

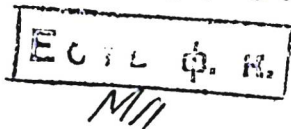
Be - B

ВсВ (2е)  
ВсВ

IX 2668 1955  
#

Марковский Л. Л.,  
Кондрашев Ю. Д., Горюева И. А.,  
Докл. АН СССР, 1955, 101, №1,  
97-98

РЛ, 1955, №17, 34058



$\text{Be}_2\text{BO}_3\text{OH}$  B9P-2375-IX 1956.

Vergnaud A. M.

C. r. Acad. Sci., 1956, 242

(vi)

N 6, 758-60 (papers).

1970

Be - B - C  
 $\text{CH}_3\text{BeBNH}_2$   
 $(\text{CH}_3\text{BeBNH}_2)_2$

*Визитная карточка, ВИАХ*

6 Б328. Спектроскопические свойства борогидрида метилбериллия. Book T. H., Morgan G. L. Spectroscopic properties of methylberyllium borohydride. «J. Amer. Chem. Soc.», 1970, 92, № 22, 6487—6492 (англ.)

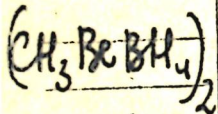
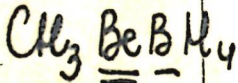
Измерены ИК-спектры поглощения и ЯМР борогидрида метилбериллия (I). Показано, что в газ. состоянии I существует как смесь мономера и димера. Мономер I имеет линейное строение с скелетом  $\text{C}-\text{Be}-\text{B}$ , причем связь  $\text{C}-\text{Be}$  является обычной  $\sigma$  связью. Димер I имеет также линейное строение с скелетом  $\text{B}-\text{Be}-\text{Be}-\text{B}$ .

В мономере и димере I обнаружено наличие концевых групп  $\text{BH}_2$ . Г. Кузьянц

*строение*

X. 1971. 6

1970



сформулирована

8180g Spectroscopic properties of methylberyllium borohydride. Morgan George Louis; Cook, T. H. (Dep. Chem., Univ. Wyoming, Laramie, Wyo.). *J. Amer. Chem. Soc.* 1970; 92(22), 6487-92 (Eng). Under the conditions of these expts. the vapor of MeBeBH<sub>4</sub> consists of a mixt. of monomer and dimer. The monomer has a linear C-Be-B skeleton, with the C bound to Be via a normal  $\sigma$  bond and the B bound to the Be via a double H bridge. The dimer has a linear B-Be-Be-B skeleton. Each B is bound to the adjacent Be atom via a double H bridge and the 2 Be atoms are bound via a double Me bridge. BH<sub>2</sub> terminal groups were found in both monomer and dimer. NMR data confirm the structure of the dimer in soln. RCIC

C.A. 1971 74 2

IX-5327

1976

$(CH_3 BeBH_4)_2$ ,  $CH_3 BeBH_4$  (vi, non.  
exp.)

Allamandola L. J., Nibler J. W.,  
J. Amer. Chem. Soc., 1976, 98, n8, 2096-2100

10

Pmex, 1976, 195201

$B_5H_{10}BeCH_3$

$B_5H_{10}Be(C_5H_5)$

12 Д136. Исследование методом молекулярных орбиталей нидо-бериллоборанов,  $B_5H_{10}BeX$ , где  $X=BH_4$ ,  $B_5H_{10}$ ,  $CH_3$  или  $C_5H_5$ . Molecular orbital studies of nidoberyllaboranes.  $B_5H_{10}BeX$ , where  $X$  is  $BH_4$ ,  $B_5H_{10}$ ,  $CH_3$ .

фрагмент  
дв. ст. системы

27



ф. 1949, 1012

or  $C_5H_5$ . Bicerano Jozef, Lipscomb William N.  
«Inorg. Chem.», 1979, 18, № 6, 1565—1571 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении с частичным сохранением двухатомного дифференциального перекрывания исследовано электронное строение нидо-бериллоборанов  $B_5H_{10}BeX$ ,  $X-BH_4$  (I),  $B_5H_{10}$  (II),  $CH_3$  (III),  $C_5H_5$  (IV). Использовано 8 наборов экспонент слэтеровских АО для Be. Приведены полные энергии и их компоненты, орбитальные энергии, распределения электронной плотности, индексы реакционной способности, локализованные по Бойсу МО. Обнаружено, что характеристики связи во фрагменте  $B_5H_{10}$  остаются практически неизменными во всех соединениях. Заряд на Be положителен для I—III (близок к +1 для I), но отрицателен, хотя и невелик, для IV. Связевые характеристики Be в IV существенно отличаются от таковых в I—III. Полученные результаты сопоставлены с эксперим. данными по реакционной способности и спектрами ЯМР.

В. Л. Лебедев



BeB

См. 10625 1980

Jug K, et al.

молк.  
вомер.

(J)

Theor. chim. acta,  
1980, 54, 131-144.

Кб. н.с.х.  
фракт

● (см. FH; III)

BeB

1982

1 Б74. Энергетическое рассмотрение колебательных потенциальных функций в модели эффективных ядерных зарядов. I. Energetic considerations of the vibrational potential function in the effective nuclear charge model. Ohwada Ken. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 1, 424—428 (англ.)

расчет  
сил. пост. и  $\epsilon$ .

Проведено дальнейшее исследование модели эффективных ядерных зарядов, предложенной ранее автором («J. Chem. Phys.», 1980, 72, 1) для предсказания валентных силовых постоянных многоатомных молекул. Предложен аналитич. вид независящего от межъядерных расстояний вклада в потенциальную энергию, что позволяет наряду с силовыми постоянными оценивать в рамках развиваемого подхода и полную молек. энергию. Конкретные расчеты выполнены для большого числа двух- и многоатомных молекул. Б. И. Жилинский

(151)



см. ори.

X. 1983, 19, N1.

BeB, LiC, Ba, LiN, BeN, BN, CN, BO,  
HF, Na, CO, BF, O<sub>2</sub>, NaH, F<sub>2</sub>, MgH,  
NaF, MgO, SiH, PH, AlF, SiO, PN,  
ClH, LiCl, P<sub>2</sub>

H<sub>2</sub>O, HCN, NaO, CO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, CF<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S, BH<sub>3</sub>, NH<sub>3</sub>,  
C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, NaH, H<sub>2</sub>CO, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, PH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, CH<sub>3</sub>F, CH<sub>2</sub>N<sub>2</sub>,  
NH<sub>2</sub>CN, CH<sub>2</sub>CO, SiH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>H<sub>4</sub>,  
CH<sub>3</sub>OH, CH<sub>3</sub>NC, CH<sub>3</sub>CN, BH<sub>3</sub>CO

BeB

1982

5 Д75. Энергетические соображения по поводу колебательной потенциальной функции в модели эффективного ядерного заряда. Ч. II. Energetic considerations of the vibrational potential function in the effective nuclear charge model. II. Ohwada Ken. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 10, 5040—5044 (англ.)

На основании модели эффективного ядерного заряда и с помощью формализма матрицы плотности выведена ф-ла для потенц. ф-ции двухатомной молекулы:

$$V = W - W_0 = \sum_{i \neq j} \frac{Z_i^* Z_j^*}{R_{ij}} + \sum_{j \neq k} \frac{Z_j^* Z_k^*}{q_{jk}} - N(r; R),$$

где  $W$  — полная молекулярная энергия,  $W_0$  — энергия, не зависящая от межъядерного расстояния  $R$ ,  $Z^*$  — эффективные ядерные заряды,  $q$  — расстояния между несвязанными атомами (при обобщении на многоатомные молекулы) и  $N$  — энергия притяжения, возникающая вследствие делокализации валентных электронов.

расчет

гр. 1983, 18, N5

Выделены члены, соответствующие электронам, локализованным при ядрах, и поэтому не зависящие от  $R$ . Для  $W_0$  получена ф-ла:

$W_0 = - (5/12) (b_i Z_i^{*12/5} + b_j Z_j^{*12/5})$ , где  $b_i, b_j$  — характерные для молекулы числовые параметры. Наконец  $N(r, R)$  имеет вид суммы членов, расположенных по отрицат. степеням  $R$ . Получены численные значения  $W_0$  для 25 двухатомных молекул. Полные энергии молекулы BeВ вычислены при 16 значениях  $R$ . Ч. I см. Ohwada K. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, 1.

М. А. Ковнер



Бориды бериллия

1983

4 Д89. Мезоатомы и молекулярная структура.  
I. Процессы кулоновского захвата — бориды бериллия.  
Mesonic atoms and molecular structure. I. Coulomb capture process — beryllum borides. Imanishi Nobutsugu, Furuya Toshinao, Fukumura Takuya, Fujiwara Ichiro, Iwasaki Matae. «Кёто дай-гаку гэнси энэруги кэнкюсё ихо, Bull. Inst. Atom. Energy Kyoto Univ.», 1983, 64, 36 (яп.)

молекулярная  
структура

ср. 1984, 18, № 4

Бориды бериллия

1983

490. Мезоатомы и молекулярная структура.  
II. Ионность связи — бориды бериллия. Atoms and molecular structure. II. Bond tonicity — beryllium borides. Imanishi Nobutsugu, Furuya Toshinao, Fukumura Takuya, Fujiwara Ichiro, Mats Iwasaki. «Kёто дайгаку гэнси энэруги кэнкюсё ихо, Bull. Inst. Atom. Energy Kyoto Univ.», 1983, 64, 37. (яп.)

Молекулярная  
структура,  
ионность  
связи

ср. 1984, 18, № 4

Be BO<sub>2</sub>

1987

Kou Tomoyuki,  
Asano Mitsuru.

(Do)

High Temp. Sci. 1987,  
24, N 1. C. 1-19.

( cell. Sz BO<sub>2</sub>; III)



$B_2Be_2$

DM 33525

1990

14 Б1038. Структурные и электронные свойства четырехатомных кластеров  $B_2Be_2$ . Structural and electronic properties of the tetraatomic  $B_2Be_2$  cluster / Güner O. F., Lammertsma K. L. // J. Amer. Chem. Soc.— 1990.— 112, № 2.— С. 508—516.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП изучена гиперповерхность потенциальной энергии синглетных и триплетных четырехатомных кластеров  $B_2Be_2$  (I). Геометрии стационарных точек найдены в базисах 3—21- ГФ и 6—31 ГФ\*, дополненном добавочным набором  $d$ -ф-ций на атомах В и Ве. Энергии всех структур уточнены расчетами с учетом электронной корреляции по теории возмущений Меллера-Плессета вплоть до 4-го порядка с учетом одно-, двух-, трех- и четырехкратных возбуждений. Наиболее стабильной структурой найдена квазитетраэдрич. структура (II), к-рая приблизительно на 30 ккал/моль более стабильна, чем др. изомеры. Показано, что относит. энергии изомеров сильно за-

М.П.

Х. 1990, № 14

висят от учета электронной корреляции. Топологич. анализ электронной плотности свидетельствует, что II можно рассматривать как 2 атома Ве  $\pi$ -связанные с тройной связью ВВ; связь между атомами Ве при этом не образуется. Рассчитанный барьер инверсии II через плоскую  $D_{2h}$  форму найден равным 14,6 ккал/моль. Детально обсуждены электронные и структурные особенности др. изомеров I. Проанализировано влияние способа учета электронной корреляции на результаты расчета.

И. Н. Сенченя



FBeB  
BeFB

1990

19 Б1017. Неэмпирическое исследование изомерии трехатомных фторидов FAB (A, B = Be, B, C, N, O, Si, P, S) / Зюбина Т. С. // Ж. неорганической химии. — 1990. — 35, № 6. — С. 1393—1396. — Рус.

Неэмпирическим методом МПЗ/ДХП//3-21Г\* проведены расчеты геометрич. параметров и относит. стабильностей изомеров FAB и AFB (где A и B = Be, B, C, N, O, Si, P, S). Резюме

(+27) 

x. 1990, N 19

$\text{Be}_2\text{B}$

1991

116. 1137c Chemical bonds and electronic structure of beryllium boride ( $\text{Be}_2\text{B}$ ) and beryllium carbide ( $\text{Be}_2\text{C}$ ). Ivanovskii, A. L.; Shein, I. V. (Inst. Khim., Sverdlovsk, USSR). *Neorg. Mater.* 1991, 27(10), 2103-8 (Russ). The total and partial d. of states, electronic band parameters, cluster MO diagrams, and AO-overlap populations are presented for  $\text{Be}_2\text{B}$  and  $\text{Be}_2\text{C}$  calcd. by the selfconsistent LMO-Green-function band method. The interat. interactions are analyzed also by the nonempirical selfconsistent cluster X $\alpha$ -variational method.

mej. facem

~~A~~ (71)  $\text{Be}_2\text{C}$

C.A. 1992, 116, N 2

$\text{Be}_2\text{B}$

1991

7 Б2217. Химическая связь и электронное строение  $\text{Be}_2\text{B}$  и  $\text{Be}_2\text{C}$  / Ивановский А. Л., Шейн И. В. // Неорг. ган. матер.—1991.—27, № 10.—С. 2103—2108.—Рус.

Самосогласованным зонным методом ЛМТО-функции Грина и кластерным методом  $X_\alpha$ -дискретного варьирования проведены исследования электронного энергетич. спектра и параметров межатомных вз-вий в  $\text{Be}_2\text{B}$  и  $\text{Be}_2\text{C}$  со структурой типа  $\text{CaF}_2$ . Установлено, что хим. связь в указанных фазах носит смешанный ковалентно-ионный характер и образована в результате гибридизации внеш.  $s$ -,  $p$ -орбиталей атомов-компонентов. Ионная составляющая связи обусловлена поляризацией электронной плотности в кристаллах с частичным переносом в направлении  $\text{Be} \rightarrow (\text{B}, \text{C})$ .

Электрон-  
строение

(4) ~~12~~

х. 1992, № 7

Bbe

(PM- 37 773)

1994

Д,  
эксперимент,  
теорет  
расчет  
Baldyrev A.I., Gonzalez N;  
Simons J.,  
J. Phys. Chem., 1994,  
98, N 40, 9931-9944

BeB

1994

1994

/ 121: 308751p Theoretical Study of the Electronic Structure and Spectroscopic Properties of a New Diatomic Molecule: BeB. Ornellas, Fernando R.; Valentim, Anna Regina S. (Instituto de Quimica, Universidade de Sao Paulo, 01498-970 Sao Paulo, Brazil). *J. Phys. Chem.* 1994, 98(48), 12570-8 (Eng). This study reports reliable theor. evidence of the existence of a new diat. mol., the species BeB. Complementing previous investigations predicting also the existence of new species like BeN and BeC, it allows one to have now a global view of the properties and bonding of diatomics of beryllium with first/s row atoms. The electronic structure was studied at the multireference single and double excitations CI (MRSD-CI) level as implemented in the MELD codes and with natural orbitals (for the  $4\Sigma^-$  state) as the one-particle basis. Eighteen electronic states were characterized, with the ground state being a  $X^2\Pi$  with a relatively long equil. internuclear distance ( $R_e = 3.654 a_0$ ) and a small dissocn. energy ( $D_e = 0.86$  eV). The next doublet is also weakly bound with  $R_e = 3.982 a_0$  and  $D_e = 0.48$  eV. These states are followed by two close-lying quartets at 0.568 eV ( $a^4\Sigma^-$ ),  $R_e = 3.246 a_0$ , and at 0.593 eV ( $b^4\Pi$ ),  $R_e = 3.460 a_0$ , with much deeper potentials, 3.04 and 3.02 eV, resp. The curves crossings

теорет.  
расчет  
 $X^2\Pi$

стабильность,  
т.е.  $D_e$ ,  
возмож. соотн.

С.А. 1994, 121, N26

between these three excited states and another group of four doublet states lying between 1.5 and 1.8 eV will certainly be responsible for a complex structure in the spectra of this mol. Complementing the electronic description of all states, vibrational and rotational consts. are also presented as well as dipole moment functions and vibrationally averaged dipole moments. A graphical display of contour maps of the valence orbitals as a function of the internuclear distance clearly illustrates the electron rearrangements occurring during mol. formation and the participation of beryllium 2p orbital in a  $\pi$ -type bond. BeB shows more resemblance with the isoelectronic mol.  $B_2^+$  rather than with  $BeC^+$ . A comparison of the ground-state spectroscopic properties of BeB with the other first/s row beryllium diat. species is also presented.





BeB

1994

17 Б1107. Теоретическое изучение электронной структуры и спектроскопических свойств новой двухатомной молекулы: BeB. Theoretical study of the electronic structure and spectroscopic properties of a new diatomic molecule: BeB / Ornellas Fernando R., Valentim Anna Regina S. // J. Phys. Chem. — 1994 — 98 , № 48 — С. 12570—12578 — Англ.

Теоретически исследована возможность существования новой двухатомной молекулы BeB (I). Электронная структура I исследована методом "КВ" по отношению к нескольким исходным конфигурациям с учетом одно- и двукратных возбуждений. Охарактеризованы 18 электронных состояний I. В основном  $X^2\Pi$ -состоянии I имеет относительно большое равновесное межъядерное расстояние ( $R_e = 3,654a_0$ ) и небольшую энергию диссоциации ( $D_e = 0,86$  эВ). Представлены также колебат. и вращат. константы, дипольные моменты. Проведено сопоставление с электронными и спектроскопич. свойствами других бериллийсодержащих двухатомных молекул. Библ. 39.

Н. С.

М.П.

Х. 1995, № 17

BeOB

1995

F: BeOB

P: 3

DM 38075

05.Д0151. эмпирическое исследование сильных связей BeO с атомами Li, Be и B в гиперстехиометрических молекулах LiOBe, BeOBe и BeOB. Ab initio study of the strong binding of BeO to Li, Be, and B atoms in the hyperstoichiometric LiOBe, BeOBe, and BeOB molecules / Boldyrev Alexander I., Simons Jack // J. Phys. Chem. - 1995. - 99, N 41. - С. 15041-15045. - Англ.

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

X. 1996, N5

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



DM 38075

1995

F: BeOB

P: 3

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

Место хранения ГПТБ

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

Р.ж.х. № 7, 1996.

BeB<sub>2</sub>H<sub>8</sub>

1997

127: 153179f Computational Evidence for a Metastable Polar Isomer of Beryllium Borohydride. Saeh, Jamal C.; Stanton, John F. (Institute for Theoretical Chemistry Departments of Chemistry and Biochemistry, University of Texas, Austin, TX 78712 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1997, 119(31), 7390-7391 (Eng), American Chemical Society. Intuitive arguments suggesting that a stable polar isomer of BeB<sub>2</sub>H<sub>8</sub> might be formed by interaction of cationic BeH and the anion of diborane(7) are tested computationally. A species contg. three Be-H-B bridge bonds with C<sub>s</sub> symmetry represents a true local min. on the potential energy surface at the electron-correlated level of theory. Other stationary points are found that represent landmarks on a rather complicated pathway for

структура  
метастаб.

intramol. hydrogen exchange via rotation of BH<sub>3</sub> units. Although the C<sub>s</sub> isomer of BeB<sub>2</sub>H<sub>8</sub> lies roughly 20 kcal mole<sup>-1</sup> above other local min. with linear B-Be-B arrangements, no low-energy pathway for conversion to the more stable isomers is apparent. Given that the cryst. structure of BeB<sub>2</sub>H<sub>8</sub> is polymeric with decidedly nonlinear B-Be-B contacts, it is plausible that the triangular species studied here might exist as a metastable intermediate. Hence, this isomer provides a basis for rationalizing the dipole moment expts. of a quarter-century ago that helped to make the mol. structure of this mol. such an enigmatic and frustrating problem.

C: A. 1997, 127, N 11

$\text{BeF}_2 \cdot \text{BF}_3$   
 $m, n = 1, 2$

1997

Scholz G. et al.,

спр-ра,  
стабильн.,  
теорет.  
расчет

J. Fluorine Chem.  
1997, 86 (2), 131-142



B<sub>2</sub> Be<sub>2</sub>

1997

128: 159117b Structure and bonding properties of B<sub>2</sub>Be<sub>2</sub> cluster. Xu, Xiaohong; Wu, Haishun; Zhang, Congjie; Zhou Weiliang (Department Chemistry, Shangxi Normal University, Linfen, Peop. Rep. China 041004). *Wuli Huaxue Xuebao* 1997, 13(12), 1065-1071 (Ch), Beijing Daxue Chubanshe. By using ab initio methods, the authors have optimized 27 geometric configurations of the 10 valence-electron diberyllium diboride (B<sub>2</sub>Be<sub>2</sub>). A singlet tetrahedral-like structure is the most stable one at HF and QCISD(T)/6-311G\*\* level. By means of bond no. parameter (BNP), Walsh diagrams, energy gap, and bond charges, bonding properties were detd.

ab initio  
компьютер.  
математ.

CA. 1998, 128, 113

Be  $\text{BO}_3^-$

1998

Chaukin D.O. et al.,

romexus.  
noterxh.  
cmruxkty.  
naram,  
D

Lh. Neorg - Khim.

1998, 43(10), 1694-  
1709

(Am. Lixell; III)



BeB-13

1998

Charikin D.O. et al.,

поверх.  
поверх.  
эмиссия  
напряж.  
и, темп.  
панет

Zh. Neorg. Khim. 1998,  
43 (12), 2033-49

(cell. ● Li Cs, III)

F: B2Be2

P: 3

131:107086 Ab initio study on stability of tetratomic beryllium boride clusters. Xu, Xiao-Hong; Wu, Hai-Shun; Zhang, Cong-Jie; Wang, Yong-Lan; Jin, Zhi-Hao (Dep. Chem., Shanxi Normal Univ., Linfen 041004, Peop. Rep. China). Gaodeng Xuexiao Huaxue Xuebao, 20(6), 960-962 (Chinese) 1999 Forty-six electronic states of 23 geometric configurations for beryllium borides BBe3, B2Be2 and B3Be have been optimized at the HF/6-31 level by using an ab initio method. Based on optimized results, total energies and vibrational frequencies are calcd. It is shown that the ground states of BBe3, B2Be2, and B3Be are 1f(2A1), 2h(1A1), and 3e(2A1), resp.

1999

F: BBe3

P: 3

131:107086 Ab initio study on stability of tetratomic beryllium boride clusters. Xu, Xiao-Hong; Wu, Hai-Shun; Zhang, Cong-Jie; Wang, Yong-Lan; Jin, Zhi-Hao (Dep. Chem., Shanxi Normal Univ., Linfen 041004, Peop. Rep. China). Gaodeng Xuexiao Huaxue Xuebao, 20(6), 960-962 (Chinese) 1999 Forty-six electronic states of 23 geometric configurations for beryllium borides BBe3, B2Be2 and B3Be have been optimized at the HF/6-31 level by using an ab initio method. Based on optimized results, total energies and vibrational frequencies are calcd. It is shown that the ground states of BBe3, B2Be2, and B3Be are 1f(2A1), 2h(1A1), and 3e(2A1), resp.

C.A. 1999, 131

F: B3Be

P: 3

131:107086 Ab initio study on stability of tetraatomic beryllium boride clusters. Xu, Xiao-Hong; Wu, Hai-Shun; Zhang, Cong-Jie; Wang, Yong-Lan; Jin, Zhi-Hao (Dep. Chem., Shanxi Normal Univ., Linfen 041004, Peop. Rep. China). Gaodeng Xuexiao Huaxue Xuebao, 20(6), 960-962 (Chinese) 1999 Forty-six electronic states of 23 geometric configurations for beryllium borides BBe<sub>3</sub>, B<sub>2</sub>Be<sub>2</sub> and B<sub>3</sub>Be have been optimized at the HF/6-31 level by using an ab initio method. Based on optimized results, total energies and vibrational frequencies are calcd. It is shown that the ground states of BBe<sub>3</sub>, B<sub>2</sub>Be<sub>2</sub>, and B<sub>3</sub>Be are 1f(2A<sub>1</sub>), 2h(1A<sub>1</sub>), and 3e(2A<sub>1</sub>), resp.

---