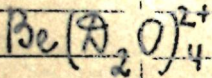
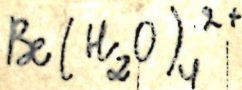


BE-H-O

1969



cur. no. 1.

M-O bond

Vi

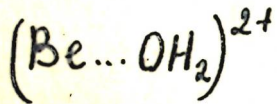
Raman uK-chem

C.A. 1970. 72. 10

49258r Vibrational spectroscopic study of aqua-cations of beryllium, magnesium, aluminum, scandium, and yttrium in crystals and aqueous solutions. Sipachev, V. A.; Grigor'ev, A. I. (Mosk. Gos. Univ. im. Lomonosova, Moscow, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1969, 10(5), 820-4 (Russ). The Raman and ir spectra of $\text{Be}(\text{H}_2\text{O})_4^{2+}$, $\text{Be}(\text{D}_2\text{O})_4^{2+}$, $\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$, $\text{Mg}(\text{D}_2\text{O})_6^{2+}$, $\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6^{3+}$, $\text{Al}(\text{D}_2\text{O})_6^{3+}$, $\text{Y}(\text{H}_2\text{O})_6^{3+}$, $\text{Y}(\text{D}_2\text{O})_6^{3+}$, $\text{ScCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, and $\text{ScCl}_3 \cdot 6\text{D}_2\text{O}$ were investigated and the vibrations of the tetrahedral and octahedral aqua-cations were detd. On the basis of the detd. frequencies of the sym. vibrations, the force consts. of the M-O bonds in the hydrates were calcd. as 2.95, 2.95, 1.85, 1.30, and 1.15 dyne/Å, for M = Be, Al, Sc, Y, and Mg, resp.

Jerzy Kramarz





1971

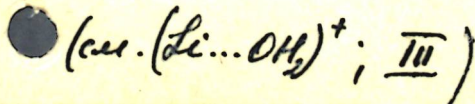
Schuster P., Preuss H. W.

"Chem. Phys. Lett"

1971, 11, № 1, 35-37

рассеяние
э. и др.

иссл. строен. молекул методом
МО ЛКАО. Компир. расчеты гидратации
одноатомных катионов.



BeOH_2

Commun 5880 1974

BeOH_4

Dill J. D.; et al.

Zeitschrift
für anorg.
Chem.

J. Amer. Chem. Soc.

1974, 99, (19), 5159-73

Be. H₂. OHe

ommita 5880

1977

Dill James D. et al

интересная
структура,
энергия рас-
пада ядер

J. Amer. Chem. Soc. 1977,
99, N 19, 6159-6173 (am.)

см. ЛиН-14

Be...OH₂

Mg...OH₂

HBeOHBeH

HMgOHMgH

Кв...сек.
расчет

г. 1981.102

2 Д143. Расчеты неэмпирическим методом молекулярных орбиталей реакций атома бериллия и магния с водой. Ab initio molecular orbital calculations on beryllium and magnesium atom reactions with water. Curtiss L. A., Frurip D. J. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 75, № 1, 69—74 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО исследовано электронное строение комплексов Be...OH₂ (I), Mg...OH₂ (II) и систем HBeOH (III), HMgOH (IV), HBeOBeH (V) и HMgOMgH (VI). Использованы базисы гауссовских ф-ций 6-31ГФ для атомов H и 12s10p, сгруппированный в 4s2p, а также с дополнительным включением поляризационных d-ф-ций для атомов Be, Mg и O. Проведена оптимизация геометрии. Обнаружено, что в I угол связи Be...O с плоскостью H₂O составляет 73°, а расстояние Be...O 3,66 Å. Комплекс

(43)

1



1980

10353

эмпирик

II — плоский (симметрия C_{2v}) с расстоянием $Mg \dots O$ 2,44 Å. Энергии связи для I и II оценены в Δ (в наименьшем базисе) 0,62 и 2,33 ккал/моль, что меньше типичной энергии водородной связи (5—7 ккал/моль) и тем более энергии взаимодействия H_2O с катионами щелочных металлов (5—12 ккал/моль). Геометрия H_2O в I и II меняется мало сравнительно со свободной молекулой. Система III найдена изогнутой, а IV—VI — линейными, однако потенц. кривые для изгиба очень высокие. Энергии связи металла для III и IV найдены равными 78,1 и 18,1 ккал/моль; введение второго атома металла (для V и VI) дает дополнительно примерно такой же выигрыш энергии. Связи O—H в III и IV укорачиваются на 0,01—0,02 Å сравнительно с изолированной молекулой H_2O .

Е. ... Лебедев

10393

1980

Be ... OH₂

Mg ... OH₂

HBeOBeH

HMgOMgH

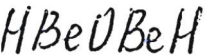
94:7938m Ab initio molecular orbital calculations on beryllium and magnesium atom reactions with water. Curtiss, L. A.; Frurip, D. J. (Chem. Eng. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60515 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 75(1), 69-74 (Eng). Ab initio MO calcs. are reported for Be and Mg atom complexes with water, Be ... OH₂ and Mg ... OH₂, and for species resulting from insertion of the metal atom(s) into the water mol., HBeOH, HMgOH, HBeOBeH, and HMgOMgH.

W

(+3)

кв. мех. фактор

С. А. 1981. 94, 192



кв. мех.
расчет



2.1981.15

5 Б122. Неэмпирические расчеты молекулярных орбиталей для реакций атомов бериллия и магния с водой. Curtiss L. A., Frurip D. J. Ab initio molecular orbital calculations on beryllium and magnesium atom reactions with water. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 75, № 1, 69—74 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах ГФ проведены расчеты комплексов $\text{M} \dots \text{OH}_2$ (I) и молекул HMOH (II) и HMOMH (III) ($\text{M} = \text{Be}, \text{Mg}$). Использованы 2 типа базисных наборов, отличающихся тем, что один из них включал поляризац. d -функции для атомов Be, Mg и O. Из расчетов в базисе с d -функциями следует, что энергия образования (ΔE) комплексов I (< 3 ккал/моль) меньше ΔE типичных H-связей ($\sim 5-7$ ккал/моль) и меньше ΔE у аналогичных комплексов с водой одновалентных катионов ($\sim 5-12$ ккал/моль). Силовая постоянная деф. кол. H_2O в I меньше, чем в свободной воде в согласии с эксперим. данными. Молекулы II и III имеют линейную структуру, но переход к угловой конфигурации связан с очень малыми затратами энергии (< 1 ккал/моль). Энергия образования II для Be (-78 ккал/моль) заметно больше, чем для Mg (-18 ккал/моль). Э. Герман

1980

10393

состав

H Be O Be H оттиска 10393 1980

Curtiss L, et al.

Chem. Phys. Lett. 1980,
45, n1, 69-74.

кв. мех.
расч.

см. Be...OH₂-H

BeH-OH

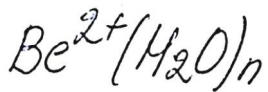
1980

кб. уер.
пач.

Hinde Alan L. et al
J. Comput. Chem., 1980,
1(2), 118-28.



сш. Li-NH₂-III



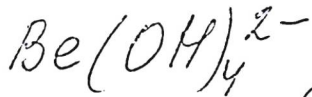
1981

 $n = 1, 2.$ Friedemann R.,
et al.

Zh. Strukt. Khim.

теор.
расчет.1981, 22 (2), 52-56.

●
(сер. $\text{Li}^+(\text{NH}_3)_n$; III)

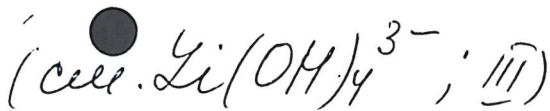


1981

Gupta Abha S.D.K.
et al.

Электрон.
Строение.

Amer. Miner., 1981,
66, N 5-6; 601-609.



Be-OH₂

1982

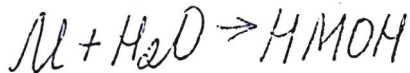
Bentley John.

J. Am. Chem. Soc.

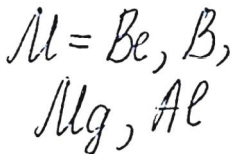
1982; 104 (10), 2754-
- 2759.

моделл.
раствор

(сер. A-OH₂; III)



1982



(Δ_2H) (+12)



C. A. 1982, 96, 22

/ 96: 187607a Theory of metal atom-water interactions and alkali halide dimers. Jordan, Kenneth D.; Kurtz, Henry A. (Dep. Chem., Univ. Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15260 USA). ACS Symp. Ser. 1982, 179 (Met. Bonding Interact. High Temp. Syst. Emphasis Alkali Met.), 377-93 (Eng). The heats of assocn. for $M...OH_2$ and heats of reaction for $M + H_2O \rightarrow HMOH$ (where $M = Be, B, Mg, \text{ and } Al$), the mol. structures of $HALOH$, $HAlNH_2$, $HALF$, $HALSH$, $HBOH$, $HBeOH$, and $HMgOH$, the heats of reaction for $Al + HF \rightarrow HALF$, $Al + NH_3 \rightarrow HAlNH_2$, $Al + MeOH \rightarrow HALOMe$, and $Al + H_2S \rightarrow HALSH$, the charge distribution of $HALOH$, the polarizabilities of $(LiF)_2$, Li_2F^+ , and LiF , and the ionization potentials of LiF and $(LiF)_2$ were obtained in theor. calcns. Comparisons are made with the available exptl. data and other existing calcns. for the present systems and for other related systems and properties.

$(H_3 Be)_3 O^{n+}$ / оттиск 16400 / 1983

снрук-
тура

Cuthbertson, A. F.,
Clidewell Ch.,
J. Mol. Struct., 1983, 92,
N 3-4, Suppl., "Theochem",
9, N 3-4, 353-359.

Be(H₂O)²⁺

1983

14 Б1025. Неэмпирический расчет ионов M(H₂O)₆.
Ab initio MO study of [M(H₂O)₆]ⁿ⁺ ions. Sa-
no Mitsuru, Yamatera Hideo. «Ions and Mol.
Solut. Collect. Invit. Pap. Sess. Lect. and Microsymp.
6 Int. Symp. Solute—Solute—Solvent Interact., Minoo,
4—10 July, 1982». Amsterdam e. a., 1983, 109—116
(англ.)

неэмпирический
расчет

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в сгруппи-
рованном гауссовом базисе проведены расчеты моно-
гидратов M(H₂O)²⁺ (M=Be, Zn, Mg, Ca), а также гек-
сагидратов M(H₂O)₆ⁿ⁺ (M=Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu,
Zn, Mg и Ca для n=2 и M=Cr и Fe для n=3). Гео-

(n) 

х. 1984, 19, N 14

метрия H_2O принята фиксированной в соответствии с эксперим. данными. Варьировались расстояния M—O . В моногидратах вычисленные длины связей M—O увеличиваются при переходе от Be к Ca : 2,956; 3,456; 3,579 и 4,354 ат. ед. Результаты расчетов длин связей и энергий гидратации E_h в гексагидратах сопоставлены с эксперим. данными. Для 2-зарядных комплексов теоретические энергии E_h составляют $\sim 80\%$, а для 3-зарядных 50—65% от соотв. эксперим. значений. Сделан вывод, что вторая и третья гидратные сферы играют важную роль в процессах гидратации. Вычисленные значения длин связей у большинства гексагидратов хорошо согласуются с экспериментальным. Вырожденные E_g -состояния комплексов Cr^{2+} и Cu^{2+} расщеплены, соответственно на $(^5B_{1g} + ^5A_g)$ и $(^2B_{1g} + ^2A_g)$. Показано, что энергии в минимумах термов 2B_g и $^2A_{1g}$ вдоль координаты M—O имеют почти равные значения. Э. Герман

$Be^+(H_2O)$

1983

7 Д121. Исследование ионов $[M(H_2O)_6]^{n+}$ неэмпирическим методом МО. Ab initio MO study of $[M(H_2O)_6]^{n+}$ ions. Sano Mitsuru, Yamatera Hideo. «Ions and Mol. Solut. Collect. Invit. Pap. Sess. Lect. and Microsymp. 6 Int. Solute — Solute — Solvent Interact., Minoo, 4—10 July, 1982». Amsterdam e. a., 1983, 109—116 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с полной оптимизацией геометрии исследовано электронное строение $M^{2+}(H_2O)$, $M=Be, Mg, Ca$ и Zn . Использован базис 4-31ГФ для H_2O и базис Хузинаги для M . Рассчитаны также гексагидраты $[M(H_2O)_6]^{n+}$, $n=2$, $M=Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Mg$ и Ca ; $n=3$, $M=Cr, Fe$. Используются базисы для $11s7p3d$ для переходных металлов, $10s5p$ для Mg , $12s7p$ для Ca , $7s3p$ для O и 4 для H (все сгруппированы в двухэкспонентные). Варьировались только расстояния $M=O$. Принята октаэдрич. структура расположения лигандов (симметрия D_{2d} кро-

расчет
структур

ор. 1984, 18, № 7

ме комплексов Cu^{2+} и Cr^{2+} . Приведены равновесная геометрия, карты электронной плотности, энергетич. характеристики. Отмечено, что при взаимодействии с М длины связей в H_2O увеличиваются, а угол несколько уменьшается. Рассчитанные расстояния М—О (кроме комплекса Cu) хорошо согласуются с эксперим. данными. Ход энергии координации согласуется с эксперим. ходом энергий гидратации (возрастает в ряду Mn , Fe , Co , Ni , Cu), составляя около 80% последних, а для трехвалентных ионов 50—65%, что дает оценку энергии образования первого гидратного слоя. Кратко обсуждены причины искажения структур комплексов Cu и Cr . Библ. 12. В. А. Лебедев.



$M^{n+} - OH_2 \dots OH_2$,
где M^{n+} — катионы
щел.-зем. металлов

1984
Барановский
В. Ч., Сизова О. В.
и др.

расчёт
электр.
структ.

Ж. общ. химии, 1984,
54, N 3, 507-511.

(ссылка на $M^{n+} - OH_2 \dots OH_2$; III)

$\text{Be}^{2+} \cdot \text{H}_2\text{O}$

1984

Hermansson Kersti,
Olovsson Ivar, et al.

ab initio
paccm,
empykmypa
и эл. неомт.
 H_2O

Theor. Chim. Acta
1984, 64(4), 265-76.

(see $\text{Li}^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$; III)



1984

10 Л203. Исследования колебательных спектров щелочных растворов бериллата натрия. Куликова А. В., Копылова Е. А., Коленкова М. А. «Ж. неорганической химии», 1984, 29, № 7, 1684—1686

Изучены ИК- и КР-спектры щелочных бериллатных растворов. В растворах обнаружены аквакомплексные ионы $[\text{Be}(\text{OH}_2)_4]^{2+}$, характеризующиеся полосами 520, 870—900 см^{-1} . Приведены данные в пользу отнесения ИК-полосы в области 700—750 см^{-1} изученных растворов к колебаниям $[\text{Be}(\text{OH})_4]^{2-}$. Резюме

ИК и КР-
спектры

ср. 1984, 18, N 10

Тигрокидос Ве

1984

Ралебиди Н.Т., Абам-
ким Ю.Т., и др.

расчёт
и. н.

ж. Мортан. земли,
1984, 29, N 12, 3009-3013.

(см. Тигрокидос Li ; III)

Be ... OH₂

1985

Civtiss Larvy A.,
Pople John A.

сәйрүкч.,
Vi, меор.
расчәт.

J. Chem. Phys. 1985,
82(9), 4230-5.

(сәйр. Li ... OH₂; I)

H₂O ... Be_n

$$n = 1 \div 5$$

теор. расчет

1985

105: 30407a Theoretical studies of the interaction of water with small clusters of beryllium atoms. Curtiss, L. A.; Pople, J. A. (Chem. Technol. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *Int. J. Quantum Chem., Quantum Chem. Symp.* 1985, 19(Proc. Int. Symp. At., Mol. Solid-State Theory, Scattering Probl., Many Body Phenom., Comput. Quantum Chem., 1985), 613-28 (Eng). Ab-initio MO calcs. were done on the interaction of a water mol. with a cluster of beryllium atoms [Be_n...OH₂, $n = 1-5$]. The dependence of interaction energy and structure on the size of the cluster were investigated with a large basis set including polarization functions. The effects of electron correlation were studied with the Moeller-Plesset perturbation theory. A large increase in the interaction energy from 5 to 23 kcal/mol occurred when the cluster size reached 3 atoms with a decrease in the Be-O distance from 1.7 to 1.64 Å. The dissocn. energy showed no further large changes when the cluster size was increased to 4 and 5 atoms. The H₂O preferred corner binding sites significantly over edge or face sites on the clusters. The nature of the bonding between H₂O and the Be clusters is discussed.

C. A. 1986, 105, N 4

BeOH⁺

[Om. 24/95]

1986

BeOH

Чаркин О. П.,

Зюбина Т. С.

HBeO⁻

тест

Координат. журн.,

Европ. и

1986, 12, N 8, 1011-1037.

Барьер

центр.

НВедМ

№ 24195

1986

расчёт
Еизом. и
дарсвер
изомер.

Чаркин О.П.,
Знобук Т.С.

Координат. ж.л.,
1986, 12, №8, 1011-1037.



H₂O. Be²⁺

(Om. 24344)

1986

Falk M., Elakus H.T.,
et al.,

ab initio
calculations

Spectrochim. Acta,
1986, A42, N 2-3,
175 - 180.

MBeDH [Om. 25254] 1986

Mashimoto K., Osamura Y.,
Iwata S.,

Munrom karaky kaeru,

ab initio
pacem

J. Chem. Soc. Jap., Chem.
and Incl. Chem., 1986, N11,

● 1377-83.

(BeH₂, III)

BeOH^+

1986

Partridge Harry,
Langhoff S.R., et al.

D_0 , μ , ν ,
ab initio
pairwise

J. Chem. Phys. 1986,
84(8), 4489-96.

($\bullet$ BeO^+ ; III)

$\text{Be}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$

1986

4 Д127. Изучение системы $\text{Be}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ с помощью неэмпирических расчетов. A study of the $\text{Be}^{2+} - \text{H}_2\text{O}$ system by means of ab initio calculations. Probst Michael M., Limtrakul Jumras P., Rode Bernd M. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 132, № 4—5, 370—376 (англ.)

Исследовано изменение геометрии H_2O при изменении расстояния $\text{Be}-\text{O}$ в симметрии комплекса C_{2v} . Угол в H_2O увеличивается от $\approx 105^\circ$ в свободной H_2O до $\approx 110^\circ$ при длине связи $\text{O}-\text{H}$ 2,2 Å. Затем угол быстро уменьшается при увеличении отталкивания между Be^{2+} и H . При подходе Be^{2+} со стороны атомов H угол в H_2O быстро увеличивается, а связь $\text{O}-\text{H}$ изменяется слабо. Рассчитаны геометрич. параметры и энергии связей комплексов $\text{Be}^{2+}(\text{H}_2\text{O})_n$ при $n=0-4$. Определены колебательные частоты в комплексах $\text{Be}^{2+}(\text{H}_2\text{O})$ и $\text{Be}^{2+}(\text{H}_2\text{O})_2$. Ион Be^{2+} вызывает сильный сдвиг мод растяжения в сторону меньших волн. чисел, а моды изгиба изменяются мало.

Г. К.

М.А.

ф. 1987, 18, № 4

$\text{Be}^{2+} \cdot \text{H}_2\text{O}$

(Am. 25 482)

1986

106: 108218y A study of the beryllium(2+) ion-water system by means of ab initio calculations. Probst, Michael M.; Limtrakul, Jumras P.; Rode, Bernd M. (Inst. Anorg. Anal. Chem., Univ. Innsbruck, 6020 Innsbruck, Austria). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 132(4-5), 370-6 (Eng). The Be^{2+} - H_2O system was taken as an example to investigate the changes induced in H_2O mols. on coordination. Pronounced changes in H_2O geometry and vibrational frequencies are found. Optimized geometries of Be^{2+} - H_2O complexes are presented.

неопрем.
трасси
спрыска,
д.

C.A. 1987, 106, N 14

BeOH_2

1986

3 Б1074. Структуры и колебательные частоты HBeOH , HBOH , HCOH , HMgOH , HAlOH и HSiOH . Structures and vibrational frequencies of HBeOH , HBOH , HCOH , HMgOH , HAlOH , and HSiOH . Sakai Shogo, Jordan Kenneth D. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 130, № 1—2, 103—110 (англ.)

Методами Хартри—Фока с использованием базисов 3—21 ГФ и 6—31 ГФ* при учете корреляции во втором порядке теории возмущений Мёллера—Плессета определены равновесные геометрич. параметры, частота нормальных колебаний, барьеры изомеризации и энергии диссоциации на $\text{M} + \text{H}_2\text{O}$ для систем HMOH , где $\text{M} = \text{Be}$, B , C , Mg , Al и Si . Силовые постоянные и соотв. частоты определены численным дифференцированием аналитич. градиента. Найдено, что молекула HMgOH являет-

М.П.

(75)

Х. 1987, 19, N 3

ся линейной, молекула HBeOH изогнута в транс-положении (этот результат получается только с базисом 6-31 ГФ*), а для остальных возможны и транс- и цис-изомеры, причем более низкой энергии соответствует транс-форма. Самый низкий барьер изомеризации отмечен для HAlOH : 3,2 ккал/моль. Наличие относительно высокого барьера изомеризации для HSiOH (10 ккал/моль) заставляет по-новому оценить результаты эксперим. спектральных исследований для этой молекулы.

А. В. Немухин

HBeOH

1986

1 Л206. Строение и колебательные частоты HBeOH , HBOH , HCOH , HMgOH , HAlOH и HSiOH . Structures and vibrational frequencies of HBeOH , HBOH , HCOH , HMgOH , HAlOH , and HSiOH . Sakai Shogo, Jordan Kenneth D. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 130, № 1—2, 103—110 (англ.)

Методом самосогласованного поля рассчитаны значения частот колебаний, равновесных длин связей и энергий конформационных переходов в молекулах HMOH (I), где $\text{M}=\text{Be}$, B , C , Mg , Al и Si . Установлено, что равновесная конформация I с $\text{M}=\text{Mg}$ является линейной, а трансизомер I с $\text{M}=\text{Be}$ обладает изогнутым строением. Определены параметры цис- и более устойчивых трансконформаций I с $\text{M}=\text{B}$, C , Al и Si . Сопоставлены величины потенц. барьеров для внутримолекулярных конформационных переходов в I. Предположено, что наблюдаемое различие данных расчета и частот колебаний I в твердых матрицах связаны с неэквивалентностью локальных полей матрично-изолированных I.

И. В. А.

М.П.

75

фр. 1987, 18, N 1

HBeOH

(Dm. 24909)

1986

105: 232662g Structures and vibrational frequencies of beryllium hydride hydroxide, hydroxyborane(2), hydroxymethylene, magnesium hydride hydroxide, aluminum hydride hydroxide, and hydroxysilylene. Sakai, Shogo; Jordan, Kenneth D. (Dep. Chem., Univ. Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15260 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 130(1-2), 103-10 (Eng). The SCF procedure was used to det. the structures, stabilities, and normal-mode frequencies of HBeOH, HBOH, HCOH, HMgOH, HAlOH, and HSiOH. The HMgOH mol. is linear, the HBeOH mol. is trans bent, and the other mol. exist as both cis and trans isomers.

структура,
стабильн.,
Vi, теор.
расчет

HBOH, HCOH, HMgOH,
(75) HAlOH, HSiOH

C. A. 1986, 105, N 26

НБсДН [om. 27020] 1987

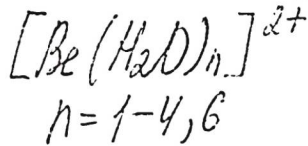
Mashimoto K., Osamura Y.,
et al.,

ab initio
расчет
структур
и спектров
связей.

J. Mol. Struct. Theochem,
1987, 152, N1-2, 101-
-117.

Om. 27597

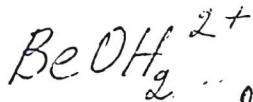
1987



Hashimoto K., Yoda N.,
Iwata S.,

muopem.
pacrum

Chem. Phys., 1987,
116, N2, 193-202



1987

Претьяк В. И.,

Щеголев Б. Ф. и др.

и.п. Пробл. соврем. химии коор-
динат. соед. (Ленинград),
1987, № 1, 74-87.

(см. LiOH_2^+ ; III)

HeBeO

NeBeO

ArBeO

On 30 937

1988

109: 216348m Stabilities and nature of the attractive interactions in HeBeO, NeBeO, and ArBeO and a comparison with analogs NGLiF, NGBN, and NGLiH (NG = He, Ar). A theoretical investigation. Frenking, Gernot; Koch, Wolfram; Gauss, Juergen; Cremer, Dieter (Mol. Res. Inst., Palo Alto, CA 94304 USA). J. Am.

Chem. Soc. 1988, 110(24), 8007-16 (Eng). Results of ab initio calculations are reported for HeBeO (1), NeBeO (2), ArBeO (3), HeLiF (4), ArLiF (5), HeBN (6), ArBN (7), and HeLiH (8). At the MP2/6-31G(d,p) level, the NGBE structures 1-3 are predicted with rather short NG-Be distances, while for 4-8 significantly longer NG-X distances are found. Dissocn. into the resp. noble-gas atom NG and BeO is calcd. at the MP4(SDTQ)/6-311G(2df,2pd) level corrected by zero-point energies and basis set superposition error to be endothermic by 3.1 kcal/mol for 1, 2.2 kcal/mol for 2, and 7.1 kcal/mol for 3. For 4-8, dissociation energies $D_0 \leq 0.1$ kcal/mol are predicted. Interactions of NG with BeO in 1-3 are investigated by anal. of the one-electron d. distribution and compared with

стабильн.

структура

(42)



C.A. 1988, 109, ~24

1) HeLiF, ArLiF
ArLiH, HeLiH
coll. (H. A. 15)

interactions between NG and Be in diat. cations HeBe^{n+} , NeBe^{n+} , and ArBe^{n+} ($n = 1, 2$). The stability of NGBcO can be explained on the basis of relatively strong charge-induced dipole interactions typical of van der Waals complexes. Vibrational frequencies and IR intensities are reported for 1-3 to aid exptl. identification. For HeBeO and HeBN CASSCF geometry optimizations have additionally been performed using the 6-31G(d,p) basis set and a full-valence active space.

2) HeBN , ArBN



He BeO

[Am. 30 967]

1988

Ne BeO

Kobza P., Von Lague Schleyer
P.,

Ar BeO

Collect. Czechosl. Chem.

неприм.
примен

Commun. 1988, 53, N 10,

2230 - ● 2238.

Be²⁺ III OH₂

оч. 30303

1988

Шеварденка С. В.,
Пичуков В. М.

Первые
связи,
и

Ж. Журнал. М.,
1988, ● 29, № 37-42.

$\text{Be}^{2+} - \text{OH}_2, \text{PH}_2$ (om. 28536) 1988

Кв.-хим. Сизова О. В.,
исследов. Барановский В. И.
струк- ИР. Структур. хи-
туры мии, 1988, 29, N 1,
● 168-170.

$\text{Be}^{2+}-\text{H}_2\text{O}$

(DM-32422)

1989

Бутырская Е. В., Шаров-
Мик В. А.,

ВОН Оптика и спектроскопия,
1989, 67, № 1, 42-46.

BeOH_2^{++}

(DM 34/38)

1989

Tamássy-Lentei I.,
Szaniszló J.,

Acta Phys. et Chim. deb-
rec. 1987 (1989), 26, 123-131.

Сверх-
моща
ab initio
расчёт

FSCO Study of the Stabi-
lity of the BeO , BeOH^+
and BeOH_2^{++} systems.

$\text{Re}(\text{OH})_3^-$

1990

Почтовая Т. П.,
Соломонов В. Г.

Молекулярная структура.
Метсвузовский
Сборник научных
трудов. ● Иваново,
1990, стр. 59-71.

и.п.

В (ОН)₂

1990

Поздняя Т. П.,

Соломонов В. П.

Моллеккулярная структура.

М. П.

Методы

сборки молекул

трудов. ● Иваново,

1990, сеп. 59-71.

Вз (ОН)₂

Поздняя Т. П., 1988
Соломонов В. Г.

Строение и св-ва моле-
кул. Менделеевский сб-
ник научных тру-
дов. Иваново, 1988,
сер. 32-41.

BeOH_2^{2+}

1989

Tamassy - Lentei I.,
Stanislo J.

Ac, Do, Re,
pacem

Acta Phys. Chim. De-
brecina 1987 (Pub. 1989)

26, 123-31.

(see BeO, III)



1990

Погребная Т. Т.,
Соломошкин В. Т.

Молекулярная структура.
И. И. Иваново, 1990. с. 59-71.

(св.  LiOH; III)

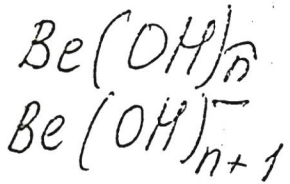
$\text{Be}(\text{OH})_2$

1990

Погребная Л. Л.,
Соломонович В. Г.

м. п. Молекул. структура.
Иваново, 1990. с. 59-71.

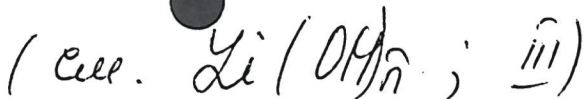
(сост.  LiOH; III)



ссл. посей.,
частоты
корр. коэф.,
расчёт.

1990
Погребная Т. П.,
Соломонов В. Т.

Молекуляр. структура
Иваново, 1990. С.
59-71.



$OBeH_2$

1991

7 Д179. Химический захват молекулярного водорода молекулой BeO . Chemical trapping of molecular hydrogen by BeO / Nicolaidis Cleanthes A., Valtazanos Petros // Chem. Phys. Lett.— 1991.— 176, № 2.— С. 239—241.— Англ.

Методами МК ССП и КВ выполнены расчеты поверхностей потенц. энергии (ППЭ) молекулярных систем $OBeH_2$, $OLiH_2$ и OBH_2 . Найдено, что на ППЭ систем $OLiH_2$ и OBH_2 не имеется минимумов, соответствующих связанным состояниям этих молекул. В то же время для $OBeH_2$ на ППЭ обнаружен локальный минимум, соответствующий связанному комплексу $BeO-H_2$, причем водород остается в молекулярной форме с несколько ослабленной связью. Дано объяснение природы возникновения связанного комплекса $OBeH_2$. Отмечено, что энергия диссоциации такого комплекса равна примерно 1 эВ, и он является нестабильным, поскольку в целом ППЭ $OBeH_2$ имеет сильно выраженный отталкивательный характер.

А. И. К.

М.П.

Д. 2

ф. 1991, № 7

O(BeH)₄

OBeH₆

1991

8 Д182. Электронная структура оксигидридов бериллия / Рыкова Е. А., Клименко Н. М., Григорьев А. И. // Ж. неорганич. химии.— 1991.— 36, № 3.— С. 718—724

В приближениях ССП/3-21ГФ и МПДП выполнены квантовохимич. расчеты оксигидридов бериллия $O(BeH)^{-2}_k + (k=2-4)$, $O(BeH)_4$ и OBe_4H_6 . Исследована природа химич. связи в бериллий-кислородных полиэдрах. Проанализированы погрешности приближения МПДП при описании строения оксосоединений Be.

Резюме

М.А.

ср. 1991, № 8

MOBe^-H_2

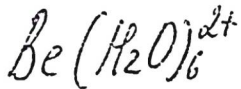
1992

Зюбина Т. С.,
Чаркин О. П.

ab initio
расчет

Ж. Неорган. химии.
1992. 37, № с. 865-
-871.

(ср.  MOBH_2 ; III)



1993

ab initio
param

/ 118: 154973m Organization of water around a beryllium cation. Bock, Charles W.; Glusker, Jenny P. (Dep. Chem., Philadelphia Coll. Text. Sci., Philadelphia, PA 19144 USA). *Inorg. Chem.* 1993, 32(7), 1242-50 (Eng). Ab initio MO calcns. were used to examine the possible structures of hydrated Be^{2+} ions with up to 6 water mols. partitioned between the first and second coordination shells. The potential energy surfaces of $\text{Be}(\text{H}_2\text{O})_4^{2+}$, $\text{Be}(\text{H}_2\text{O})_5^{2+}$, and $\text{Be}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$ have many local min. with different arrangements of the surrounding water mols. In each of these cases, however, the lowest energy configuration has 4 water mols. in the first shell with any remaining water mols. relegated to the second shell, suggesting that the hydration no. of Be^{2+} is indeed 4. Some energetic and geometrical details are shown of how the second shell of water mols. is organized around the tetraaquated Be^{2+} .

C.A. 1993, 118, N16

Be-H₂O

1993

119: 80679s Proton-donor properties of water and ammonia in van der Waals complexes. Beryllium-water and beryllium-ammonia (Be-H₂O and Be-NH₃). Chalasiński, G.; Szczesniak, M. M.; Scheiner, S. (Dep. Chem., Univ. Warsaw, 02-093 Warsaw, Pol.). *J. Chem. Phys.* 1993, 98(9), 7020-8 (Eng). The potential energy surfaces (PES) of Be-H₂O and Be-NH₃ are studied with particular attention to characterization of proton-donor properties of water and ammonia. Calcns. were performed by means of both supermol. and intermol. Moller Plesset perturbation theory. The Be-H₂O PES reveals two van der Waals min.: the C₂ min. (D_e = 176 cm⁻¹, R_e = 6.5 bohr), and the H-bonded min. (D_e = 161 cm⁻¹, R_e = 7.5 bohr), sep'd. by a barrier of 43 cm⁻¹ at the T-shaped configuration. The Be-NH₃ PES reveals only one van der Waals min., at the C₃ configuration (D_e = 260 cm⁻¹, R_e = 6.5 bohr) and a saddle point at the H-bonded geometry. The locations of the min. as well as the anisotropy of the interaction are det'd. by the anisotropy of elec. polarization contributions, embodied by the self-consistent-field (SCF)-deformation and perturbation induction energies.

неметалл. водород,
аммиак.

напараметр,
непр. прелом

(H) ⊗

C. A. 1993, 119, n 8

Be-NH₃

$OBeH_2$

1993

19 Б1038. Гиперповерхность $OBeH_2$. Локальные и глобальный минимумы, переходные состояния и каналы реакции. The $OBeH_2$ hypersurface: Local and global minima, transition states, and reaction paths / Valtazanos Petros, Nicolaides Cleanthes A. // J. Chem. Phys. — 1993. — 98, № 1. — С. 549—554. — Англ.

М.П.

Х. 1994, № 19.

OBeH₂

1993

118: 110107c The beryllium hydride oxide (OBeH₂) hypersurface: local and global minima, transition states, and reaction paths. Valtazanos, Petros; Nicolaides, Cleanthes A. (Theor. Phys. Chem. Inst., Natl. Hell. Res. Found., Athens, Greece 116 35). J. Chem. Phys. 1993, 98(1), 549-54 (Eng). The lowest singlet potential energy surfaces of OBeH₂ and its isomers are calcd., using geometry optimization techniques at the Fermi-Sea-MC-SCF level. The reaction paths going from one isomer to the others are mapped and the appropriate transition states are located and verified. Although the transition from BeO + H₂ to OBeH₂ is virtually barrierless, it can be achieved by an approach of H₂ to BeO from the Be side at right angles only. Should OBeH₂ be formed, the transition to other, energetically lower points on the potential energy surface, involves twisting of the H₂ moiety, thus making subsequent formation of linear H-O-Be-H the only option. The energy release upon this isomerization is 71 kcal/mol, while the activation barrier is 10 kcal/mol.

ПОМНИМ. АД -
РЕПЛИКАЦИЯ

C.A. 1993, 118, N 12

$Be(OH)_{k+1}$

1994

Sliznev V.V.,

Pogrebnya T.P. et.al.

koord. Khim. 1994,

20 (8-9), 641-7.

До, меор.
расчѣт

(ссл. $Zi Cl_{k+1}$; III).

OBe_2H_2
 OBe_3H_4
 OBe_4H_6

1995

124:98223b Theoretical study of structure and stability of oxoberyllhydride complexes OBe_nBeH_2 ($n = 1-3$). Rykova, E. A.; Klimenko, N. M. (Mosk. Gos. Akad. Tonkoi Khim. Tekhnol., Moscow, Russia). *Zh. Neorg. Khim.* 1995, 40(11), 1879-91 (Russ). The mols. OBe_2H_2 , OBe_3H_4 and OBe_4H_6 are stable in respect to mono-mol. decompn. and can exist. Ab initio MP2 calcn. show one structure ($D_{\infty h}$) for OBe_2H_2 , 3 structures for OBe_3H_4 and 10 for OBe_4H_6 ; a discussion is presented on the various isomers of OBe_4H_6 .

теор. расчет
стабильн.
и стр-ры

1996

F: HBeO

P: 3

9B129. [Электронные] {2}'СИГМА'{+}-состояния HBeO, HMgO и HCaO. [Неэмпирическое исследование методом ССП в полном активном пространстве]. The {2}'СИГМА'{+} states of HBeO, HMgO, and HCaO / Kong Jing, Boyd Russell J. // J. Chem. Phys. - 1996. - 104, N 11. - С. 4055-4060. - Англ.

РЖХ 1997

HOBeOH

Am 38345

1896

HBeOH

HBeOBeH

125: 126297v Reactions of Laser Ablated Be Atoms with H_2O : Infrared Spectra and Density Functional Calculations of HOBeOH , HBeOH , and HBeOBeH . Thompson, Craig A.; Andrews, Lester (Department of Chemistry, University of Virginia, Charlottesville, VA 22901 USA). *J. Phys. Chem.* 1996, 100(30), 12214-12221 (Eng). Reactions of laser-ablated Be atoms and H_2O mols. during condensation with excess Ar at 10 K gave 3 new mols. The direct insertion product HBeOH was characterized by matrix IR observation of isotopic frequencies and d.

functional theory calcns. The major product, HOBeOH , was formed by reaction of BeO , from HBeOH decompn., and H_2O . Another product HBeOBeH was formed by the reaction of a 2nd Be atom with HBeOH .

(UK chemist)

C. A. 1996, 125, N 10

HOBeOH

38345 1996

12Б142. Реакции полученных лазерной абляцией атомов Be с H_2O . Инфракрасные спектры и расчеты HOBeOH, HBeOH и HBeOBeH методом функционала плотности. Reactions of laser ablated Be atoms with H_2O : Infrared spectra and density functional calculations of HOBeOH, HBeOH, and HBeOBeH / Thompson Craig A., Andrews Lester // J. Phys. Chem.— 1996 .— 100, № 30 .— С. 12214—12221 .— Англ. Место хранения ГПНТБ

Показано, что с помощью р-ции полученных лазерной абляцией атомов Be с молекулами H_2O при конденсации в избытке аргона при 10К образуются три новые молекулы. Продукт прямого внедрения HBeOH (I), изучен с помощью ИК-спектроскопии и расчетов методом функционала плотности. Основной продукт, HOBeOH, получается при р-ции H_2O с BeO, образовавшимся из I, а HBeOBeH образуется с помощью р-ции второго атома Be с I. В. Л.

М.Л.

X. 1997, N 12

H₂ BeD

(cm. 38662)

1996

Cernot Frenking, Stefan
Dapprich et al,

анрихна,
свсф

Mol. Phys., 1996, 89, N15,
4245-63

Uppok cyste be

1998

Gillespie, R. J.; et al.

(re, 4) Adv. Mol. Struct.
Res. 1998, 4, 1-41.

(all - properties be i III)

O⁻ beta

1998

Knak, Jensen, S.G. et al.,

ab initio
pacem
cmp-M,
CM ab initio.

THEOCHEM 1998, 455(11),
69-76.

(all. O⁻ LiH ●, III)

2000

F: Be4O4H8

P: 3

133:287216 Ab initio study of thermodynamic stability and structure of cage molecules B4N4H8 and Be4O4H8. Minyaev, R. M. Scientific Research Institute of Physical and Organic Chemistry, Rostov State University Rostov-on-Don, Russia J. Struct. Chem., 41(1), 1-10 (English) 2000, Stable mol. structures of heterocubane systems B4N4H8 (2) and Be4O4H8 (3), isoelectronic to the cubane mol., are investigated by ab initio (RHF/6-31G**, MP2(full)/6-31G**, and MP2(full)/6-311++G**) methods and are shown to be highly thermodynamically stable. Decompn. of

structure 2 into two 1,3,2,4-diazadiboroethidine mols. or four iminoborane NBNH mols. is an endothermal process taking 10.1 (RHF/6-31G**), 39.6 (MP2(full)/6-31G**) kcal/mol and 140.6 (RHF/6-31G**), 161.4 (MP2(full)/6-31G**) kcal/mol, resp. Decompn. of structure 3 into two 1,3,2,4-dioxydiberylllothidine mols. or four HBeOH mols. is also an endothermal reaction taking 22.1 (RHF/6-31G**), 39.8 (MP2(full)/6-31G**) kcal/mol and 127.1 (RHF/6-31G**), 155.2 (MP2(full)/6-31G**) kcal/mol, resp. The geometrical characteristics of the simple mols. BeH₂, Be₂, Be₂H₂, Be₂H₄, BeO, and Be₂O₂ are calcd.
