ $\oplus$
низколежащ.
уровн. и
квант. состоянием
С. А. 1991, 115, № 10



BeLi

DM 35770

1991

21 Б1021. Теоретическое изучение электронных состояний BeLi и Be₂⁺. Theoretical study of the electronic states of BeLi and Be₂⁺ / Fischer I., Bondybey V. E., Rosmus P., Werner H.-J. // Chem. Phys.— 1991.— 151, № 3.— С. 295—308.— Англ.

Методом конфигурац. вз-вия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям рассчитаны потенциальные кривые низколежащих дублетных и квартетных электронных состояний молекул BeLi и Be₂⁺. Использован базис сгруппир. гауссовых ф-ций (12s6p4d2f)/[9s6p4d2f] для Li и (11s6p4d2f)/[8s6p4d2f] для Be. Орбитали получены многоконфигурац. методом ССП в полном активном пространстве. Рассчитаны ф-ции дипольных моментов и моментов переходов. Определены спектроскопич. постоянные и вероятности излучат. переходов. Для основного состояния BeLi равновесное расстояние равно 2,619 А, энергия диссоциации 0,31 эВ и дипольный момент 2,417 Д. Сопоставлены спектроскопич. постоянные изоэлектронных молекул BeLi, Be₂⁺ и Li₂⁻.

А. А. Сафонов

М.П.

X. 1991, № 21

Be₂⁺

$\text{Li}^+ \text{BF}_3$

LiBF_3

1991

Ramondo F., Benicewicz L.,
et al.,

составов.

и

структур

Chem. Phys. 1991,

158 (1), 41-57

(all. BF_4^- ; III)

BeLi⁺
BeLi⁻

Om 37214

1992

4 Б1021. Теоретическое исследование молекул BeLi, BeNa, MgLi, MgNa, AlBe и их отрицательных ионов. Theoretical study of the BeLi, BeNa, MgLi, MgNa, and AlBe molecules and their negative ions /Bauschlicher Charles W. (Jr), Langhoff Stephen R., Partridge Harry //J. Chem. Phys. —1992.—96, № 2.—С. 1240—1247.—Англ.

Неэмпирическими методами высокого уровня точности рассчитаны молек. постоянные перечисленных в заглавии систем. Использованы базисы на основе натуральных АО с учетом ф-ций вплоть до f-типа. МО получены многоконфигурац. методом ССП в полном активном пространстве. Корреляц. эффекты более высоких порядков учтены методами конфигурац. вз-вия с множеством исходных конфигураций. или модифицир. методом функционала связанных пар. Нейтр. молекулы отвечают слабосвязанным образованием с энергиями диссоциации D_0 : 0,29,

М.П.



Х. 1993, № 4.

0,14; 0,20; 0,11; 0,57 и 0,40 эВ для $\text{BeLi}(^2\Sigma^+)$, $\text{BeNa}(^2\Sigma^+)$, $\text{MgLi}(^2\Sigma^+)$, $\text{MgNa}(^2\Sigma^+)$, $\text{AlBe}(^2\pi \text{ и } ^2\Sigma^+)$ соотв. Равновесные расстояния составляют. (для той же последовательности) 2,607; 3,052; 3,110; 3,564; 2,427 и 2,632 А. Отриц. ионы образуют более сильносвязанные системы; наибольшие величины D_e найдены для AlBe^- : 1,36 ($^3\Sigma^-$) и 1,12 эВ ($^3\pi$). Определены также сродство к электрону и гармонич. частоты колебаний. Проанализированы орбитальные диаграммы и обсуждены вклады в дальнодействующее вз-вие атомов щел. и щел.-зем. металлов. А. В. Немухин

BeLi
BeLi⁻

Im 37214

1992

теорет.
расчет

11 Д119. Теоретическое исследование молекул BeLi, BeNa, MgLi, MgNa и AlBe и их отрицательных ионов. Theoretical study of the BeLi, BeNa, MgLi, MgNa, and AlBe molecules and their negative ions / Bauschlicher C. W. (Jr.), Langhoff S. R., Partridge H. // J. Chem. Phys.— 1992.— 96, № 2.— С. 1240—1247.— Англ.

□ Проведены неэмпирич. расчеты молекул BeLi, BeNa, MgLi, MgNa и AlBe и их отрицат. ионов. Орбитали

(+3)

BeNa, BeNa⁻, MgLi, MgLi⁻,
AlBe, AlBe⁻

Ф. 1992, N 11-12.

оптимизованы с использованием метода полного активного пространства ССП. Внешняя корреляция включалась с использованием приближения НИК-КВ. Эффект корреляции внутренних оболочек учитывался в рамках модифицированного метода функционала связанных пар. Найдено, что указанные молекулы имеют слабые связи, поскольку диффузные валентные s -орбитали щелочных атомов не могут образовать достаточно сильную связь со щелочноземельными атомами. Это приводит к появлению ван-дер-ваальсовых связей в нейтральных молекулах и в отрицат. ионах. Отрицат. ионы имеют большие энергии связи, чем нейтралы, в результате существенно большей поляризуемости отрицат. иона. Энергия связи в AlBe значительно больше, чем в молекулах Be — щелочной металл, вследствие ковалентного вклада в связь.

Libe

1992

Ermler W.C., Marino M.M.
et al.,

47th Ohio State Univ.,
Int. Symp. Mol. Spectrosc.,
Columbus, Ohio, June 15-19,
1992. — Columbus (Ohio), 1992, —
C. 102.

(all. Cs₂; III)

LiBe

1992

(120: 253653e Theoretical and STM studies of the electronic structure of metal/semiconductor/hydrogen systems. Ermler, W. C. (Dep. Chem. Chem. Eng., Stevens Inst. Technol., Hoboken, NJ USA). Report 1992, AFOSR-TR-92-1024; Order No. AD-A258693, 76 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1993, 93(8), Abstr. No. 321,687. The structure of at. clusters was investigated using methods of ab initio quantum chem. in conjunction with scanning tunneling microscopy (STM). Gold sols were imaged via STM and their sizes characterized. At. resolu. revealed facets, steps, and reconstructed surfaces of the sols. STM images of graphite surfaces are characterized by two mechanisms: a twisted top layer configuration and a graphite-flake contaminated tip. Ab initio calcns. of electronic states of a 135-atom Be cluster show bulk behavior for many properties centered at the middle of the cluster. The d. of states agrees well with band theory models. Full spin-orbit CI calcns. of the electronic spectrum and potential energy curves of LiBe, including Rydberg states, are definitive and accurate. A procedure for incorporating core/valence polarization effects in all-valence electron calcns. is presented for use with relativistic effective core potentials. The methods allows the treatment of large clusters at the ab initio level including procedures for the inclusion of electron correlation.

M. Ermler,
NOMER. q-ue
ab initio fac
zem

C. A. 1994, 120, N 20

LiBe

(Am. 37 389)

1992

116: 159220g Spin-orbit configuration-interaction study of valence and Rydberg states of lithium-beryllium (LiBe). Marino, M. M.; Ermler, W. C.; Kern, C. W.; Bondybey, V. E. (Dep. Chem., Ohio State Univ., Columbus, OH 43210 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(5), 3756-66 (Eng). Ab initio spin-orbit full configuration-interaction calcns. in the context of relativistic effective core potentials are reported for the weakly bound metal dimer LiBe, a three-valence-electron system. The effects of basis set on the energies of valence and Rydberg states of the cluster are discussed, as are the effects of configuration space selection on the energy of the latter states. Results at the dissociative limit are compared to the exptl. at. spectra. Potential-energy curves and spectroscopic consts. are presented for the ground state and fourteen excited states, which includes the Li and Be 2p valence states, the Li 3s, 3p, 3d, 3d, and 4s Rydberg states, as well as three low-lying states of the mol. cation.

Валентные
и Ридберг. сост.

(ab initio
расчет)

C.A. 1992, 116, N 16

Li_2BeF_4

1992

Ramondo F.,
Bencivenni L. et al.

сверхпроводя,

THEOCHEM

VI, теор.

1992, 96, 171-84.

расчет

(cell. Mg_2F_4 ; III)

LiBe^+

LiBe^-

LiBe

1993

Boldyrev A.I.,

Simons J. et al.

ab initio
расчет
осн. состоян.,

и.п.

J. Chem. Phys. 1993,
99 (11), 8793-504.



(ср. Li_2 ; III)

Li₄BeH₆

1993

261372m Quantum chemical study of the structure and stability of Li₄BeH₆ and Li₄MgH₆. Zyubin, A. S.; Charkin, O. P.; Schleyer, Paul v. R. (Inst. Nov. Khim. Probl., Serboogolovka, Russia). Zh. Neorg. Khim. 1993, 38(2), 327-41. Nonempirical calcn. are presented of the geometry, electronic structure and relative energies of different isomers of the title mols. including a potential surface anal. Force const., zero-point vibrational energies, and relative stabilities were calcd. for the most stable structures

структура
и стабильн.,
кул. посм.,

Pi

(H) 

C. A. 1993, 118, N 26

1993

№ 10 Б1039. Квантово-химическое исследование структуры и стабильности гидридных комплексов Li_4BeH_6 и Li_4MgH_6 /Зюбин А. С., Чаркин О. П., Клабо Д. А., Шлойер П. Ф. Р. //Ж. неорганич. химии. — 1993. — 38, № 2. — С. 327—341. — Рус.

Для прогнозирования существования комплексных гидридов с высоким содержанием водорода выполнены неэмпирич. расчеты геометрич. строения, электронной структуры и относит. энергий широкого набора различных конфигураций молекул Li_4MH_6 ($\text{M}=\text{Be}, \text{Mg}$). Оптимизация геометрич. параметров и анализ характера особых точек потенциальной поверхности проведены в приближении ССП/3-21ГФ, уточнение энергетич. х-к — в рамках схемы МП2/6-31ГФ*. Для наиболее стабильных структур геометрич. параметры, силовые постоянные и энергии нулевых колебаний уточнены в приближении МП2/6-31ГФ* а их относит. стабильность — в рамках МП4/6-31ГФ**. Найдено, что молекулы Li_4MH_6 стабильны к распаду и

Лиувелл

структура,
Кв. - лис.
расчет

41

X. 1993, N 10

Лиувелл

могут существовать в изолированном состоянии или в инертных матрицах. По электронному строению они имеют сходство с олигомерами гидридов щел. металлов типа Li_nH_n . Наиболее интересной особенностью систем Li_4MH_6 является существование нескольких изомеров, близких по энергии к основной структуре: в интервале 5—6 ккал/моль имеется не менее пяти таких конфигураций. Их общей чертой является наличие атомов М с координац. числом (КЧ) четыре. Структуры, в к-рых координац. числа Be и Mg разны трем, менее стабильны. Конфигурации, включающие атомы М с $\text{КЧ}=5$ или 6, еще более невыгодны энергетически. Для обеих молекул возможно существование структурной нежесткости по отношению к внутримолек. перегруппировкам низлежащих изомеров друг в друга. Библ. 42.



Bedi

PM 37773

1994

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

25+

Q,

исследование,

теорема.

парем

J. Phys. Chem., 1994,

98, N 40, 9931-9944

1995

F: LiOBe

P: 3

7Б184. эмпирическое изучение сильного связывания BeO к атомам Li, Be и B в гиперстехиометрических молекулах LiOBe, BeOBe и BeOB. Ab initio study of the strong binding of BeO to Li, Be, and B atoms in the hyperstoichiometric LiOBe, BeOBe, and BeOB molecules / Boldyrev Alexander I., Simons Jack // J. Phys. Chem. - 1995. - 99, N 41. - С. 15041-15045. - Англ.

Место хранения ГПТБ

Показано, что наиболее стабильными структурами указанных в заглавии молекул являются линейные структуры. Энергии диссоциации (в ккал/моль) получены равными для LiOB (на LiO+Be) 114 и (на BeO+Li) 116; для BeOBe (на BeO+Be) 100; для BeOB (на BO+Be) 59 и (на BeO+B) 168. Обсуждена природа связей в молекулах.

Р.Ж.Х. № 7, 1996.

LiOBe

1995

F: LiOBe

P: 3

05Д.0151. эмпирическое исследование сильных связей BeO с атомами Li, Be и B в гиперстехиометрических молекулах LiOBe, BeOBe и BeOB. Ab initio study of the strong binding of BeO to Li, Be, and B atoms in the hyperstoichiometric LiOBe, BeOBe, and BeOB molecules / Boldyrev Alexander I., Simons Jack // J. Phys. Chem. - 1995. - 99, N 41. - С. 15041-15045. - Англ.

The equilibrium geometries and fundamental vibrational frequencies of LiOBe, BeOBe, and BeOB have been calculated using MP2(full)/6-311+G* and QCISD/6-311+G* levels of theory. The linear LiOBe ($\{2\}'\Sigma^+$), BeOBe ($\{1\}'\Sigma^g^+$), and BeOB ($\{2\}'\Sigma^+$) structures were found to be the most stable, with representative dissociation energies of LiOBe, 114 kcal/mol (into LiO+Be) and 116 kcal/mol (into BeO+Li); BeOBe, 100 kcal/mol (into BeO+Be); and BeOB, 59 kcal/mol (into BO+Be).

x. 1996, N 5

and 168 kcal/mol (into BeO+B). The strong binding of BeO to Li, Be, and B is related to the nature of the bonding in BeO, in which the charge on O is significantly below -2. The bonding in BeO was further examined by comparing to the single Be-O bonds in BeOH and HBeOH. The bond in BeO was found to be only 0.06 Å shorter than the Be-O single bonds in HBeOH and BeOH and to have about the same dissociation energy as these single bonds, in agreement with authors' statement that BeO does not possess a conventional double bond.



LiOBe

OT 38075

1995

123: 322436n Ab Initio Study of the Strong Binding of BeO to Li, Be, and B Atoms in the Hyperstoichiometric LiOBe, BeOBe, and BeOB Molecules. Boldyrev, Alexander I.; Simons, Jack (Department of Chemistry, University of Utah, Salt Lake City, UT 84112 USA). *J. Phys. Chem.* 1995, 99(41), 15041-5 (Eng). The equil. geometries and fundamental vibrational frequencies of LiOBe, BeOBe, and BeOB have been calcd. using MP2(full)/6-311+G* and QCISD/6-311+G* levels of theory. The linear LiOBe ($^2\Sigma^+$), BeOBe ($^1\Sigma_g^+$), and BeOB ($^2\Sigma^+$) structures were found to be the most stable, with representative dissocn. energies of LiOBe, 114 kcal/mol (into LiO + Be) and 116 kcal/mol (into BeO + Li); BeOBe, 100 kcal/mol (into BeO + Be); and BeOB, 59 kcal/mol (into BO + Be) and 168 kcal/mol (into BeO + B). The strong binding of BeO to Li, Be, and B is related to the nature of the bonding in BeO, in which the charge on O is significantly below -2. The bonding in BeO was further examd. by comparing to the single Be-O bonds in BeOH and HBeOH. The bond in BeO was found to be only 0.06 Å shorter than the Be-O single bonds in HBeOH and BeOH and to have about the same dissocn. energy as these single bonds, in agreement with our statement that BeO does not possess a conventional double bond.

структур.
параметры,
Li, берил
связи, теор.
расчет (+2)

BeOBe, BeOB

C. A. 1995, 123, N 24

BeLi₆

1995

15 Б151. Неэмпирическое исследование перегруппировки тригонального твиста в гексалиитидных кластерах $AlLi_6$ с 8 и 10 валентными электронами / Иванич Д., Чаркин О. П., Клименко Н. М., Марсден К. // Ж. неорганической химии. — 1995. — 40, № 11. — С. 1892—1899. — Рус.

Выполнены прецизионные неэмпирич. $MP4SDQ/DZP//HF/DZP + ZPE(HF/DZP)$ и $QCISD(T)/DZP//MP2/DZP + ZPE(MP2/DZP)$ расчеты конфигураций октаэдра O_h и треугольной призмы D_{3h} для электронодефицитных молекул $BeLi_6$, CLi_6 , $SiLi_6$ и ионов $B Li_6^+$, $Al Li_6^+$, $N Li_6^+$, $P Li_6^+$ в синглетном состоянии. Найдено, что барьер тригонального твиста $O_h \rightarrow D_{3h} \rightarrow O'_h$ у гексалитидов элементов второго периода не превышает 10—17 ккал/моль и уменьшается до 4—6 ккал/моль у соединений элементов третьего периода. Сделан вывод о структурной нежесткости гексалитидов к этой внутримолекулярной перегруппировке и высказано предположение о дальнейшем понижении барьера при изменении центрального атома вдоль подгрупп вниз Периодич. системы. Результаты сравниваются с данными расчетов для гексагидридов AH_6^{n-} и гексафторидов AF_6^{n-} с 12 и 48 валентными электронами, где барьеры очень высоки.

ⓧ (f6)

X. N15, 1996.

1998

F: LiBeCl3

P: 3

19B123. Неэмпирическое исследование структуры и стабильности комплексных молекул солей галогенидов и гидридов $LAB[3]$ ($L=Li, Na, M=Be, Mg, B^{+}, Al^{+}, B=F, Cl, H$) / Чаркин О. П., МакКи М. Л., Шлойер П. ф. Р. // Ж. неорганической химии. - 1998. - 43, 3. - С. 474-487. - Рус.

В рамках приближений $MP2/6-31G^{*} // X\Phi/6-31G^{*} + ZPE(X\Phi/6-31G^{*})$ и $MP4SDTQ/6-31G^{*} // MP2/6-31G^{*} + ZPE(MP2/6-31G^{*})$ выполнены неэмпирические расчеты поверхностей потенциальной энергии молекул гидридных, фторидных и хлоридных солей лития и натрия типа $LAB[3]$ с 6 и 24 валентными электронами, а также изоэлектронных ион-молек. комплексов типа $LAB[3]^{+}$, $LAB[3]^{2+}$ и ионов $A[2]B[3]^{+}$ ($L=Li, Na; A=Be, Mg, B,$

ФЖХ, 1998, №19

Al; B=N, F, Cl). Найдены равновесные геометрические параметры моно-, би- и тридентатно координированных структур, частоты и интенсивности их нормальных колебаний, оценены относительные энергии изомеров и энергии их распада. Обсуждается влияние электронной корреляции на результаты расчетов. Анализируются тенденции свойств в различных рядах молекул и ионов $AB[3]$ при замещении Be и B на Mg и Al, Na на Li, H на F и Cl и т. д., прогнозируются соединения с необычными координациями анионов. Обсуждаются деформация и поляризация анионов $AB[3]\{-\}$ под влиянием катиона при различных способах их взаимной ориентации.

1998

F: LiBeF3

P: 3

19B123. Неэмпирическое исследование структуры и стабильности комплексных молекул солей галогенидов и гидридов $LAB[3]$ ($L=Li, Na, M=Be, Mg, B\{+\}, Al\{+\}, B=F, Cl, N$) / Чаркин О. П., МакКи М. Л., Шлойер П. ф. Р. // Ж. неорганической химии. - 1998. - 43, 3. - С. 474-487. - Рус. В рамках приближений $МП2/6-31ГФ\{*\} // ХФ/6-31ГФ\{*\} + ZPE(ХФ/6-31ГФ\{*\})$ и $МП4SDTQ/6-31ГФ\{*\} // МП2/6-31ГФ\{*\} + ZPE(МП2/6-31ГФ\{*\})$ выполнены неэмпирические расчеты поверхностей потенциальной энергии молекул гидридных, фторидных и хлоридных солей лития и натрия типа $LAB[3]$ с 6 и 24 валентными электронами, а также изoeлектронных ион-молек. комплексов типа $LAB[3]\{+\}$, $LAB[3]\{2+\}$ и ионов $A[2]B[3]\{+\}$ ($L=Li, Na; A=Be, Mg, B,$

РЖХ, 1998, №19

Al; B=H, F, Cl). Найдены равновесные геометрические параметры моно-, би- и тридентатно координированных структур, частоты и интенсивности их нормальных колебаний, оценены относительные энергии изомеров и энергии их распада. Обсуждается влияние электронной корреляции на результаты расчетов. Анализируются тенденции свойств в различных рядах молекул и ионов $LAB[3]$ при замещении Be и B на Mg и Al, Na на Li, H на F и Cl и т. д., прогнозируются соединения с необычными координациями анионов. Обсуждаются деформация и поляризация анионов $AB[3]\{-\}$ под влиянием катиона при различных способах их взаимной ориентации.

F: Li₂BeF₄

P: 3

1998

19B124. Неэмпирическое исследование структуры и перегруппировок нежестких молекул солей Li₂BeX₄, Li₂MgX₄ и ионов Li₂BX₄{+}, Li₂AlX₄{+} (X=H, F) / Чаркин О. П., МакКи М. Л., Чаркин Д. О., Шлойер П. ф. Р. // Ж. неорганической химии. - 1998. - 43, 3. - С. 488-500. Рус.

Выполнены неэмпирические расчеты поверхностей потенциальной энергии молекул солей комплексных гидридов Li₂BeH₄, Li₂MgH₄, фторидов Li₂BeF₄, Li₂MgF₄ и изоэлектронных ионов Li₂BH₄{+}, Li₂AlH₄{+}, Li₂BF₄{+} и Li₂AlF₄{+}. Для гидридов они рассчитаны в приближении QCI-SD(T)/6-31ГФ{**} // МП2/6-31ГФ{*}+ZPE(МП2/6-31ГФ{*}), а для фторидов - в приближении МП2/6-31ГФ{*} // ХФ/6-31ГФ{*}+ZPE(ХФ/6-31ГФ{*}). Для молекул солей локализована совокупность из четырех-пяти изомеров с трех- и

ФХХ, 1998, №19.

четырёхкоординированными атомами Be и Mg, которые близки по энергии, разделены невысокими и пологими барьерами и могут трансформироваться друг в друга. У ионов $\text{Li}[2]\text{MX}[4]\{+\}$ явно предпочтительны изомеры с четырёхкоординированными Be и Al. Определены равновесные геометрические параметры и относительные энергии изомеров, частоты и ИК-интенсивности их нормальных колебаний. Исследованы нежесткие внутримолек. перегруппировки ступенчатой и одновременной миграции катионов $\text{Li}\{+\}$ вокруг тетраэдрических анионов $\text{MX}[4]$, свертывания плоского шестичленного цикла $\text{XLi}[2]\text{X}[2]\text{M}$, вращения ониевого катиона $\text{XLi}[2]\{+\}$ и аниона $\text{MX}[3]\{-\}$ относительно друг друга, разрыва мостиковой связи $\text{M-X}[b]$ и др. Обсуждены деформация и поляризация анионов под влиянием катионов при различных способах их взаимной ориентации. Отмечена необходимость динамического подхода для описания структуры нежестких молекул типа $\text{Li}[2]\text{MX}[4]$.

F: Li₂BeH₄

P: 3

1998

19B124. Неэмпирическое исследование структуры и перегруппировок нежестких молекул солей Li[2]BeX[4], Li[2]MgX[4] и ионов Li[2]BX[4]{+}, Li[2]AlX[4]{+} (X=H, F) / Чаркин О. П., МакКи М. Л., Чаркин Д. О., Шлойер П. ф. Р. // Ж. неорган. химии. - 1998. - 43, 3. - С. 488-500. - Рус.

Выполнены неэмпирические расчеты поверхностей потенциальной энергии молекул солей комплексных гидридов Li[2]BeH[4], Li[2]MgH[4], фторидов Li[2]BeF[4], Li[2]MgF[4] и изоэлектронных ионов Li[2]BH[4]{+}, Li[2]AlH[4]{+}, Li[2]BF[4]{+} и Li[2]AlF[4]{+}. Для гидридов они рассчитаны в приближении QCI-SD(T)/6-31ГФ{**}//МП2/6-31ГФ{*}+ZPE(МП2/6-31ГФ{*}), а для фторидов - в приближении МП2/6-31ГФ{*}//ХФ/6-31ГФ{*}+ZPE(ХФ/6-31ГФ{*}). Для молекул солей локализована совокупность из четырех-пяти изомеров с

РЖХ, 1998, N19

трех- и четырехкоординированными атомами Be и Mg, которые близки по энергии, разделены невысокими и пологими барьерами и могут трансформироваться друг в друга. У ионов $\text{Li}[2]\text{MX}[4]\{+\}$ явно предпочтительны изомеры с четырехкоординированными B и Al. Определены равновесные геометрические параметры и относительные энергии изомеров, частоты и ИК-интенсивности их нормальных колебаний. Исследованы нежесткие внутримолек. перегруппировки ступенчатой и одновременной миграции катионов $\text{Li}\{+\}$ вокруг тетраэдрических анионов $\text{MX}[4]$, свертывания плоского шестичленного цикла $\text{XLi}[2]\text{X}[2]\text{M}$, вращения ониевого катиона $\text{XLi}[2]\{+\}$ и аниона $\text{MX}[3]\{-\}$ относительно друг друга, разрыва мостиковой связи $\text{M-X}[b]$ и др. Обсуждены деформация и поляризация анионов под влиянием катионов при различных способах их взаимной ориентации. Отмечена необходимость динамического подхода для описания структуры нежестких молекул типа $\text{Li}[2]\text{MX}[4]$.

BeLi

1999

Begue, Didier, et al.,

J. Chem. Phys. 1999,
110 (4), 2057-2058

нижные
м. сост.,
теор. рас-
чет

(all. Be₂; III)

Be Li.

[Am. 39969]

1999

Didier Bégue et al.,
J. Chem. Phys., 1999,
110, N4, 2057-2058

Li_2BeI_2
 Li_2BeI_2

[Дм. 40577]

2000

Чаркин О. П., Клименко Н. М.
и др.,

поверхн.
пониж. Ал. Неотам. химии, 2000, 45,
физики,
расп. N 11, с. 1859-1870

Кетилитовские исследования
ионеров в молекулах
солей Li_2AB_2 и ионах Li_2AB_2^+

с 16 валентными электронами.

$(\text{LiBeH}_3)_2$

(Дм. 40583)

2000

$(\text{LiBeF}_3)_2$

Чаркин О.П., Клименко Н.М.
и др.,

стр-ра,
статья.

Дл. неортан. химии,
2000, 45, N 5, 843-856

Неэмпирическое
исследование
ионизирующей способности
и статьи -

кости дисперсных молекул
перламутровых солей $(\text{LiBeF}_3)_2$,
 $(\text{LiBeF}_3)_2$ и их фракциониров.