

Be F

~~McF~~
BeH⁺

Datta A.C.

1922

Proc. Roy. Soc., A101, 187

BeF
MgF

аттнск 2453

Jefferys W.

1929

Proc. Roy. Soc. L, A122, 211.

Наблюдения в связи с
поисками спектров BeF и
MgF.

Вейс IV, 33.

Ref.

ommencer 2455

1930

Jenkins F.A.

Phys. Rev. 35, 315.

BeF.

Mulliken

1931.

защитная
конструкция.

Phys. Rev. 38, 836-7.

Образный характер Phys. Rev.
аналогично с no, со + ч. сн.

Визуализация о величине A

$$A(\text{BeF}) = -16.5$$

$$A(\text{Be}) = +2$$

31.68.

ommunen 2469

1933.

BeF

H. Lessheim, R. Samuel

Z. Physik, 1933, 84,
637-56.

Success. 2nd ai. molecules...

BeF

H. Lessheim

R. Samuel

1936

926

(u.n) "Phylosophical Magazine"
1936, 21, ser 7, p 41

BeF

ommu 2478.

1941.

Fowler C.A.

(cncrtp)

Phys. Rev. 1941, 59,
645-52

8

11942

BeF

BeO

N_2^{++}

u gr.

Singh N. L.

Current Science 11, 276-78

Результаты спектроскопических исследований BeO, N_2^{++} , BeF и др.



BeF

Varshni V.P.,
Majumdar K.

1955

Спектроскопическое исследование
мол-т.

Indian J. Phys. Proc.
Indian Assoc. Cultivat.
Sci. 1955, 29 (38), 38: (Cult. SiO) III

BeF_2
Cuepp

BP 2642-IX

1957

Beryllium fluoride spectrum. V. N. Kutyarkin, Sh. I. Peizulaev, and L. N. Tunitskii. *Fiz. Sbornik L'vov. Univ.* 1957, No. 3, 486-9.—A quartz, U-shaped tube with hollow cylinder electrodes was designed for exciting the BeF_2 spectrum. The tube has a trap with active C for the adsorption of gases which are evolved from the electrodes. The spectra have a poorly developed fine structure. In the R_1 and R_2 branches the lines which correspond to the reverse course of the Fortrat parabola are absent, which makes possible the direct location of the beginning of each band and to obtain more precise values for the disocn. energy. The fine structure of the 1.1 band was worked out. The spectra were photographed on a DFS-3 spectrograph with a dispersion of 2 Å./mm. and a resolution of 144,000. BeF_2 was prepd. by the thermal decompn. of $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ in a current of CO_2 . From *Referat. Zhur., Fiz.* 1958, Abstr. No. 23959. J. Rovtar Leach

C.A. 1962.56.1
109g

Вет

139 2642-17

Кутыркин В.Н., Пейзулаев И.И., 1957
Тунисский Л.Н.
Анн. сб. Мировей. ун.-г., 1957, в. 3(2), 486
1.89

Исследование смеси Вет

Разработана газоразрядная трубка для
составления смеси Вет. Показатель
смеси Вет со слабо разветвленной
структурой. В-вектор V_1 и V_2 имеют
сравнительно одинаковый ход на фазе
паритета. В-вектор, что называется

Ртут
358
110, 29955

непосредств. катри начало катодной реакции
" ураново-ванадиевую окисную дисперсию.
Раширирование зонной структуры носов
(1,1) ВЕФ. Спектр фототрадиции
на спектрографе ДФС-3 с дисперсией
20 мкм и разреш. силой 144000.

ВЕФ поглощается путем термич. расщепления
гидрогенида аммония $(\text{NH}_4)_2\text{VEF}_6$ в р-не CO_2 .

Ref

Татевский В.М., Туниский Я.Н. 1958

Ковинов М.М.

529

Дукина и Снегирь, 5, 6.5, 520, 1958

Колебательные нагрузки
и энергия диссоциации молекул

✓ Kyber 'best,

Законова издана наред. структура

Новое $\Lambda^2 \Pi^-$  $\chi^2 \Sigma$ Вет. Кандзено

48 кантов А. Ветвер и 54 новвер канта

есть оптик

CU. 218. B9-82802-11

R_2 и R_1 — концы колеб. Ускорень зкар. колеб.

кас.

	ω_0	$R_{\text{до}}$	$\omega_0 R_{\text{до}}$	$\delta_{\text{вн}}$	$\omega_0 \delta_{\text{вн}}$	$\delta_{\text{вн}}$
$\chi^2 \Pi$	1256,39	1256,5	9,800	9,12	0,02259	—
$A^2 \Pi$	1162,83	1163,8	8,530	8,73	0,00497	—

$$A = -16,46 \quad T_0 = 33187,21$$

Проведена калиб. Интерференция и
дано новое наиболее верное
значение энергии диссоциации BeF
равное $8 \pm 0,5 \text{ эВ}$.

Вс	α	$\Delta_{\text{вн}}$	$\beta \cdot 10^8$	
$\chi^2 \Sigma$	1,478	0,01685	8,209	2,903
$A^2 \Pi$	1,410	0,01610	8,301	1,060

Дз

Вс F

Краев К. I.

1959

ДАНСееЗ, 128, 12, 326, 1459

Расчет энергии мол-а тароенидов
изм.-звн. безамов на основе
попной модели.

IX - 1962 1962
Галогениды много-зам. метанов
(D)

Brackett T.E., Brackett E.B.,
J. Phys. Chem., 1962, 66, 1542 - 1543

10

РЖХ, 1963, 14543

BeF

18 Б380. Энергия диссоциации щелочно-земельных монофторидов. Blue Gary D., Green John W., Ehlert Thomas C., Margrave John L. Dissociation energies of the alkaline earth monofluorides. «Nature» (Engl.), 1963, 199, № 4895, 804—805 (англ.)

1963

D₀

Экспериментально определены и теоретически рассчитаны энергии диссоциации (D) щел.-зем. монофторидов MF (где M=Be, Mg, Ca, Sr, Ba). Равновесия р-ций $M(\text{газ}) + \text{AlF}(\text{газ}) = \text{Al}(\text{газ}) + \text{MF}(\text{газ})$ (1); $M(\text{газ}) + \text{MF}_2(\text{тв.}) = 2\text{MF}(\text{газ})$ (2); $\text{Mg}(\text{газ}) + \text{MgF}_2(\text{газ}) = 2\text{MgF}(\text{газ})$ (3) определены масс-спектрометрич. анализом газов, исходящих из танталовой камеры Кнудсена, содержащей MF_2 и алюминий. MgF^+ образуется как из $\text{MgF}(\text{газ})$, так и из $\text{MgF}_2(\text{газ})$. Исследованием при различных энергиях ионизации определены вклады $\text{MgF}(\text{газ})$ и $\text{MgF}_2(\text{газ})$ в интенсивность MgF^+ . ΔH°_{298} р-ций (1), (2) и (3) рассчитаны с использованием эксперим. значений констант равновесия этих р-ций при различных т-рах и литературных величин функций свобод-

X-1871-IX
BSP-1871-df

2.1964.18

[X]

ных энергий компонентов р-ций. Из значений ΔH°_{298} р-ций (1), (2) и (3) термодинамич. расчетам с использованием литературных данных определены D°_{298} MF. Из р-ций типа (2) для BeF, MgF, CaF, SrF и BaF получены следующие значения D°_{298} соответственно: 6,29; $4,5 \pm 0,04$; $5,41 \pm 0,12$; $5,45 \pm 0,10$; $5,82 \pm 0,10$ эв. Авторы считают, что основное состояние потенциальной кривой молекулы MF должно преимущественно определяться кулоновским притяжением ионов H^{+} и F^{-} . Значения D°_{298} , теоретич. рассчитанные по ионной модели MF, хорошо согласуются с эксперим. величинами.

Ф. Дьячковский



35800 DISSOCIATION ENERGIES OF THE ALKALINE
EARTH MONOFLUORIDES. Gary D. Blue, John W. Green,
Thomas C. Ehlert, and John L. Margrave (Univ. of Wis-
consin, Madison). Nature, 199: 804-5(Aug. 24, 1963).

New results and theoretical calculations are presented
that indicate consistently high dissociation energies for all
the alkaline earth monofluorides. Experimental results
were obtained by utilizing a mass spectrometer to analyze
the vapors from a heated Ta Knudsen cell containing an
alkaline earth fluoride salt with Al present as a reducing
agent. Ionization efficiency curves were obtained and
temperature dependence investigations were made to de-
termine the molecular precursor of the ions observed.

Values of the equilibrium constants at different tempera-
tures were used together with the free-energy functions to
calculate the third law heats of reaction at 298°K. Data are
tabulated for the heats of various reactions for Al-MF₂
systems with M = Mg, Ca, Sr, and Ba, and dissociation
energies of MF molecules by various methods for Be,
Mg, Ca, Sr, and Ba. (C.H.)

BeF

MgF

CaF

SrF

BaF

Do

Sum

1963

1-11

Bep-1871-11

2

NSA-1963-17-21

BeF

Greenbaum M.A., Yates R.F., 3

1963

Azin M.V., Archadi M., Weiler Y.,
Farber M.

J. Phys. Chem., 1963, 67, 703

Термодинамические и физические
свойства Сернистой. Водяного обра-
зования и дитриона BeF.

Найдена величина $\Delta H_{f298}(\text{BeF}_2) = -48,3 \pm 1,5$

$S_{298}(\text{BeF}_2) = 51,1 \pm 1,2 \text{ к. ед.}$

Уменьшая теплоту сублимации Be
на $7,8 \text{ к. ед.}$ и энергию диссоциации $F_2 = 38 \text{ к. ед.}$
сделано расчет

$$D_0 = \Delta H_s(\text{Be}) + \frac{1}{2} D_0(\text{F}_2) - \Delta H_{fd}(\text{BeF}_2) = 145,3 \text{ к. ед.}$$

IX - 1032

1963

Теплотиды шлочно-земельн. элемент
(D_2 , Термодин. ф-ции).

Краснов К.С., Швецов В.И.,
Инст. высш. уч. заведений. Химия
и химич. технология,

1963, 6, №1, 167-170

СА, 1963, 59, №4, 3362 М.Ю. Есть ф.к.

Ref. Rao V. S., 1963
Rao P. T.
спектр
Indian J. Phys. , 1963, 37,
N12, 640.
Спектр излучения $MgCl$: но-
вая дублетная система.
(см. $MgCl$)

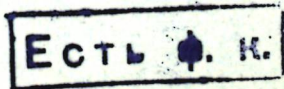
IX 2576 1964
валочн. ирисово-зелен. металл (2)

Зайцев А.А., Краснов К.С.,

до физ. химии, 1964, 38 (3),

8 11-12

ГО



С.А., 1964, 61, №2, 1288с

№ 2251

1965

BeF₂ (P, ΔH₃, ΔH₄, V_e); BeF (D₀)
Hildenbrand D.L., Theor. J. Chem. Phys., 1965, 42, No. 3, 3230-36

Б, М, 10

P. X., 1966, 45686

ссылка

V-5452

1965

BeF, BF (D.)

Hildenbrand D.L.,

NASA Accession N° N55-31318,

Rept. N° A9 467028, Avail. CFSTY,
1965, 89-92

10

BeF

Вар-2629-1^х

1965

Краснов К.С., Карасева Н.Б.

(20)

Оптика и спектроскопия
1965, 19 (1), 30-34.

BeF

1 (чч)

1583 (чч)

1583

ф. 1966

1 Д248. Новый электронный переход молекулы BeF 1965
Rao K. Madhusudana, Rao P. Tiruvengappa.
A new electronic transition in the BeF molecule. «Indian
J. Pure and Appl. Phys.», 1965, 3, № 5, 177—178 (англ.)
В области 4890—6220 Å спектра излучения молекулы
BeF, возбуждаемого ВЧ-разрядом, обнаружена новая
система полос. Приведены волн. числа и интенсивности
(в относит. единицах) кантов 14 полос. Наиболее интен-
сивная полоса $17240,8 \text{ см}^{-1}$ принята за 0—0 полосу.
Проведен колебательный анализ системы. Из величин
колебательных постоянных нижнего состояния следует,
что это состояние совпадает с известным первым возбуж-
денным состоянием молекулы BeF. Колебательные по-
стоянные ω_e и $\omega_e x_e$ верхнего электронного состояния
равны соответственно $1420,1$ и $111,6 \text{ см}^{-1}$. Наиболее ин-
тенсивные полосы — двойные, с расщеплением 21 см^{-1} .
Система относится к переходу $^2\Delta \rightarrow ^2\Pi$. Библ. 6 назв.
С. С.

19

BeF

1390 1583-IX

1965

/ New electronic transition in the BeF molecule. K. Madhusudana Rao and P. Tiruvenganna Rao (Andhra Univ., Waltair). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 3(5), 177-8(1965)(Eng). A new doublet system of bands was observed in the visible region of the emission spectrum of the BeF mol. excited by a high-frequency discharge. The magnitude of the vibrational consts. of the lower state shows that the lower state of the system is the same as the 1st excited state (*A*) of the BeF mol. The consts. of the upper state are 1420.1 and 11.6 cm^{-1} for ω'_1 and $x'_1\omega'_1$, resp.
N. Francis Cerulli

C. A. 1965. 63. 10
12526e

1965

(BeF)

BF

(20)

(u.k.)

(+2)

III

C.A. 1967. 67. 4

15525g Recent thermochemical studies. D. L. Hildenbrand (Aeronutronic, Newport Beach, Calif.). NASA Accession No. N65-31318, Rept. No. AD 467028. Avail. CFSTI \$3.00 cy, 89-92(1965)(Eng). New data on the dissocn. energies of BeF and BF are given, and information about the mol. consts. of the Group IIA dihalides is presented. From *Sci. Tech. Aerospace Rept.* 3(20), 3390(1965). TCSL

☒

BeF₂(gas)

Hildenbrand 1965
Heard L.P.

D₀

" J. Chem. Phys., "

1965, 42, 19, 3230-6

(Calc. BeF₂) I

(Omnick 7467)

1966

Ref

D.L. Hildentrand,

E. Murad

Do, A.

J. Chem. Phys. 1966, 44, 44, 1524

Mass-energy v. difference between
isotopes Ref.

$$M_f(290) = -40.0 \pm 1.5 \text{ kcal/mol.}$$

$$O_o(\text{Ref})_{(2)} = \underline{5.85 \pm 0.1 \text{ eV.}}$$

Can Ref
Beiz
(m. 2000)

M 1636

1966

mod. num., (P₂, PN, SiN, NBr, BaO, BeF, SiF,
no. num. Numbre
Do SnF)

Singh Ran B., Rai D.K.

Indian J. Pure and Appl. Phys., 1966, 4,
N 3, 102-105

Potential curves for some diatomic
molecules, P₂, PN, SiN, NBr, Bao, BeF,
SiF, and SnF

J. F.

PF., 1966, 11D58

DM 1601

BeF⁺

Hastie J.W., Margrave J.L.

Ionization Potentials and Molecule-
Ion Dissociation Energies for Diatomic
Metal Halides.

(cont. previous)

III
—
(see. LiF)

BeF

Bep 336 - IX

1987

u. 17.

44523f Emission spectrum of BeF in the vacuum ultraviolet. M. M. Novikov and L. V. Gurvich. *Opt. Spektrosk.* 23(2), 323-5(1967)(Russ). BeF₂ specimens were placed in the capillary of a high-power discharge tube and their spectra were recorded on film with a vacuum spectrograph with a bent 1200-line/mm. grating. Four systems of bands were recorded in the emission spectrum, ascribed to the radical BeF ($B^2\Sigma-X^2\Sigma^+$ and $C^2\Sigma-X^2\Sigma^+$ transitions). A table is given of BeF mol. consts., with values close to those reported by Rao. Alexandre Fuchs

C. A. 1988. 68. 10

BeF

ВФ 336-IX

1967

4 Б93. . Исследование спектра испускания BeF в вакуумной ультрафиолетовой области. Новиков М. М., Гурвич Л. В. «Оптика и спектроскопия», 1967, 23, № 2, 323—325

В области 1200—2100 Å на спектрографе ДФС-5М получены четыре новые системы полос BeF. В двух системах полос, связанных с периодами $B^2\Sigma - X^2\Sigma$ и $C^2\Sigma - X^2\Sigma$, найдены по 3 группы однокантовых полос, что позволило определить колебательные и вращательные постоянные BeF в $B^2\Sigma$ и $C^2\Sigma$ состояниях: $\nu_\infty = 49572,8$, $\omega_l = 1350,8$, $\omega_l \chi_l = 12,6$, $B_0 = 1,547$; $\nu_\infty = 50419,4$, $\omega_l = 1419,7$, $\omega_l \chi_l = 9,9$, $B_0 = 1,570$, $\alpha = 0,014$. В двух других системах полос получено по одной группе двукантовых полос, на основании чего они были отнесены к переходам $^2\Pi - ^2\Sigma$ ($\nu_{00} = 63915,7$ и $\nu_{00} = 66373,3 \text{ см}^{-1}$).

Автореферат

x. 1968. 4

IX 335

BeF /мол. пост./

1967

Новиков М.М., Гурвич Л.В., Оптика и спектроскопия, 1967, 23, № 2, 313-325

Исследование спектра испускания BeF в ваку-
ушном ультрафиолете.

РФІ9689ІД260

Ю

ВФ-IX-202

1967

BeF

3 Д80. Природа первых возбужденных электронных состояний в BeF. Walker T. E. H., Richards W. G. The nature of the first excited electronic state in BeF. «Proc. Phys. Soc.», 1967, 92, № 2, 285—290 (англ.)

Методом Хартри—Фока вычислена энергия основного уровня $^2\Sigma^+$ и первых возбужденных уровней $^2\Pi_r$ и $^2\Pi_g$ молекулы BeF при различных значениях межъядерного расстояния. Построенные таким образом потенц. кривые использованы при расчете равновесного значения межъядерного расстояния и частоты основного колебания для этих уровней и результаты сопоставлены с опытными данными. Оценены разности энергий корреляции для этих уровней, а также вклад случайных вы-

(8i)

09.1968.30

рождений в энергию корреляции, обусловленный конфигурац. взаимодействием. Показано, что волн. ф-ция возбужденного уровня $^2\Pi$ является линейной комбинацией волн. ф-ций электронных конфигураций ... $1\pi^4 2\pi$ ($\sim 95\%$) и ... $1\pi^3 5\sigma^2$ ($\sim 5\%$). Незначительная доля конфигурации ... $1\pi^3 5\sigma^2$ приводит к малому отрицат. значению постоянной спин-орбитального взаимодействия и обращению уровня $^2\Pi$.

М. Р. Алнев

BeF

BP-IV-202

1984

94188a The nature of the first excited electronic state in BeF. T. E. H. Walker and W. G. Richards (Phys. Chem. Lab., Oxford, Engl.). *Proc. Phys. Soc.* 92(2), 285-90(1967)(Eng). Matrix Hartree-Fock wavefunctions are calcd. for the $^2\Sigma^+$ ground state and excited $^2\Pi$ levels of BeF. The calcs. indicate that the 1st excited $^2\Pi$ state is derived largely from a configuration... $1\pi^4 2\pi$ but that a small contribution of the configuration... $1\pi^3 5\sigma^2$ results in the spin-orbit coupling const. having a small neg. value, the state thus appearing inverted. RCPN

C.A. 1984. 67. 20

BeF

ВР-IV-202

1967

7 Б31. Природа первых возбужденных электронных состояний в BeF. Walker T. E. H., Richards W. G. The nature of the first excited electronic state in BeF. «Proc. Phys. Soc.», 1967, 92, № 2, 285—290 (англ.)

Методом Хартри—Фока вычислена энергия основного уровня $2\Sigma^+$ и первых возбужденных уровней $2\pi_r$ и $2\pi_i$ молекулы BeF при различных значениях межъядерного расстояния. Построенные таким образом потенциальные кривые использованы при расчете равновесного значения межъядерного расстояния и частоты основного колебания для этих уровней и результаты сопоставлены с опытными данными. Оценены разности энергий корреля-

X. 1968. 7

ции для этих уровней, а также вклад случайных вырождений в энергию корреляции, обусловленный конфигурационным взаимодействием. Показано, что волновая функция возбужденного уровня 2π является линейной комбинацией волновых функций электронных конфигураций $1\pi^4 2\pi$ ($\sim 95\%$) и $1\pi^3 5\sigma^2$ ($\sim 5\%$). Незначительная доля конфигурации $1\pi^3 5\sigma^2$ приводит к малому отрицательному значению постоянной спин-орбитального взаимодействия и обращению уровня 2Π . М. Р. Алеев

BeF

Bd-A 1158

-1968

Empedocles P.

cu.
wct.

Theor. chim. Acta 1968,

10(4) 331-6.

BeF

~ 1968

summary 1601

J; No

J.W. Mastie J.I. Margrave.

"Dep. of Chem., Rice

University Houston, Texas 77001.

p I-50.

BeF

89

142-IX

1968

8 Д93. Приведенные потенциальные кривые для основных состояний BeF, CS, SiN, P₂, SiS и GeO. J. e n ç F. Ground state reduced potential curves (RPC) of BeF, CS, SiN, P₂, SiS and GeO. «Spectrochim. acta», 1968, A 24, № 3, 259—264 (англ.)

Приведены рассчитанные из потенц. кривых, полученных из спектральных данных методом Ридберга — Клейна — Риса — Вандерслайка, приведенные потенц. кривые (ППК) для основных состояний BeF, CS, SiN, P₂, SiS и GeO. Полученные ППК подчиняются общим свойствам ППК, обсужденных автором ранее (см. РЖФиз, 1968, 1Д82). Исходя из полученных ППК могут быть определены различные молекулярные константы, изучена адекватность различных межатомных потенциалов, определены эксперим. ошибки и неадиабатич. возмущения и построены потенц. кривые для родственных и расположенных рядом в периодич. системе молекул.

В. Л. Лебедев

оп. 1968. 89

127

BeF

ВФ 142-IX

1968

20 Б29. Приведенные потенциальные кривые (ППК) для BeF, CS, SiN, P₂, SiS и GeO в основном состоянии. Jenč F. Ground state reduced potential curves (RPC) of BeF, CS, SiN, P₂, SiS and GeO. «Spectrochim. acta», 1968, A 24, № 3, 259—264 (англ.)

ППК, вычисленные по методу Ридберга — Клейна — Риса — Вандерслайса, применены для расчета молекул BeF, CS, SiN, P₂, SiS и GeO. Показано, что они удовлетворяют общему правилу, найденному ранее при изучении ППК для других двухатомных молекул. Резюме

2: 1968 - 20

BeF
CS

SiN
P₂

SiS
GeO

Werner, G. M.

(+5mg)

C.A. 1968. 68.18

BSP 142-IX 1968

81553m Ground state reduced potential curves of BeF, CS, SiN, P₂, SiS, and GeO. F. Jenc (Ceskoslov. Akad. Ved, Prague, Czech.). *Spectrochim. Acta, Part A* 24(3), 259-64(1968)(Eng). Ground state reduced potential curves calcd. from the Rydberg-Klein-Rees-Vanderslice potential curves are examd. for BeF, CS, SiN, P₂, SiS, and GeO and found to satisfy the general rule discovered in previous study of reduced potential curves of diatomics. RCSQ

BeF

Katti M. R., Sharma H. D. | 1968

Ind. J. Pure Appl. Phys.,
1968, 6, 458

Symmetry Frank-Kasper

2 - Centroids gel element

3,58

A27- X2 Σ molecule BeF.

BeF

B9p-743-IX

1969

J. Phys. B: At. Mol. Phys.

82533h A $^2\Pi-X^2\Sigma^+$ system of beryllium monofluoride. Walker, T. E. H.; Barrow, Richard F. (Oxford Univ., Oxford, Engl.). *Proc. Phys. Soc., London, At. Mol. Phys.* 1969, [2]2 (1), 102-6 (Eng). The A $^2\Pi-X^2\Sigma^+$ system of BeF has been photographed in absorption at high resolu., and the rotational anal. of the 1-0, 0-0 and 0-1 bands has been completed. The results confirm earlier work that the A $^2\Pi$ state is inverted, although derived mainly from the configuration... $\sigma^2\pi^4\pi$. This conclusion is in agreement with recent M.O. calcns. on BeF, and is to some extent confirmed by other exptl. work on this mol. which is briefly discussed.

RCBS

checkup

A $^2\Pi-X^2\Sigma$

C.A. 1969. 70. 18

ВФ - 743-1X

1969

BeF

8 Д235. Система $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ молекулы BeF. Walker, T. E. H., Barrow R. F. The $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ system of BeF. «J. Phys. (Proc. Phys. Soc.)», 1969, B2, № 1, 102—106 (англ.) *J. Phys. B: Atom and Mol. Phys.*

Вр. анал.,

м. п.

Выполнен анализ вращательной структуры полос 1—0, 0—0 и 0—1 системы $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ в спектре поглощения молекул BeF, полученных в печи Кинга при $t \sim 1700^\circ\text{C}$. Показано, что имеется два набора молекулярных констант, которые воспроизводят наблюдаемый спектр одинаково хорошо как при положительных, так и при отрицательных значениях константы спин-орбитального взаимодействия A . Однако поскольку в обоих случаях постоянные Λ -удвоения p_0 и q_0 имеют противоположные знаки и поскольку при низких значениях J

ф. 1969. 82

происходит изменение знака Λ -удвоения у компоненты F_2 , то $A < 0$. Это означает, что уровни F_2 соответствуют $^2\Pi_{1/2}$, а состояние $^2\Pi$ — обращенное с преобладанием $\dots\pi^4\pi$ -конфигурации. Получены следующие значения констант комбинирующих состояний: в состоянии $XB_e = 1,48893, 10^2 \alpha_e = 1,76, 10^6 D_0 = 8,28 \text{ см}^{-1}, r_e = 1,3609 \text{ \AA}$; в состоянии $AT_{00} = 33187,13, B_0 = 1,41147, 10^6 D_0 = 8,40, A_0 = -16,17 \text{ см}^{-1}$. Приведена сводка основных молекулярных постоянных известных электронных состояний молекулы BeF и обсуждены возможные их конфигурации.

В. И. Байков

BeH
(с.и. на об.)

с.и. иост.

Anderson A. B.,
Parr R. C.

1970

J. Chem. Phys., 1970,
53, ~ 8, 3375.



(с.и. BeH) III

BeF	$\ell_e \cdot 10^5$	$-\ell_e \cdot 10^{13}$	$m_e \times 10^{21}$	$m_e k_e / \ell_e^2$
	3,00(5,77)	20,5(33,0)	121(164)	0,89(0,87)

BeF; MgF (мон. ност; св. мех. протект) 1970
IX 664

Walker T. E. H., Richards W. G.,

Proc. Phys. Soc., London (At. Mol. Phys.),
1970, 3, N^o 2, 271-9 (англ.)

Assignment of molecular orbital
configurations on the basis of
 λ -type doubling.

10

⊕ C

CA, 1970, 72, N14, 72656C

1970

Вет

Walker T.E.H.,
Richards W.G.

и.и.,
спин-орбит.
влиян.

J. Chem. Phys.,
1940, 52, N 3, 1311

(Cis. Bo) III

Вет

Рорки Н. Э.
Хеннекер В. Н.

1971

кв-сек
разреш

J. Chem. Phys.,
1971, 55, 2, 617

(Coll. N_2^+)IV

BeF

1971

53028v Dissociation energies of bismuth and beryllium monofluorides. Rai, Badri; Singh, Jagadish, (Dep. Spectrosc., Banaras Hindu Univ., Varanasi, India). . *Spectrosc. Lett.* 1971, 4(5), 129-37 (Eng). Dissochn. energies 3.2 and 5.85 eV were detd. for BiF and BeF, resp., by fitting the electronegativity potential energy function of S. Szoeke and E. Baitz (1968) to the exptl. potential energy curves of these mols. Ionic character (52.50 and 62.50%) in these mols. is $1/4$ of the difference in electronegativities of the metal and fluorine atoms. Results are compared with literature values.

20

(+1) III

(+2) I

C.A. 1971, 45

8



BeF

Hinkley R.K.
et al.

1972

расчет.

"Mol. Phys"

1972, 24, N 5, 1095-102

"Конеч. спин-орбит. взаимодействие"

● (см BeH; III)

20506.6068

Ch, Ph

BeF; BeF (M. N.)
32253GR

1972
IX 3939

Murty P. Sreenivasa, Rao P. Tiruvenganna.
The electronic spectrum of the BeI radical.
"Proc. Roy. Irish Acad.", 1972, A72, N5,
pp. 71-79, ill.

LO
(англ.)

0614 пик

596

605

605

ВИНИТИ

305 6620

AlBr, BiF, BeF, IO, P₂, O₂⁺(I, E) 1972

Rai S.B., Sharma V.N., Rai D.K.

Can. J. Phys., 1972, 50, N5, 428-430

(annul)

On the validity of Fietz potential functions for diatomic molecules.

Pot. Pub, 1972, 90153

10



BeF

1973

(c.h.)

Anderson, Alfred B.

J.Chem.Phys.

1973, 58(I), 381-3.

• (cur. LiH; III)

$\text{Li}_2; \text{B}_2; \text{C}_2; \text{N}_2; \text{F}_2; \text{O}_2; \text{BN}; \text{BO};$
 $\text{BF}; \text{CN}; \text{CO}; \text{NO}; \text{LiF}; \text{BeO}; \text{BeF}$
 $\text{IX 4402 Naray-Skabo G.,}$

(М.Н., Е.В.)
рассчёт
основного
состояния

Int. J. Quant. Chem., 1973, 7, N3, 569-581
(англ.)

Decoupled Hartree - Fock methods.
II. Calculation of the potential
curves of diatomic molecules.

Proc. Xuv, 1974, 4524

14

10

41110.7842

Ch, TC

29862

BeF

(20)

1974

2667

Farber Milton, Srivastava Rameshwar D.

Dissociation energies of BeF and BeCl and
the heat of formation of BeClF.

"J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1974, Part 1,
70, N 9, 1581-1589 (англ.)

(см. BeF; I)

0229 ДИК

210 211

-221

ВНИТИ

param w. n. (CH, NH⁺, OH, FH⁺, CF, 11975
NO, O₂⁺, BeH, BH⁺, BeF, BO, CN, CO⁺,
N₂⁺, C₂, BH, NH, OH⁺, C₂) IX-5750

Abegg P.W.,

mol. phys, 1975, 30, v2, 575-596 (corr).

Ab initio calculation of spin-orbit
coupling constants for gaussian
lobe one gaussian-type wave func-
tion.

Pu Xu, 1976, 3542

10

20

Be-F

num. 4824

1975

Lerr J. A., et al

Handbook Chem. Phys.,
55th Ed, 1974-75,

(Do)

$MX (we, ze)$ IK 4970 1975

$M = Li, K, Na, Rb, Cs, Ca, Sr. X = F, Cl, Br, I.$

$MX (we, ze)$ OMM. 4210

$M = Mg, Ba. X = F, Cl, Br.$

BeCl, BeF (we, ze).

Suzana S. S. L.

Indian J. Pure Appl. Phys., 1975,
13 (7), 480-2.

Fundamental — vibrational energies in halide molecules.
C. A. 1975, 83 r 18. 154839f. 110 (Φ) 15

BeF

1976

онлайн. УБТАМ

вып. N 8, 1976

вып. илл. Бергман Г.А.,
Енцов Ю. С.

(До
и.и.)

BeF

1976

3 Б14 Деп. Расчеты электронных структур соединений элементов II—IV групп методом Хартри — Фока — Рутана. 2. Таблицы волновых функций, заселенностей и орбитальных энергий радикалов. Боженко К. В., Чаркин О. П., Клименко Н. М. (Редколлегия «Ж. физ. химии АН СССР»). М., 1976. 24 с., библиогр. 9 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 20 окт. 1976 г., № 3687—76 Деп.).

Табулированы волновые функции двухатомных радикалов типа MX ($M=Be, B, C, Al, Mg, Si$; $X=F, Cl, H, O$ и S), рассчитанных методом МО ЛКАО ССП в валентном приближении «замороженных» остовных АО. Расчеты выполнены в sp -базисе лепестковых функций гауссова типа $8s4p$ для атомов 2-го периода и $10s6p$ для атомов 3-го периода. Результаты расчета сопоставлены с имеющимися данными неэмпирич. расчетов выполненных с более полными и сбалансированно расширенными базисными наборами.

Автореферат

Х. 1977. №3

(+29)

17

расшир. н.н (BeH, BeF, BeSe, Co, SiO, 4976
BeH₂, BeHF, BeF₂, BeHSe, BeFSe, BeSe₂,
CO₂, COS, SiO₂) IX-5449

Гаркин С.П., Рабов М.А., Младкович А.К.,
Зайцев Б.Е., Андеев В.И.,
м. структур. химии, 1976, 17, 45, 775-785

О переносимости дисперсионных структур сфер-
ических и квадратной формы в атомов
в изоэлектронных замещенных и не замещенных
цепных рядах лантаноидных соединений. моле-
кулы по данным раск. тов АВ initio.
Рис. Хим., 1974, 7624 40 и рис. 9. (P)

BeF

1976

3 Б18 Деп. Расчеты электронных структур линейных молекул методом МО ЛКАО ССП Рутана. Рябов М. А., Чаркин О. П., Клименко Н. М., Зайцев Б. Е., Молодкин А. К. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1976. 73 с. библиогр. 30 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 20 окт. 1976 г., № 3685—76Деп.).

Для исследования проблемы переносимости электронных структур фрагментов и взаимного влияния лигандов в различных рядах неорг. молекул проведены систематич. расчеты 23 двухатомных и 45 линейных трехатомных молекул и ионов типа MX , MX_2 и MXX , где $M = Be, B, C, Mg, Al$ и Si , X и $X' = F, Cl, N, O$ и S . Расчеты выполнены в рамках метода МО ЛКАО ССП с использованием валентного приближения «заморо-

Х. 1977. № 3

(429)

11

женных» орбитальных АО и базиса лепестковых функций гауссова типа, имитирующего базис Уиттена. Исследован вопрос о возможности сокращения базиса Уиттена без существенной потери в точности. Приведен в явном виде «оптимальный» вариант сокращенного базиса размерностью $8s4p$ и $10s6p$ для атомов 2-го и 3-го периодов, соотв., к-рый сочетает хорошую точность с экономичностью расчетов. Табулированы волновые функции, орбитальные и полные энергии валентных электронов, заселенности АО и заряды на атомах для всех перечисленных систем.

Авторы: рат

BeF

Sekawa W.H. 1976

muon
bos.
chem.

" Int. J. Quantum Chem.
Symp. " 1976, N10, 91-97
(air)

(ex Li^+ ; III)

Be F

1977

22 Б32. Расчеты электронных структур соединений элементов II—IV групп методом Рутана. II. Волновые функции, заселенности и орбитальные энергии радикалов MX. Боженко К. В. «Ж. структур. химии», 1977, 18, № 2, 235—244

расчет
ф-ции

Табулированы волновые ф-ции двухатомных радикалов типа MX ($M = \text{Be, B, C, Al, Mg, Si; X} = \text{F, Cl, H, O}$ и S), рассчитанных методом Хартри—Фока—Рутана в валентном приближении «замороженных основных АО». Расчеты выполнены в *sp*-базисе лепестковых ф-ций гауссова типа размерностью $8s4p$ для атомов 2-го периода и $10s6p$ для атомов 3-го периода. Результаты расчета сравниваются с имеющимися данными расчетов *ab initio*, выполненных с более полными и сбалансированно-расширенными базисными наборами. Сообщ. I см. Ж. структ. химии, 1976, 17, 775. Резюме

Ж. 1977 № 2

(+25) 18

BeF

ommu 5880

1947

Dill James D. et al.

J. Amer. Chem. Soc. 1947,
69, 19, 6159-6173 (am)

структур.
и физ. свойства,
2

с. 114-115

1977

BeF

Краткое
подробное
описание

Harvey M.H.
U.S. NTIS, AD Rep. 1977,
AD-A04324I, 47pp (Eng.)
From Gov. Rep. Announce. Index
(U S) 1977, 77, (22), 2II.

(см. BeO; III)

BeF



II

~~Таблицы значений, полученных
и опубликованы в журнале~~

1977

87: 11951h Calculations of electronic structures of linear molecules by the Roothaan MO LCAO SCF method. Ryabov, M. A.; Charkin, O. P.; Klimenko, N. M.; Zaitsev, B. E.; Molodkin, A. K. (Inst. Nov. Khim. Probl., Moscow, USSR). Zh. Fiz. Khim. 1977, 51(3), 770 (Russ). The wave functions, orbital energies, electron densities, and at. charges for mols. and ions of the type MX, MX₂, and MXX' (M = Be, B, C, Mg, Al, or Si; X = X' = F, Cl, H, O, or S) were calcd. using the Hartree-Fock-k-Roothaan method. V. Reijholec

кв. экз.
пакет

дифракц.

структур

(см. на обороте)

(+57)

23 24 25 26



с.А. 1977 87 12

US 1111

Dep. VINTI 3685-76.
2000/1170

BeF	BF	CF	MgF
BeCl	BCl	CCl	MgCl
BeO	BO	CO	MgO
BeH	BH	CH	MgH
BeS	BS	CS	MgS

AlF	SiF	MX ₂
AlCl	SiCl	
AlO	SiO	X = F, Cl, O, H, S
AlH	SiH	
AlS	SiS	

(+59)

BeF

расчет
ju

76Б43. Дипольные моменты монофторидов щелочноземельных металлов и металлов подгруппы скандия. Соломоник В. Г., Макарова В. М., Краснов К. С. «5-й Всес. симпоз. по химии неорг. фторидов, Днепропетровск, 1978». М., 1978, 263

Вычислены дипольные моменты двухатомных монофторидов MF ($M = Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Sc, Y, La$). Расчеты проведены в рамках ионной модели с использованием равновесных межъядерных расстояний и эффективных дипольных поляризуемостей ионов F^- и M^+ . Дипольные моменты, согласно расчету, равны 3,44 (BeF), 5,09 (MgF), 5,48 (CaF), 6,03 (SrF), 5,80 (BaF), 2,47 (ScF), 3,22 (YF) и 3,75D (LaF). М. М. Гофман



2: 1943, N16

BeF

1978

пометки
поверхн.

9 Б815. Теоретическое исследование коллинеарной реакции $\text{Be} + \text{FH}(v_1) \rightarrow \text{BeF}(v_2) + \text{H}$. Schor H., Chapman S., Green S., Zare R. N. Theoretical study of collinear $\text{Be} + \text{FH}(v_1) \rightarrow \text{BeF}(v_2) + \text{H}$. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 8, 3790—3806 (англ.)

С целью обнаруженной ранее динамич. особенности р-ции $\text{Be} + \text{FH}(v_1) \rightarrow \text{BeF}(v_2) + \text{H}$, заключающейся в преимущественном превращении начального колебательного возбуждения $\text{FH}(v_1)$ в поступательное движение продуктов, рассчитана потенциальная Пв этой системы для линейной конфигурации и проведены траекторные рас-



2. 1979, № 9

четы динамики. После исследования ряда приближений, основанных на методе ЛКАО МО ССП, был принят метод МО со слейтеровскими орбитами, число к-рых превосходило минимальный набор. Конфигурац. ф-ции строились из приближенных натуральных орбиталей, и в методе КВ учитывалось взаимодействие основного состояния с квазивырожденными возбужденными. Рассчитанная Пв хорошо воспроизводит асимптотич. области в каналах и предсказывает экзотермику р-ции 6 ккал/моль (эксперим. значение 2 ккал/моль). Теор. высота барьера составляет около 28 ккал/моль в конфигурации $\text{Be}-\text{F}-\text{H}$ с длинами связей, растянутыми на 0,4 ат. ед. по сравнению с равновесными значениями. Найдено, что вычисленная Пв существенно отличается от Пв ЛЭПС при оптим. определении ее параметров: путь р-ции характеризуется более внезапным поворотом. Исследование динамики р-ции на вычисленной и оптимальной Пв ЛЭПС показывает, что для 1-го случая энергия, необходимая для преодоления барьера, выделяется в виде кинетич. энергии продуктов, тогда как для второго энергия приблизительно равновероятно распределяется между колебаниями $\text{Be}-\text{F}$ и поступательным движением.

Е. Е. Никитин

BeF

расчет
поверхн.
потенц.
энергии

1978

5, 288. Теоретическое исследование коллинеарной реакции $\text{Be} + \text{FH}(v_1) \rightarrow \text{BeF}(v_2) + \text{H}$. Schor Heloiz, Chapman Sally, Green Sheldon, Zare Richard N. Theoretical study of collinear $\text{Be} + \text{FH}(v_1) \rightarrow \text{BeF}(v_2) + \text{H}$. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, 3790—3806 (англ.).

Проведен неэмпирич. расчет поверхности потенц. энергии (ППЭ) реакции $\text{Be} + \text{FH}(v_1) \rightarrow \text{BeF}(v_2) + \text{H}$ и дано детальное обсуждение приближений, примененных при ее расчете. ППЭ получена с использованием волн. ф-ций первого порядка по конфигурационному взаимодействию в базисе слэтеровских атомных волн. ф-ций. По мнению авторов, этот расчет дает возможность качественно описать реакцию. Расчетная экзотермичность реакции — 6 ккал/моль находится в согласии с наиболее точной экспериментальной $2 \div 4$ ккал/моль. Высота барьера согласно расчету составляет 28 ккал/моль. Перевал находится в точке, где межатомные расстояния на 0,4 бора больше асимптотических

9.1979/15

равновесных. С использованием аналитич. аппроксимации для полученной поверхности методом классич. траекторий рассчитаны вероятности реакции для двух колебательных состояний молекулы FH $v_1=0$ и $v_1=1$. Вероятность реакции сильно зависит от начальной кинетической и колебательной энергии. Найдено, что при $v_1=0$ большая часть поступательной энергии столкновения переходит в поступательную энергию продуктов (только 10% энергии переходит в колебательную). Оказалось, что распределение по каналам продуктов также сильно зависит от начальной кинетической и колебательной энергии. Исследование поведения отдельных траекторий дало возможность исследовать особенности потенциала, определяющие динамику реакции. Для сравнения аналогичный расчет произведен с использованием более грубой поверхности ЛЭПС с той же высотой барьера и экзотермичностью. Оказалось, что динамика реакции сильно зависит от деталей ППЭ.

А. И. Шушин

ВсГ

1979.

Боженко К.В.

кв. мех.
расчет

Авторедерам диссерт.
на соискание ученой
степени КХН.

М., ЦОНХ, 1979.



BeF

ommu 8683 1979
OM. N23 (b. n. n. Hildenbrand)
Hildenbrand D.L.

(80)

J. Electrochem. Soc.,
1979, 126(8), 1396-1400

BeF

[Om. 19649]

1979

Richards W. B.,

Private communication,
1979.



BeF

оттиск 10167 1950

6 Б37. Природа состояния $A^2\Pi$ в BeF. Prosser S. J., Richards W. G. The nature of the $A^2\Pi$ state in BeF. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1980, 13, № 14, 2767—2771 (англ.)

Проведены хартри-фоковские расчеты потенциальных кривых основного и нескольких возбужденных состояний молекулы BeF. С использованием полученных данных вычислены константы Λ -удвоения, (p и q) для первого возбужденного состояния $A^2\Pi$. Из расчетов следует, что этому состоянию соответствует конфигурация $1\pi^4 2\pi$, а p и q отрицательны. При равновесном расстоянии примесь конфигурации $1\pi^3 5\sigma^2$ незначительна. Полученные теор. результаты противоречат лит. спектроскопич. анализу перехода $X^2\Sigma^+ (1\pi^4 5\sigma) \leftarrow A^2\Pi$, согласно к-рому p и q имеют разные знаки, что соответствует конфигурации $1\pi^3 5\sigma^2$ для состояния $A^2\Pi$. М. Г.

расчет
потенц.
кривых



α.1981. N6

оттиски 10164

1980

BeF

3 Д153. Природа состояния $A^2\Pi$ в BeF. The nature of the $A^2\Pi$ state in BeF. Prosser S. J., Richards W. G. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1980, 13, № 14, 2767—2771 (англ.)

Для состояния $^2\Pi$ молекулы BeF проведен неэмпирич. расчет постоянных p и q в ф-ле Ван-Флека для величины Λ -удвоения во вращательной структуре полосы $A-X$. Для расчета матричных элементов спин-орбитального взаимодействия различных электронных состояний использовано приближение Хартри-Фока. Колебательные волн. ф-ции получены из кривых Морзе, найденных из эксперим. данных. Рассчитанные постоянные Λ -удвоения BeF имеют один и тот же знак, что противоречит эксперименту. Кроме того, состояние $A^2\Pi$ описывается нормальной регулярной конфигурацией ($\dots 1\pi^4 2\pi$), в то время как эксперим. данные указывают на инверсный характер состояния, который обычно приписывается конфигурации ($\dots 1\pi^3 5\sigma^2$). Авторы статьи не могут объяснить полученных расхождений между экспериментальными и расчетными данными. А. Лементьев

кв. эк.
расчет

ф-1981/13

BeF

01111111 10167

1980

93: 247524w The nature of the $\Lambda^2\Pi$ state in beryllium monofluoride. Prosser, S. J.; Richards, W. G. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, Engl. OX1 3QZ). *J. Phys. B* 1980, 13(14), 2767-71 (Eng). The Λ doubling consts. (p, q) of the $\Lambda^2\Pi$ state of BeF were detd. using ab initio MO calcns. The doubling consts. both have the same sign which suggests a MO configuration with a single unpaired π electron. The results disagree with published analyses of the Λ -X spectrum which give p and q opposite signs, normally assocd. with inverted Π electronic states.

(Λ no cm.
 $\Lambda^2\Pi$ over.)

C. A. 1980, 93 v26

1980

BeF
BeF₂

gug R; et al.

Thes. chim. acte, 1980,
51, n2, 131-44

7. 24. 00. 24,
10. 11. 11.
p. 11. 11.

cu. FH-III

BeF

amuck 10872

1980

Knight L.B., et al.

М. спектр
вращение
кв. мех.
расчет.

J. Chem. Phys., 1980,

73 (9), 4198-4202

Be F

Be H

~~Remark.~~
~~Spin-orbit~~
~~interaction~~



(+1)

92: 206219m Ab initio calculation of spin-orbit coupling constant in diatomic molecules. Trivedi, H. P.; Richards, W. G. (Phys. Chem. Lab., Oxford, Engl. OX1 3QZ). *J. Chem. Phys.* 1980, 72(5), 3438-9 (Eng). Spin-orbit coupling consts. of BeF and several diat. hydrides were ab initio calcd. without making ~~any~~ whatever using the SCF wave function of ~~three~~ three-Fock quality. All 2-center integrals were evaluated either anal. or numerically. A comparison of the results with those obtained by neglecting the 2-center integrals shows that, generally speaking, the inclusion of 2-electron 2-center integrals is accompanied by a decrease in the numerical value of the coupling const. The change is generally small, ranging from ~1% for most 1st and 2nd row hydrides to 13% for BeH. The results lend support to the contention of T.E.H. Walker and W.G. Richards (1970) that core polarization is an important effect which must be taken into account to get satisfactory agreement with expts. for the 2nd row hydrides and the oxides. In fact it seems to be much more important than the inclusion of 2-center integrals, at least for the hydrides, which alters the results only negligibly.

1980

9944

Wm. W. C. W.

CA 1980 92 W 24

BeF

расчет

М.П.

(+17) ☒

сложн
орбитали

ф. 1980
N 11

11 Д86. Нэемпирический расчет константы спин-орбитального взаимодействия в двухатомных молекулах. Ab initio calculation of spin-orbit coupling constant in diatomic molecules. Trivedi H. P., Richards W. G. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 5, 3438—3439 (англ.)

Выполнен расчет константы спин-орбитального взаимодействия для 17 двухатомных молекул гидридов и оксидов элементов 2- и 3-го периодов таблицы Менделеева, а также молекулы BeF с учетом вклада всех двухцентровых интегралов перекрытия волн. ф-ций. Базисный набор ф-ций для построения молекулярных орбиталей состоял из 16 слэтеровских ф-ций для σ -орбиталей и 8 — для π -орбиталей. Волн. ф-ции в приближении ССП вычислялись по программе ALCHEMY. Приведенные значения константы спин-орбитального взаимодействия соответствуют равновесному межъядерному расстоянию. Отмечается небольшое (~неск. %) уменьшение величины искомой константы (обусловленное учетом двухцентровых интегралов перекрытия) в случае молекул гидридов и более заметное (~8%) уменьшение в случае некоторых молекул оксидов. В итоговом выводе, указан относительно более важный учет эффекта поляризации остова для целей сравнения результатов с экспериментом.

А. Радциг

1980

4466

отмечено

BeF

257. 12248

1981

2 Д124. Природа состояния $A^2\Pi$ в BeF: постоянные Λ -удвоения. The nature of the $A^2\Pi$ -state in BeF: Λ -doubling constants. Cooper David L., Prosser Stephen J., Richards W. Graham. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 15, L487—L489 (англ.)

М.П.

Рассчитаны постоянные Λ -удвоения нулевого колебат. уровня (p_0 и q_0) электронного состояния $A^2\Pi$ молекулы BeF с потенц. ф-цией, найденной при решении электронного уравнения методом валентных схем. Полученные значения p_0 и q_0 находятся в согласии с эксперим. значениями. Отмечено, что получаемые ранее сильные расхождения между эксперим. и теоретич. значениями параметров Λ -удвоения состояния $A^2\Pi$ объясняются использованием потенциала, найденного в хартри-фоковском приближении с волн. ф-цией, отвечающей регулярной электронной конфигурации $^2\Pi_r$, в то время как взаимодействие регулярной $^2\Pi_r$ и инверсной $^2\Pi_i$ -конфигураций ведет к необычной форме потенц. кривой электронного состояния $^2\Pi$ молекулы BeF, что необходимо учитывать в расчетах параметров Λ -удвоения.

А. И. Дементьев

ф. 1982, 18, №2

BeF

art. 12248

1981

Λ-υγβοειν.

в $A^2\Pi$ состоянии

95:225788z The nature of the $A^2\Pi$ state in beryllium monofluoride: Λ -doubling constants. Cooper, David L.; Prosser, Stephen J.; Richards, W. Graham (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, Engl. OX1 3QZ). *J. Phys. B* 1981, 14(15), L487-L489 (Eng). The long standing discrepancy between theor. and exptl. interpretations of the nature of the $A^2\Pi$ state in BeF is reexamd. Calcd. and exptl. Λ -doubling consts. are now in good agreement.

C.A. 1981, 95, N26.

BeF

офис 12248

1981

4 Б106. Природа $A^2\Pi$ -состояния BeF. Постоянные Λ -удвоения. Cooper David L., Prosser Stephen J., Richards W. Graham. The nature of the $A^2\Pi$ state in BeF: Λ -doubling constants. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 15, L487—L489 (англ.)

расчет

м.п.

Рассчитаны параметры Λ -удвоения для $A^2\Pi$ -состояния молекулы BeF. Расчет проведен с электронными волновыми ф-циями для состояний $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$ и $B^2\Sigma^+$, найденными методом ССП. Для $A^2\Pi$ -состояния учтено взаимодействие небольшого числа конфигураций. Сравнение с эксперим. данными показывает, что отличие от рассчитанных параметров составляет для q_0 10%, а для P_0 50%. Впервые при расчетах получены правильные знаки параметров Λ -удвоения для молекулы BeF. Отмечено, что для дальнейшего улучшения рассчитанных параметров необходимо более точное описание $A^2\Pi$ -состояния. Б. И. Жилинский

X. 1982, 19, № 4

BeF

ommuch 11912 | 1981.

$2 \Sigma^+$ сост.

2Π сост.

Kuntz P.J; et al.

2Δ сост.

J. Chem. Phys., 1981,

79 (6), 3420-34.



(сир. 077. 11913)

поменя.
кривые
в спектре

(Be + HF $\rightarrow$ BeF + H)

BeF^+

Lomnick 11506

1981

Laurenzi B. J.

papers

(20)

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

BeF

1983

Отчет, Комплексное исследова-
ние термодинамических свойств и мо-
лекулярной структуры, МГУ, Кемерово,
1983 (защита отчета за 1982)
электрон-
структур-
ные расчеты,
потенци-
альные кривые, м.п.

BeF

Омича 11913

1981

BeF⁻

Roach A.C., Kurtz P.J.

улучш. координац.
энергии } взаимодей-
ний между }
уровнями

J. Chem. Phys., 1981,

74 (6), 3435-43.

потенци.

повышается.

всего же

(Be + HF → BeF + H)

(см. стр. 11912)

BeF

Chemex 13562

1982

nomes.
Kruval

96: 149504g Theoretical study of the potential energy curves of the series of diatomic radicals MnX . I. Method and its application to beryllium fluoride (BeF) radical. Montagnani, Raffaele; Riani, Pierluigi; Salvetti, Oriano (Ist. Chim. Quantistica Energ. Mol., CNR, I-56100 Pisa, Italy). *Theor. Chim. Acta* 1982, 60(5), 399-407 (Eng). A method is given for calcg. potential energy curves of some low lying states of the diat. radicals MnX ($Mn = 2nd$ group metal, $X =$ halogen). Because of the electronic structure of these compds., applications to electronic transition lasers can be made. The 1st calcn. regards the most simple example of this series, i.e. the BeF radical. The division of the procedure into sepd. steps allows for better quality of the results.

C.A. 1982, 96, N18

BeF

Оттиск 13562

1982

13 Б24. Теоретическое исследование кривых потенциальной энергии двухатомных радикалов $Me_{11}X$. I. Метод и его применение к радикалу BeF. Montagnani Raffaele, Riani Pierluigi, Salvetti Oriano. Theoretical study of the potential energy curves of the series of diatomic radicals $Me_{11}X$. I. Method and its application to BeF radical. «Theor. chim. acta», 1982, 60, № 5, 399—407 (англ.)

расчет
М.П.

Рассчитаны потенциальные кривые состояний $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Sigma^+$ и $D^2\Sigma^+$ молекулы BeF. Использован расширенный базис Хузинаги из 39 гауссовых орбиталей, позволяющий описать основные и возбужденные состояния атомов Be и F. На 1-м этапе методом ССП рассчитаны диабатич. потенциальные кривые. Затем методом конфигурац. взаимодействия с учетом двух конфигураций, отвечающих пересекающимся кривым диабатич. состояний, получены адиабатич. потенциальные кривые. К полученному результату добавлена корреляц. энергия, вычисленная с помощью метода функционала матрицы плотности.

А. Сафонов

Х. 1982, 19, № 13.

BeF

ДАННИК 13562

1982

7Д54. Теоретическое исследование кривых потенциальной энергии в ряду двухатомных радикалов $Me_{II}X$. I. Метод и его применение к расчету радикала BeF. Theoretical study of the potential energy curves of the series of diatomic radicals $Me_{II}X$. I. Method and its application to BeF radical. Montagnani Raffaele, Riani Pierluigi, Salvetti Oriano. «Theor. chim. acta», 1982, 60, № 5, 399—407 (англ.)

расчет
кривых
потенц.
энергии

Предложена схема проведения неэмпирич. расчетов кривых потенц. энергии (КПЭ) молекул типа $Me_{II}X$ (Me_{II} — металл второй группы, X — галоген), включающая следующие этапы: а) оптимизация базисного набора для всевозможных диссоциационных пределов; б) расчет адиабатических КПЭ многодетерминантным методом ССП, обеспечивающим правильное описание диссоциации; в) удаление пересечений КПЭ путем пересчета окрестностей пересечений методом конфигурационного взаимодействия; г) расчет корреляционной поправки к КПЭ методом функционала матрицы плотности. Разработанная программа реализована для молекулы BeF. Получены КПЭ электронных состояний $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Sigma^+$ и $D^2\Sigma^+$. Обсуждается возможность создания лазерных систем на основе $Me_{II}X$.

А. В. Зайцевский

ф. 1982, 18, к. 7.

Вет⁺

получено 5/II-1982г.
(в печати)

авинитио
расчет.

В.Т. Соломонов,
Методические ЛО ЛКАО
расчету силовых полей и
колебаний. спектрал много-
атомных Неорг. сое-
нук.

BeF

Omnueck 14505

1982

ab initio
~~Ref~~acrem

Kuntz P. F., Schreiber
J. L.,

J. Chem. Phys., 1982,
76, N 2, 4120 - 4129.

BeF

Ommuck 13987

1982

Okwada K.,

Кв. мех.
расчит

J. Chem. Phys., 1982,

76, NS, 2565-2568.



BeF

BeF⁺

1982

Отчет

„Комплексное исследование
термодинам. свойств
и молекулярных консто-
нтных”, ИГУ, Химфак,
1983 (годовой отчет
за 1982г.)

квантово-
механ. рас-
чет

М. И. Колесников,
Электрон.
составитель,
М. И.

BeF

OMMULEX 14031

1982

/ 97: 79215h Bonding in beryllium fluoride and a consequent unusual progression of vibrational spacings. Roach, A. C.; Kuntz, P. J. (Paisley Coll. Technol., Paisley, UK PA1 2BE). *Mol. Phys.* 1982, 45(4), 853-6 (Eng). Bonding in the BeF mol. is discussed in the light of valence-bond calcs. including up to 45 structures in the wave function. A bound ground state is obtained only if Be(2s2p) and Be⁺ configurations are used in addn. to the Be(2s²) configuration in forming the wave function. Down to intermediate bond distances the potential curve is marginally repulsive until an avoided crossing with an upper state causes a sudden change to a strongly attractive behavior. This feature is robust and does not depend on the size of the basis set; it casts doubt on the accuracy of the very long Birge-Sponer extrapolation which is the source of the spectroscopic evidence for the large dissocn. energy of BeF.

seen. check,

No

C.A. 1982, 97, N10

BeF

Оттиск 14031) 1982

20 Б22. Связывание в молекуле BeF и необычная последовательность колебательных интервалов. Roach A. C., Kuntz P. J. Bonding in BeF and a consequent unusual progression of vibrational spacings. «Mol. Phys.», 1982, 45, № 4, 853—856 (англ.)

Рассмотрен характер потенциальных кривых (ПК) состояний $X^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi$ молекулы BeF, рассчитанных методом валентных схем (ВС). Исследована зависимость от базиса ВС формы ПК состояния $X^2\Sigma^+$, к-рое становится связанным лишь при учете конфигураций $Be(2s2p)$ и Be^+ наряду с $Be(2s^2)$. Отмечено, что ПК указанных состояний при больших межъядерных расстояниях являются отталкивательными; в области средн. межъядерных расстояний возникают минимумы, связанные с псевдопересечениями с вышележащими состояниями той же симметрии. Такой характер ПК порождает особенности в положении высших колеба-

расчет
потенциальных
кривых

X. 1982, 19, № 20

тельных уровней, что может привести к большим ошибкам при определении энергии диссоциации D_e из спектроскопич. данных методом экстраполяции Берджа — Шпонер. Показано, что для колебательных уровней, рассчитанных на основании ПК состояния $X^2\Sigma^+$, экстраполяция по 10—30 низшим уровням приводит к завышению D_e на 1,5 эВ. А. Сафонов

BeF

1982

101:158068s Calculation of potential curves of low-lying electronic states of beryllium monofluoride molecules. Safonov, A. A. (USSR). Deposited Doc. 1982, VINITI 3676-83, 322-5 (Russ). Avail. VINITI. The potential curves for electronic states $X^2\Sigma^+$, $(2)^2\Sigma^+$, $(3)^2\Sigma^+$, $(1)^2\Pi$, $(2)^2\Pi$, $(3)^2\Pi$, $^2\Sigma^-$, $^3\Delta$, $(1)^4\Sigma^+$, $(2)^4\Sigma^+$, $(1)^4\Pi$, $(2)^4\Pi$, $^4\Sigma^-$, and $^4\Delta$ of BeF, corresponding to 2 lowest dissocn. limits $\text{Be}(^1S) + \text{F}(^2P)$ and $\text{Be}(^3P) + \text{F}(^2P)$ were calcd. by the CI method by using 2-exponent STO basic sets. The humps obsd. on the potential curves for $(1)^2\Pi$, $(2)^2\Pi$, $(2)^2\Sigma^+$, and $(3)^2\Sigma^+$ states are related to change in configuration with change in internuclear distance.

meop. pacum
best. cocom.

C. A. 1984, 101, N 18

BeF

Ummuck 14268

1982

поверхность
потенц.
энергии,
расчёт

Schreiber J. L., Kuntz
P. J.,

J. Chem. Phys., 1982,
76 (4), 1872-1878.

BeF

Отмеч 14024 1982

21 Б165. Кривые потенциальной энергии и энергии диссоциации двухатомных фторидов элементов IIA группы. Varma M. P., Ishwar N. B., Jha B. L. Potential energy curves and dissociation energy of group IIA diatomic fluorides. «Physica», 1982, BC113, № 2, 244—248 (англ.)

На основе результатов последних спектральных исследований рассчитаны значения $G(v) + T_e$ и поворотных точек $r_{\text{мин}}$, $r_{\text{макс}}$ РКРВ потенциальных кривых след. двухатомных фторидов: BeF — состояния $X^2\Sigma^+$ ($v=0-10$), $A^2\Pi_r$ ($v=0-10$), $C^2\Pi$ ($v=0-10$); MgF — состояния $X^2\Sigma^+$ ($v=0-10$), $A^2\Pi_r$ ($v=0-10$), $B^2\Sigma^+$ ($v=0-10$); CaF — состояния $X^2\Sigma^+$ ($v=0-10$), $A^2\Pi_r$ ($v=0-10$); SrF — состояния $X^2\Sigma^+$ ($v=0-10$), $B^2\Sigma^+$ ($v=0-10$), $F^2\Sigma^+$ ($v=0-10$); BaF — состояния $X^2\Sigma^+$ ($v=0-10$), $A^2\Pi_r$ ($v=0-10$), $B^2\Sigma^+$ ($v=0-10$), $E^2\Sigma^+$ ($v=0-10$). С использованием трехпараметрич. потенциальной функции Липпинкотта, рассчитаны энергии диссоциации указанных молекул в основном электронном состоянии (соотв. 6,02; 4,17; 5,56; 5,37 и 5,62 эВ).

В. М. Ковба

До, пометки
Кривые

44

X. 1982, 19, 121

BeF

Оттиск 14024

1982

9 Д67. Кривые потенциальной энергии — и энергия диссоциации двухатомных фторидов элементов группы IIA. Potential energy curves and dissociation energy of group IIA diatomic fluorides. Varma M. P., Ishwar N. B., Jha B. L. «Physica», 1982, BC113, № 2, 244—248 (англ.).

До, М.П.

На основании эксперим. данных по колебательным уровням энергии в рамках подхода Ридберга — Клейна — Риса — Вандерслайка методом Рао и Венкаташварлу рассчитаны потенц. кривые для наблюдаемых электронных состояний $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi_r$ и $C^2\Pi_r$ BeF; $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi_r$ и $B^2\Sigma^+$ MgF; $X^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi_r$ CaF; $X^2\Sigma^+$, $B^2\Sigma^+$ и $F^2\Sigma^+$ SrF; $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi_r$, $B^2\Sigma^+$, $E^2\Sigma^+$, BaF. С помощью трехпараметрич. потенц. ф-ции Липпингетта получены значения энергий диссоциации, очень хорошо согласующиеся с эксперим. данными. В. Л.

A

(4)

ср. 1982, 18, 49

MgF, CaF,
SrF, BaF

BeF

1982

Оммух 14024

96: 205749e Potential energy curves and dissociation energy of Group IIA diatomic fluorides. Varma, M. P.; Ishwar, N. B.; Jha, B. L. (Dep. Phys. Math., Indian Sch. Mines, Dhanbad,

826004 India). *Physica B+C* (Amsterdam) 1982, 113(2), 244-8 (Eng). Reliable (RKRV) potential energy curves were constructed for different exptl. obsd. electronic states of BeF, MgF, CaF, SrF and BaF mols. from the latest spectroscopic data using the method of Rao and Venkateswarlu (1962). Using a 3-parameters Lippincott potential function the precise values of ground state dissocn. energies of these mols. were obtained. These values are in close agreement with the exptl. results.

номеру.
книжки

74

C. A. 1982, 96, N24.

Dmmuck 14285

1982

BeF

(25+)

Кв. мех.
расчет

Zhu L.H., Murrell F.N.

Chem. Phys. Lett.,
1982, 88, n3, 262-265.

BeF

[Om. 16886]

1983

Farrell Z., Pople J.A.,
et al.

ab initio
pacrēu

J. Phys. Chem., 1983,
87, N1, 79-82.

MX

1983

X-галоген

Kaur A. J., Singh

M-изоморфизм.
лет. Mukhtar, et al.

потенци.

Indian J. Phys.,
1983, B 57, N 5, 334-
-343.

Крив.,

ст. н.

(сер. МН; III)

Ref

[Om. 20049]

1983

Kaer A. J. (Miss), Singh M.,
et al.,

Neop.

Amesbury

Op - 111

Commerz.

Экономи

Indian J. Phys., 1983,
B57, N5, 334-343.

BeF

1983

Montagnani Raffaele,
Riani Pierluigi, et al.

pacrēēē
u. n.,
Ei;

Theor. Chim. Acta,
1983, 64, N1, 13-19.

(see Mg Ce; III)

BeF

1983

Montagnani Raffaele,
Riani Pierluigi et al.

meop.
pacrim. J. Chem. Phys. 1983,
79 (12), 6425-6.

● (ca. Lig; III)

BeF^+
 BeF_3^+

[от. 18437]

1983

Соломонов В.Г.,

ж. Структур. химии,

1983, 24, N1, 29-38.

Be ,
св. пост.,
ab initio
расчет.



BeF

1984

12 ЛЗ49. Колебательное возбуждение триплетных остожно-ионизованных состояний молекулы BeF. Vibrational excitation of triplet core-ionized states of BeF. Canuto Sylvio, Chacon Monique R. «Chem. Phys.», 1984, 87, 1, 17—22 (англ.)

Выполнены ab initio расчеты триплетных состояний молекулы BeF, образующихся при ионизации остожных оболочек Be_{1s} и F_{1s} . Предсказано проявление колебательного возбуждения в ионизованном состоянии, а в результате ионизации оболочки F_{1s} — также диссоциация. Библ. 29. М. Т.

ab initio
расчет
триплетных
состояний

ср. 1984, 18, N 12.

BeF

1984

20 B1021. Колебательное возбуждение триплетных остовно-ионизированных состояний BeF. Vibrational excitation of triplet core-ionized states of BeF. Caputo Sylvio, Chacon Monique R. «Chem. Phys.», 1984, 87, № 1, 17—22 (англ.)

Неограниченным методом Хартри—Фока с использованием базиса гауссовых орбиталей, близкого по качеству к трехэкспонентному, с учетом поляризац. ф-ций, рассчитаны потенциальные кривые остовно-ионизированных триплетных состояний молекулы BeF: ${}^3\text{Be}^*\text{F}$ и ${}^3\text{BeF}^*$ (символ * означает, что от соотв. центра удален 1s-электрон). Найдено, что состоянию ${}^3\text{Be}^*\text{F}$ отвечает потенциальная кривая с минимумом, в то время как система ${}^3\text{BeF}^*$ является несвязанной. Проведены оценки молек. постоянных для ${}^3\text{Be}^*\text{F}$, а также факторов Франка—Кондона для переходов в это состояние ${}^3\text{Be}^*\text{F}$ с низкого колебат. уровня основного состояния.

А. В. Немухин

расчет
М.П.

X. 1984, 19, № 20.

BeF(2)

Om. 19838

1984

Marquardt D.,
Luderitz P., et al.,

M.N.

Spectrochim. Acta,
1984, ● B39, N7,
941-942.

BeF^-

1984

1 Д98. Оптимизация молекулярных орбиталей при расчетах возбужденных состояний методами КВ и МК ССП. Немухин А. В., Степанов Н. Ф. «Теор. и эксперим. химия», 1984, 20, № 2, 153—157

Особенности расчета возбужденных состояний методом МК ССП рассмотрены на примере молекулярных систем BeF^- и MgH_2^+ .

расчет воз-
бужденных
состояний

④ ⊠

ф. 1985, 18, N1.

BeF

1984

20 Б1030. Оптимизация молекулярных орбиталей при расчетах возбужденных состояний методами КВ и МК ССП. Немухин А. В., Степанов Н. Ф. «Теор. и эксперим. химия», 1984, 20, № 2, 153—157

На примере систем BeF и MgH_2^+ проиллюстрированы особенности неэмпирич. расчетов энергии возбужденных электронных состояний с использованием многоконфигурац. (МК) волновых ф-ций. Для BeF сопоставлены результаты вычислений энергии первых трех состояний симметрии $^2\Sigma^+$ при межъядерном расстоянии, близком к равновесному для основного состояния. Рассмотрены варианты метода конфигурац. взаимодействия (КВ) с использованием МО, оптимизированных либо в приближении ССП, либо МК ССП. Для коллинеарной системы MgH_2^+ исследована область псевдопересечения потенциальных Пв 2-го и 3-го состояний симметрии $^2\Sigma^+$, что важно при теорет. анализе р-ции перезарядки $Mg(^1S) + H_2^+(^2\Sigma_g^+) \rightarrow Mg^+(^2S) + H_2(^3\Sigma_u)$. Для оценок энергии

расчет ϵ_i ,

и.п.

(41)
X

X. 1984, 19, N 20

высших корней векового ур-ния (2-го и 3-го) в методе МК ССП использована техника усреднения по состояниям. Отмечено, что в схеме МК ССП необходимо включать в активное пространство МО лишь те орбитали, к-рые достаточно хорошо заселены в рассматриваемых состояниях, в противном случае ограниченное КВ с оптимизированными т. обр. орбиталями может приводить к неразумным оценкам молек. свойств.

А. В. Немухин

BeF

1984

101: 198374v Optimization of molecular orbitals in calculations of excited states using the configuration interaction and MC SCF methods. Niemukhin, A. V.; Stepanov, N. F. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Teor. Eksp. Khim.* 1984, 20(2), 153-7 (Russ). The excited states ($^2\Sigma^+$) of BeF and MgH_2^+ were calcd. by the CI method with optimization of MO by the HF and MC SCF approxns. The use of averaging over states technique within the 2nd-order MC SCF procedure (complete active space SCF) with a correct choice of active MO, allows to obtain solns. with reasonable ests. for properties of excited states.

Поиск
состояний,
непр. парем

MgH_2^+

C. A. 1984, 101, N 22

BeF

(DM- 20 018)

1984

21502

Partridge H., Bauschlicher

Ch. W., et al.,

Do;

Langhoff S. R.

Chem. Phys. Lett., 1984,

103, N5, 446-449,

BeF

Langhoff S. R., 1985
Bauschlicher Ch. W., et al.

Comp. Ab Initio Quant. Chem.

Exp. Small Mol. State Art.

u. n. proc. Symp, Philadelphia,

Pa, 27-29 Aug., 1984. Dor-

recht e. a., 1985, 357-

-407. (Cur. Li F; III)

BeF

От 22436 1985

3 Д146. Спин-орбитальное расщепление состояний $A^2\Pi$ и $D^2\Pi$ молекулы BeF в неэмпирических расчетах методом НИК КВ. Spin-orbit splitting of the $A^2\Pi$ and $D^2\Pi$ states of BeF by ab initio MRD CI calculations. Marian C. M. «Chem. Phys.», 1985, 100, № 1, 13—19 (англ.)

Определены константы спин-орбитального расщепления вибронных уровней состояний $A^2\Pi$ молекулы BeF с использованием неэмпирич. метода КВ, включающего набор исходных конфигураций (НИК) в двухэкспонентном (плюс поляризация) базисе сгруппированных гауссовых ф-ций, дополненном диффузными ф-циями s- и p-типа как для Be, так и для F. Рассчитаны константы

м.п., потенц.
крив.

ср. 1986, 18, №3

спин-орбитального взаимодействия для экспериментально неизвестного состояния $D^2\Pi$ и определена электродная структура трех низших $^2\Sigma^+$ -состояний ($X^2\Sigma^+$, $B^2\Sigma^+$ и $C^2\Sigma^+$). В случае 2-го и 4-го возбужденных состояний $B^2\Sigma^+$ и $D^2\Pi$ на потенц. кривых получены двойные минимумы.

Н. В. В.

BeF

(Om 22436)

1985

103: ~~223352v~~ Spin-orbit splitting of the $A^2\Pi$ and $D^2\Pi$ states of beryllium fluoride (BeF) by ab initio MRD CI calculations.

Marian, C. M. (Lehrstuhl Theor. Chem., Univ. Bonn, D-5300 Bonn, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1985, 100(1), 13-19 (Eng). The electronic structure and energetics of the $X^2\Sigma^+$ ground state and several excited states of BeF were investigated by means of the multiref. double excitations CI method using a GTO DZP AO basis set. The potential curves are characterized by avoided crossings between bound ionic and repulsive covalent configurations leading to double min. potentials in case of the 2nd and 4th excited states, $B^2\Sigma^+$ and $D^2\Pi$. Concerning the 1st-order spin-orbit splitting of the $A^2\Pi$ state, the choice of 1-particle functions is essential for a proper description of the highly ionic charge distribution. By using parent natural orbitals, the calcd. spin-orbit splitting $A_0 = 21.2 \text{ cm}^{-1}$ is in excellent agreement with expl. results.

спи-орбит
расщепл.

$A^2\Pi$ и $D^2\Pi$ состоят

C.A. 1985, 103, N 26

BeF

DM 22436

1985

6 B1031. Спин-орбитальное расщепление состояний $A^2\Pi$ и $D^2\Pi$ молекулы BeF, рассчитанное неэмпирическим методом конфигурационного взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями [KB НИК] Spin-orbit splitting of the $A^2\Pi$ and $D^2\Pi$ states of BeF by ab initio MRD CI calculations. Marian C. M. «Chem. Phys.», 1985, 100, № 1, 13—19 (англ.)

Рассчитаны потенциальные кривые электронных состояний $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Sigma^+$ и $D^2\Pi$ молекулы BeF. Использован базис сгруппированных гауссовых ф-ций Хузинаги-Даннинга, дополненный диффузными s- и p-ф-циями на Be, 3s- и 3p-ф-циями на F и поляризац. s- и p-ф-циями на связи. Расчет проведен методом KB НИК с отбором конфигураций и экстраполяцией к полному набору одно- и двукратных возбуждений. Отмечены многочисленные псевдопересечения потенциальных кривых одинаковой симметрии; состояния $B_2\Sigma^+$ и $D^2\Pi$ имеют по 2 минимума. Полученные спектроскопич. постоянные согласуются с эксперим. данными.

А. А. Сафонов

расчет м.п.,
потенц. крив.

Х. 1986, 19, № 6.

BeF

1985

11 Б1146. Энергии диссоциации связей и порядки связей двухатомных галогенидов щелочноземельных металлов. Bond dissociation energies and bond orders of diatomic alkali-earth halides. Reddy R. R., Reddy A. S. R., Deddy Krishna V. «Can J. Chem.», 1985, 63, № 11, 3174—3176 (англ.; рез. фр.)

Для оценки энергий диссоциации двухатомных молекул MX ($\text{M} = \text{Be}, \text{Mg}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$; $\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) предложены эмпирич. выражения $D_{AB} = \bar{D}_{AB} + 31,973e^{0,363\Delta x}$ и $D_{AB} = \bar{D}_{AB} [1 - 0,2075R_e(\Delta x)] + 52,29\Delta x$, где $\bar{D}_{AB} = (D_{AA} \cdot D_{BB})^{1/2}$, $\Delta x = X_A - X_B$ — разница в электроотрицательностях элементов по Полингу. По известным спектроскопич. постоянным вычислены порядки связей $q = 1,5783 \cdot 10^{-3} (\omega_e^2 R_e / B_e)^{1/2}$. Результаты сопоставлены с данными др. методов оценок D и q . В. М. Ковба

No, оценка

(49) Δ

X. 1986, 19, N 11 BeCl, BeBr, BeI,
MgF, MgCl, MgBr, MgI,

CaF , CaCl , CaBr , CaI , SrF ,
 SrCl , SrBr , SrI , BaF , BaCl , BaBr , BaI



BeF⁻

(Im 22149) 1985

Сафронов А.А., Крустов

В.Ф. в гр.

м.п.

ЖЕ. Меорган. Змеев,
1985, 59, N8, 1970-1973.

●
(ссыл. BeF; III)

BeF⁺

Дм 22/49 1985

Сафронов А. А., Круентов
В. Ф. и др.

и. п.

Ж. физ. химии, 1985,
59, N 8, 1970-1973.

●
(сер. BeF; III)

BeF

Om 22149

1985

24 Б1010. Расчет потенциальных кривых низколежащих электронных состояний молекулы BeF. Сафонов А. А., Хрустов В. Ф., Степанов Н. Ф. «Ж. физ. химии», 1985, 59, № 8, 1970—1973

Методом конфигурац. взаимодействия в двухэкспонентном базисе слейтеровских орбиталей рассчитаны потенциальные кривые 14 низколежащих электронных состояний молекулы BeF и основных состояний ионов BeF⁺ и BeF⁻. Определены основные спектроскопич. постоянные.

Резюме

М.П.

(42) ☒

X. 1985, 19, N 24

BeF

1985

Om 22/49

миллион бод.
состояние,
Te, меоп. рас-
реш.

183895h Calculation of the potential curves for the low-lying electronic states in a beryllium fluoride (BeF) molecule. Safonov, A. A.; Khrustov, V. F.; Stepanov, N. F. (Khim. Fak., Mosk. Univ., Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1985, 59(8), 2570-3 (Russ). The potential curves of 14 low-lying energy levels of BeF and of the ground state of BeF⁺ and BeF⁻ were calcd. by the CI method by using double- ζ STO basis set. The basic spectroscopic consts. of all 3 mol. species were detd. The results were compared with available exptl. data.

C.A. 1985, 193, N22

BeF

(Om 22149)

1985

12 Д76. Расчет потенциальных кривых низколежащих электронных состояний молекулы BeF. Сафонов А. А., Хрустов В. Ф., Степанов Н. Ф. «Ж. физ. химии», 1985, 59, № 8, 1970—1973

Методом конфигурац. взаимодействия в двухэкспонентном базисе слэтеровских орбиталей рассчитаны потенц. кривые 14 низколежащих электронных состояний молекулы BeF и основных состояний ионов BeF⁺ и BeF⁻. Определены основные спектроскопич. постоянные.

Резюме

М.П.

ф. 1985, 18, N 12

(+2) ☒

B2F

[Am. 22 149]

1985

раств.
ломехиз
Кристалл
Низкоелектр.
Электрон.
со стирки.

Саромов А.А., Христов В.
и др.,

21. Физ. химии, 1985,
59, N 8, 1970-1973.

Ref

[Om. 23806]

1986

Langhoff S.R., Baersch-
licher Ch.W., Jr., et al.,

Do, pac-
rem.

J. Chem. Phys., 1986,
84, N3, 1687-1695.

BeF

1986

11 Д291. Теоретическое исследование дипольных моментов некоторых галогенидов щелочно-земельных металлов. Theoretical study of the dipole moments of selected alkaline-earth halides. Langhoff Stephen R., Bauschlicher Charles W., Jr., Partridge Harry, Ahlrichs Reinhart. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 9, 5025—5031 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Рассчитаны дипольные моменты и их производные для основных $X^2\Sigma^+$ состояний BeF (1,086 ед. Дебая, по СПФ), BeCl (0,796), MgF (3,077), MgCl (3,382), CaF (3,060, эксперим. значение 3,07), CaCl (4,192; 4,265 + +0,02 и 3,66), SrF (3,199; 3,4676), а для сравнения также и для $X^1\Sigma^+$ состояния KCl (10,279; 10,2384): Использовался неэмпирич. метод ССП МО ЛКАО с учетом взаимодействия одно- и двухкратно возбужденных конфигураций, а также с учетом корреляции электронов методом связанного парного функционала (СПФ). Применялся большой базис слэтеровских ф-ций, включаю-

76



сб. 1986, 18, № 11

щий поляризационные ф-ции до f -типа, дающий по проведенным оценкам близкие к предельным значения полных энергий и дипольных моментов. Данные расчетов по СПФ заметно лучше согласуются с экспериментом, чем данные расчетов по ССП и ССП с учетом конфигурац. взаимодействия, что, видимо, обусловлено необходимостью учета высших возбужденных состояний. Приведены также равновесные длины связей и колебательные частоты и обсуждена природа химич. связи. Библ. 35. В. Л. Лебедев

BeF

1986
№21 Б1038. Теоретическое исследование дипольных моментов некоторых галогенидов щелочноземельных металлов. Theoretical study of the dipole moments of selected alkaline-earth halides. Langhoff S. R., Bauerschlicher C. W., Partridge H., Ahlrichs R. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 9, 5025—5031 (англ.).

С использованием неэмпирич. методов ССП, учета конфигурац. взаимодействия с простыми и двойными возбуждениями и в приближении функционала взаимодействующих пар вычислены дипольные моменты (μ_e) и их пр-ные $(\partial\mu/\partial r)_{r_e}$ (r_e — равновесное межъядерное расстояние) для молекул BeF, BeCl, MgF, MgCl, CaF, CaCl и SrF в основном состоянии $X^2\Sigma^+$. Результаты сопоставлены с аналогичными данными для KCl. В расчетах принимались во внимание 8 валентных электронов галогенидов-ионов и электроны в n - и $(n-1)$ -оболочках ионов металлов. Последний метод дает лучшее согласие с эксперим. данными, чем остальные, что означает необходимость учета более высоких, чем двойные, возбуждений при расчетах поляризации открытой валентной оболочки металла отрицат. галогенид-ионами.

Л. А. Корытко

(М.П.)

(76) ☒

X. 1986, 19, № 21

BeF^+

(DM 23732) 1986

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

D_0 , v.n.,
ab initio
pariem

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

●
(cur. BeO^+ ; III)

BeF

1986

Thakkar Ajit J.,
Sharma B. S., et al.

revis.
ck 836

J. Chem. Phys. 1986,
85(5), 2845-9.

(Cep.  Li₂; III)

BeF

[Om. 30505]

1988

Davis J. L.,

Mcopem.
Kacem

J. Chem. Phys. 1988, 89,
N.3, 1656 - 1663.

Model
and

● polarizabilities
multipoles for ionic

compounds. Alkaline- earth
monohalides.

BeF

Om 32865

1989

111:240232f A theoretical study of the beryllium fluoride (BeF) molecule in the $X^2\Sigma^+$ state. Machado, Francisco B. C., Ornellas, Fernando R. (Inst. Estud. Avancados, Cent. Tec. Aeroespacial, Sao Jose dos Campos, Brazil). *Mol. Phys.* 1989, 67(5), 1129-40 (Eng). A potential energy curve and a dipole moment function are computed for the $X^2\Sigma^+$ state of the BeF mol. using the multi-ref. single and doubles CI approach. Vibrationally averaged dipole moments, radiative transition probabilities and radiative lifetimes are reported for several vibrational levels and selected rotational levels together with the corresponding spectroscopic consts. Agreement of the vibrational spacing with the available exptl. ones is 15 cm^{-1} on the av. A value of 5.92 eV is also obtained for the dissocn. energy D_0 .

($X^2\Sigma$)

pacrem

C.A. 1989, 111, N 26

Be F⁻

1990

Мусаев Д. Т., Яковсон В. В.
и др.

М. П. Молекулярная структура.
(обзор) Уварово, 1990. с. 18-24.

(См. ● CN⁻; III)

BeF
BeF⁺

DM 36989

1992

118: 67230y A theoretical study of beryllium fluoride and fluoroberyllium(1+) (BeF and BeF⁺) in their lowest-lying electronic states. Ornellas, F. R.; Machado, F. B. C.; Roberto-Neto, O. (Inst. Quim., Univ. Sao Paulo, 01493 Sao Paulo, Brazil). *Mol. Phys.* 1992, 77(6), 1169-85 (Eng). The two lowest-lying electronic states of BeF and the four lowest-lying electronic states of BeF⁺ were described theor. by using the MRSI-CI approach. This description included calcn. of the potential energy curves, disocn. energies, vibrational energies, dipole and transition moment functions, averaged dipole moments, radiative transition probabilities and lifetimes, and a whole set of spectroscopic consts. The quality of the results can be assessed, for example, from the computed vibrational spacings, for which the present values differed by no more than 9 cm⁻¹ from the exptl. data. Of the four states of BeF⁺ here described for the first time, the ground state showed a very deep well; the next two states were very weakly bound, and the fourth state was a repulsive one.

Мелануе
Зеленый
Состояние

C.A. 1993, 118, N8

BeF²⁺

1993

120: 62900y Predicting thermodynamic stability of diatomic dications: a case study of beryllium fluoride dication (BeF²⁺). Kolbuzewski, Marcin; Wright, James S. (Dep. Chem., Carleton Univ., Ottawa, ON Can. K1S 6B6). *Can. J. Chem.* 1993, 71(10), 1562-9 (Eng). General criteria are discussed for the prediction of thermodynamically stable diat. dications (i.e., cations of 2+ charge). For a diat. AB²⁺, the most useful quantity for this purpose is Δ , the difference in energy between the attractive channel with asymptote A + B²⁺ and the repulsive channel with asymptote A⁺ and B⁺. Excluding noble gas compds. and by using this measure, diat. dications that may be thermodynamically stable include BeF²⁺, MgO²⁺, MgF²⁺, MgCl²⁺, and SiF²⁺, as well as several other less likely combinations. The dication BeF²⁺ was selected for further anal. Ab initio calcs. show that the X² Π state of this ion is thermodynamically stable by 1.08 eV and undergoes an avoided crossing that causes the effective dissociation energy to be 2.07 eV. The excited state A² Σ^+ is also very low-lying and predicted to be long-lived. The X² Π -A² Σ^+ band system is elec. dipole allowed but very weak in intensity. Possible mechanism of formation of BeF²⁺ are discussed.

смагнати,
очитати и реф.
состав

с. А. 1994, 120, N 6

BeF²⁺

1993

119: 146869n A theoretical description of the ionic species fluoroberyllium (BeF²⁺). Ornellas, Fernando R.; Machado, Francisco B. C. (Inst. Quim., Univ. Sao Paulo, 01498-970 Sao Paulo, Brazil). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1993, 26(13), 1993-2003 (Eng). The six lowest-lying electronic states of the dication BeF²⁺ are described theor. using the multi-ref. single and double excitations CI approach. This description includes the calcul. of potential energy curves, dissoci. energies, vibrational energies, dipole and transition moment functions, radiative transition probabilities and lifetimes and a whole set of spectroscopic consta. The results can be expected to have the same quality as previous calcula. on BeF and BeF⁺. Only the ground state shows a moderately deep well; another one is very weakly bound and the others are repulsive. The binding can be attributed to a charge polarization interaction involving Be²⁺ and F and is strengthened by the strong π -electron donor character of fluorine. This system is more strongly bound than BeH²⁺.

6 квант.
электрон. сост.,
теор. расч.

C. A. 1993, 119, N 14

FBe

(DM: 37773)

1994

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

25+
D.
Женерулики,
меорем.
панем

J. Phys. Chem., 1994,
98, N 40, 9981-9994

BeF

1995

Su, Leri,
et al., Deakyme, C.A.,

(2)

Nuli Huaxue Xuebao
1995, 11(10), 865-9

(all. BeF; I)

BeF

1995

123: 182221m The UV spectrum of BeF. Tai, G; Verma, R. D. (Department Physics, University New Brunswick, Fredericton, NB Can. E3B 5A3). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 173(1), 1-7 (Eng). A strong emission source of BeF spectra was developed and the $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ and $C^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ band systems in the region 190-210 nm were photographed at high resolu. The 0-0, 1-0, 2-1, and 3-2 bands of the $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ system and the 0-0, 1-0, 2-1, 2-2, and 3-2 bands of the $C^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ system and the 0-0, 1-0, 1-1, 2-1, 2-2, and 3-2 bands of the $C^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ system were rotationally analyzed and improved mol. consts. are presented.

yop

 $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ $C^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ C-A. 1995, 123, 14 14

BeF

1996

Ki, Xiangzhi;
Paldus, Josef

meapem.
+ a cem
mekmion.
co smoch.

J. Chem. Phys., 1996,
104 (23), 9555-62

2000

F: BeF

P: 3

133:64286 A comparison of finite basis set and
finite difference Hartree- calculations for the open-
shell (X2.SIGMA.+) molecules BeF, MgF, CaF, and

Kobus, J.; Moncrieff, D.; Wilson, S. Instytut
Fizyki, Uniwersytet Mikolaja Kopernika Torun 87-
100, Pol. Mol. Phys., 98(7), 401-407 (English) 2000

A comparison is made of the accuracy with which
the total electronic energy can be calcd. by using
either the finite basis set approach (the algebraic
approxn.) or finite difference methods in calcns.

employing the model for the open-shell ground (X2.SIGMA.+) states of the Group IIA fluo BeF, MgF, CaF, and SrF. The convergence of the calcns. carried out with algebraic approxn. is monitored by employing systematically constructed b sets of increasing size. By using two different grids, the accuracy of the finite difference calcns. has been estd. to be of the order of 10^{-2} μE av. difference between the finite basis set and finite difference total H Fock energies is $2.75 \mu\text{Eh}$. Dipole moments detd. within the algebraic approxn. are also compared with the corresponding finite difference expec values.