

Al(n)

Al_x

$x = 5, 9, 25$

Кв. мех.
паверт

Wessmer R. P.

1976

"Int. J. Quantum
Chem. Symp." 1976,
N 10, 183-191

(au O₃; III)

1949

91: 146236g Use of $X\alpha$ SW calculations for parametrizing the CNDO method for the heavier elements. II. Tests for the elements aluminum to sulfur. Head, J. D.; Mitchell, K. A. R. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can V6T 1W5). *Can. J. Chem.* 1979, 57(14), 1826-38 (Eng). In Part I (1978) authors used results from the $X\alpha$ scattered wave ($X\alpha$ SW) method for guiding the parametrisation of the CNDO (CNDO) method for clusters of Ag, and proposed the extension of this approach to other heavier elements for which CNDO schemes are not well developed. This approach is tested for the elements Al to S for which more information is available. $X\alpha$ SW calcns. were made for the mol. clusters Al_7 , Si_5H_{12} , and P_4 , and comparisons made with expt. and with other calcns. The charge distributions and transition-state energies, along with information obtained previously for S_8 by D.R. Salahub *et al.*, (1977) were used to derive new parameters (designated CNDO/HM) for the elements Al to S essentially following the procedure in Part I. Calcns. using these parameters were tested against an $X\alpha$ SW calcn. made here for an Al_{10} cluster (which simulates the (111) surface of Al), and against other calcns. made previously for P_8 , P_4S_3 , SiH_4 , PH_3 , H_2S , and SO_2 . Comparisons are also made with results from the CNDO/2 scheme. Generally the CNDO/HM procedure seems at least as successful as CNDO/2.

5098 normal

Al₇
Si₅H₁₂
P₄
кв. см.
расчет

(+2) ☒

C.A. 154991N18

Оттиск 8505

1973

1 Б8. Использование $X\alpha$ -РВ-расчетов для параметризации метода ППДП применительно к тяжелым элементам. II. Контрольные расчеты для элементов от алюминия до серы. Lead J. D., Mitchell K. A. R.

Use of $X\alpha$ SW calculations for parametrising the CNDO method for the heavier elements. II. Tests for the elements aluminium to sulphur. «Can. J. Chem.», 1979, 57, № 14, 1826—1838 (англ.)

На основе расчетов электронного строения ряда молекул и кластеров, содержащих атомы Al, Si, R и S методом ССП- $X\alpha$ рассеянных волн ($X\alpha$ -РВ) проведена параметризация метода ППДП для этих элементов. Расчеты $X\alpha$ -РВ кластеров Al_7 , Al_{10} , Si_5H_{12} и P_4 выполнены в рамках модели перекрывающихся атомных сфер. Для молекулы S_8 использованы данные проведенного ранее $X\alpha$ -РВ-расчета. Зарядовые распределения и энергии ионизации валентных МО, рассчитанные методом $X\alpha$ -РВ в приближении переходного состояния, использованы для получения новых параметров метода ППДП в рамках метода параметризации, пред-

Al₇
Al₁₀

расчет
молекул.

(+9) ☒

Х. 1980. №1

см. на обороте

ложенного ранее авторами («Mol. Phys.», 1978, 35, 1681). С использованием новых параметров методом ППДП, а также стандартных методом ППДП/2, рассчитано электронное строение молекул P_8 , P_4S_3 , SiH_4 , PH_3 , H_2S и SO_2 . Полученные результаты сопоставлены с данными расчетов методом $X\alpha$ -РВ. Анализ полученных результатов позволил сделать вывод о том, что для простых молекул, содержащих атомы Al, Si, P и S и элементы первого периода, новая параметризация приводит к результатам, не хуже, чем стандартная схема ППДП/2. Для соединений элементов 3-го периода в рамках модифицированного на основе $X\alpha$ -РВ-расчетов метода ППДП можно получить результаты, лучше согласующиеся с экспериментом и др. теор. расчетами, чем данные расчетов методом ППДП/2.

И. А. Тополь

лет
чии

Al₄

105. 129371

1981

Quinn Ch. M., et al.

E;

J. Chem. Phys., 1981, 74,
N9, 5781-5785.

(see Al₂; III)

Al_2

[Orig. 12937]

1981

1 Д147. Энергии связи электронов остова в теории самосогласованных молекулярных орбиталей с использованием комбинаций электронов из оболочек реальных атомов и валентных электронов модельных атомов. Core-electron binding energies from self-consistent field molecular orbital theory using a mixture of all-electron real atoms and valence-electron model atoms. Quinn Charles M., Schwartz Maurice E. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 9, 5181—5185 (англ.)

E;

Описан метод расчета энергий связи электронов остова для молекул Al_3 , Al_4 , $AlNO$ и OAl_3 . В качестве расчетного метода применялся модифицированный метод ССП МО ЛКАО с использованием гауссовых ат. орбиталей. Табличный материал работы содержит численные значения энергий связи для некоторых МО рассматриваемых молекул. Для Al приведены параметры модельного потенциала, а также табулированы значения коэф. разложения базисных функций.

В. Г. Пальчиков



ф. 1982, 18, №1.

[Ommuck 12937]

1981

Al_2 ,

Al_3 ,

Al_4

Quinn Ch. M., Schwartz
M. E.,

теория связи,
Кв. мех.
расчет

J. Chem. Phys., 1981,
74(9), 5181-5185.

Al₂

орбиск 12937

1981

Энергии
связи

1 Б19. Энергии связи остовных электронов в теории молекулярных орбиталей самосогласованного поля с использованием реальных атомов со всеми электронами и модельных атомов с валентными электронами. Quinn Charles M., Schwartz Maurice E. Core-electron binding energies from self-consistent field molecular orbital theory using a mixture of all-electron real atoms and valence-electron model atoms. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 9, 5181—5185 (англ.)

Разработан вариант метода ССП МО ЛКАО, использующий приближение модельного потенциала для одних атомов в системе и рассматривающий остальные атомы при полном учете их электронов. Для тех атомов, в к-рых необходимо знать энергии связи остовных электронов, используются реальные заряды ядер и соотв-щие многоэлектронные базисы. Для остальных атомов вводятся редуцированные заряды ядер, модельный потенциал, описывающий взаимодействие валентных электронов с остовом, и валентные базисы. На примере моле-

(+1) ☒

Х. 1982, 1945, №1. АЕНО

кулы Al_2 исследованы приближения: учет всех электронов, 1 атом реальный — 2 атом модельный и 2 модельных атома. Для каждой из рассмотренных моделей исследовалась зависимость вычисляемых величин от базисов. Показано, что результаты всех 3 модельных расчетов хорошо согласуются между собой. На примерах расчетов энергий связи основных электронов относительных полных энергий и др. молек. характеристик молекул Al_2 и $AlNO$, проведенных с учетом всех электронов и в смешанном приближении, показано, что комбинация реальных атомов и модельных атомов с валентными электронами в методе ССП МО ЛКАО позволяет правильно описать изменение относительных полных энергий, орбитальной энергии МО, заселенности МО и энергии ионизации основных уровней, включая релаксационные эффекты.

И. А. Тополь

Al_3

[055. 12532]

1981

Quinn Ch. M., et al.

J. Chem. Phys., 1981, 74,

E;

N 9, 5781-5785.

(see  Al_2 ; III)

Al₃

Commence 12816 | 1981.

Al₄

Schwartz M.E.
etal.

ib. deex.
fact

Surface Science,
1981, 106, 258-264

Al_y

[QTT. 12816]

1981

Schwartz M.E., et al.

Surface Sci., 1981, 106,

сверх-
муре

N 1-3, 258-264.

( сев. Al₂; III)

Al-кластеры

Om. 15840

1982

97: 133859m Generation of continuous beams of refractory metal clusters. Riley, S. J.; Parks, E. K.; Mao, C. R.; Pobo, L. G.; Wexler, S. (Chem. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Phys. Chem.* 1982, 86(20), 3911-13 (Eng). Generation of continuous beams of clusters of refractory metals by a thermal quench flow source is described. The source consists of a high-temp. (up to 2000°) oven for metal vaporization and a liq.-nitrogen-cooled quench cell for condensation and cluster growth. Various flow gases are used to vary the distribution of clusters produced. The operation of the source and the characterization of cluster beams of Al, Cr, Ni, Cu, and Ag are discussed.

используют
переп. эти
разли

(44) ⊗

©.A. 1982, 97, N 16

Aln

1983

Fayet P., Stein G.,
et al.

масс
спектр.
исслед.
синабди-
номи
структ.

Proc. Int. Ion Eng.
Congr. 1983, 3, 1925-7.

● (ser. Agn; III)

Aly

красные

[Um. 16950]

1983

Pacchioni G., Plavsic D,
et al.

$U=3-5$

хим. свеч,
электрон.
структура

Ber. Bunsenges. phys.

Chem., 1983, 87, N 6,

503-512.

Al_n

($n=3-5$)

электрон-
структура,
колебания

[Om. 19027]

1984

Pacchioni G., Koutecky J.,

Ber. Bunsenges. Phys.

Chem., 1984, 88, N 3, 242-

245.

Al₃

[Om. 22 396]

1985

Howard F.A., Sutcliffe
et al., R;

Электрон-
Резонансн.
спектр
в матрице

J. Phys. Chem., 1985,
89, N 17, 3595-3598.

1985

ALy Koutecký J., Pacchioni G.,
et al.

Surface Sci., 1985, 156, N2:
Small Part. and Inorg.

geodemp.
empykin.

Clusters. Proc. 3 Int. Meet.,
Berlin (West), 9-13 July, 1984,
Pt 2, 650-669.

(cer. Li₄; III)

1986

Al^{III}

Choe M. Y., Cohen
Marvin L.

Сверхрешет.
Электр.
оболочек

Phys. Lett., 1986,
Hi3, N 8, 420-424.

(сер. Na^{III}; III)

Al_n

1986

$n = 5, 9, 13$

хим. связь и
структур. свойства

(молекуляр. спектр)

105: 197412b Electronic structure and bonding in clusters: theoretical studies. Hermann, K.; Hass, H. J.; Bagus, P. S. (Inst. Theor. Phys., Tech. Univ. Clausthal, Clausthal/Goettingen, Fed. Rep. Ger.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1986, 3(2-3), 159-66 (Eng). The electronic structure was studied of small Al_n , $n = 5, 9, 13$, clusters with bulk geometry by using the ab initio Hartree-Fock-LCAO method. The cluster ground states have always multiplicity higher than the lowest possible value. However, the energy difference between ground and lowest low spin state decreases with increasing cluster size. The energy range of the Al_n cluster valence levels is comparable with the width of the occupied part of the 3 sp band in bulk Al. The different binding mechanisms that arise when a CO mol. interacts with Al_n clusters in different coordination sites are analyzed in detail with the constrained space orbital variation (CSOV) method. Electrostatic and polarization contributions to the interaction are important. Among charge transfer (donation) contributions π electron transfer from Al_n to CO corresponding to π backbonding is energetically more important than σ electron transfer from CO to Al_n characterizing the σ bond.

C.A. 1986, 105, N 22

Aln

(Am 24396)

1986

n=2

Koutecky J., Fantucci P.,

Chem. Rev., 1986, 86,
N3, 539-587.

теорет.
расчет
символ.
и эксперим.

Al_n

1986

105: 30400j Structural, electronic, and chemisorption properties of small aluminum clusters. Upton, T. H. (Corp. Res.-Sci. Lab., Exxon Res. and Eng. Co., Annandale, NJ 08801 USA). *Phys. Rev. Lett.* 1986, 56(20), 2168-71 (Eng). The results of total-energy calcs. for optimized structures of Al_n ($n = 2-6$) and Al_nH_2 are presented, in which properties are at variance with the predictions of the electronic-shell model. These differences are understood by the introduction of at. potentials as a perturbation on the shell model. Ionization energies (5.8-6.6 eV) and electron affinities (0.1-2.1 eV) are mostly larger than for an Al atom. Bond lengths increase from 2.51 to 2.81 Å. Al_2 is the smallest cluster that will absorb H_2 .

смыкнута,
I, Ac

(71) ☒

 $Al_n H_2$ $n = 2 \div 6$ (meop. facem)

C.A. 1986, 105, NY

Al_3^+

1987

Basch Harold.

Chem. Phys. Lett.,

vol. n. 1987, 136, N3-4,

289-293.

( cer. Al_3 ; III).

Al₃

1987

20 Б1036. Электронные состояния Al₃. The electronic states of Al₃. Basch Harold. «Chem. Phys. Lett.» 1987, 136, № 3—4, 289—293 (англ.)

Для кластеров Al₃, а также ионов Al₃⁺ и Al₃⁻ выполнен расчет геометрич. и электронных состояний методом ССП в двухэкспонентном гауссовском базисе с поляризац. ф-циями. Основные электроны атомов Al учтены в приближении эффективного потенциала. Показано, что Al₃⁺ и Al₃⁻ имеют почти D_{3h} — симметрию, а нейтральный тример характеризуется эквивалентной треугольной геометрией. Определены основные электронные состояния Al₃, Al₃⁺ и Al₃⁻, которые не согласуются с полученными при интерпретации спектров ЭПР.

А. А. Вашман

М.П.

(42) X

X. 1987, 19, N 20

Al_3

1987

Al_3^+, Al_3^-

№ 20 Б1036. Электронные состояния Al_3 . The electronic states of Al_3 . Basch Harold. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 136, № 3—4, 289—293 (англ.)

Для кластеров Al_3 , а также ионов Al_3^+ и Al_3^- выполнен расчет геометрич. и электронных состояний методом ССП в двухэкспонентном гауссовском базисе с поляризац. ф-циями. Основные электроны атомов Al учтены в приближении эффективного потенциала. Показано, что Al_3^+ и Al_3^- имеют почти D_{3h} — симметрию, а нейтральный тример характеризуется эквивалентной треугольной геометрией. Определены основные электронные состояния Al_3 , Al_3^+ и Al_3^- , которые не согласуются с полученными при интерпретации спектров ЭПР.

А. А. Вашман

М.П.

Х. 1987, 19, N 20

Al_3^+

Al_3 , Al_3^-

(Om. 26445)

1987

107: 65103h The electronic states of triatomic aluminum. Basch, Harold (Dep. Chem., Bar-Ilan Univ., 52100 Ramat-Gan, Israel). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 136(3-4), 289-93 (Engl.). The electronic and geometrical structural properties of Al_3^+ , Al_3 and Al_3^- were investigated using an ab initio CAS MC-SCF method in a double-zeta plus polarization Gaussian basis set. The ten core electrons of each Al atom were replaced by an accurate compact effective core potential. Al_3^+ is predicted to be linear and Al_3 is calcd. to have near- D_{3h} symmetry. The neutral trimer has a near-equilateral triangle static geometry. The electronic ground states of Al_3^+ and Al_3^- are both predicted to be relatively unreactive 1A_1 closed-shell species. Al_3 is calcd. to have a 2A_1 ground state, in disagreement with recent interpretations of ESR spectra in matrix isolation as favoring a spin-quartet ground state.

М. Спрыкина,
В. М. М. Спрыкин,
М. П. Проткин

С. А. 1987, 107, 28

Aln

от 27732

1987

5 Б1027. Малые кластеры Al. I. Влияние базиса и корреляции на геометрию малых кластеров Al. Small Al clusters. I. The effect of basis set and correlation on the geometry of small Al clusters. Bauschlicher C. W., Jr., Pettersson L. G. M. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 4, 2198—2204 (англ.)

Методом ССП и конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитаны длины связи (ДС) и энергии атомизации (ЭА) кластеров Al_2 и Al_4 (ромбич. конфигурация). Аналогичные расчеты в приближении ССП проведены для плоского кластера Al_{13} . Исследовано влияние на ДС и ЭА расширения базиса и степени учета корреляц. эффектов. Для Al построен эффективный остоный Пт, позволяющий воспроизвести данные расчетов с учетом всех электронов. Для всех исследованных кластеров показана важность учета в базисе поляризац. d -ф-ций. В приближении ССП учет d -ф-ций приводит к уменьшению на 0,2 ат.ед. ДС Al—Al и увеличению ЭА (приходящейся на 1 атом) на 0,25 эВ. Учет корреляции сказывается в малом уменьшении длины связи, но в сильном увеличении ЭА. Увеличение ЭА и уменьшение

М.Н.

Х. 1988, 19, 115

длины связи при учете электронной корреляции практически не зависят от числа d -ф-ций в базисе.

И. А. Тополь



1987

Al₂

№ 2 Д118. Точные неэмпирические расчеты, которые демонстрируют основное состояние $a^3\Pi_u$ для Al₂. Accurate ab initio calculations which demonstrate $a^3\Pi_u$ ground state for Al₂. Bauschlicher Charles W., Jr., Partridge Harry, Langhoff Stephen R., Taylor Peter R., Walch Stephen P. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 12, 7007—7012 (англ.)

(a³Π_u)

Рассчитаны спектроскопич. параметры и расщепления между тремя низколежащими состояниями $X^3\Pi_u$, $A^3\Sigma_g^-$ и $a^1\Sigma_g^+$ молекулы Al₂. Корреляция электронов учитывалась в рамках полного КВ (ПКВ) расчета в двухэкспонентном базисе с двумя d -ф-циями. Поскольку расщепление $^3\Pi_u - ^3\Sigma_g^-$, рассчитанное методом ПАП ССП/НИК КВ, хорошо согласуется со значением, полученным в рамках ПКВ, расчеты указанным методом проведены в расширенном гауссовом базисе. При включении небольшой поправки на релятив. эффекты получено, что состояние $^3\Sigma_g^-$ лежит на 174 см⁻¹ вы-

ср. 1988, 18, № 2

ше основного состояния $^3\Pi_u$. Состояние $^1\Sigma_g^+$ лежит по крайней мере на 2000 см^{-1} выше по энергии. Расчеты в приближении функционала связанных пар при включении $2s$ - и $2p$ -корреляции дают небольшую поправку к D_e , уменьшают T_e только на 26 см^{-1} и укорачивают длины связи на $\sim 0,02\text{ а}^0$. Эксперим. спектры поглощения также подтверждают, что основное состояние $^3\Pi_u$. Найдено, что это состояние чувствительно к уровню учета корреляционных эффектов.

Н. В. В.



Al₂

1987

5 Б1021. Точные неэмпирические расчеты, свидетельствующие, что основным состоянием Al₂ является ³Π_u. Accurate ab initio calculations which demonstrate a ³Π_u ground state for Al₂: Bauschlicher Charles W., Jr., Partidge Harry, Langhoff Stephen R., Taylor Peter R., Walch Stephen P. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 12, 7007—7012 (англ.)

Исследована зависимость спектроскопич. постоянных низших электронных состояний ³Π_u, ³Σ_g⁻ и ¹Σ_g⁺ молекулы Al₂, коррелирующих с основным состоянием ²P(3s²3p¹) атома Al, от расширения орбитального и конфигурац. базисов в методе конфигурац. взаимодействия (КВ). При полном учете КВ рассматривалась корреляция 6 валентных электронов с использованием двухэкспонентного базиса сгруппированных гауссовых ф-ций, дополненного двумя поляризац. d-ф-циями. Результаты получены в рамках многоконфигурац. метода ССП в полном активном пространстве с последующим учетом КВ с несколькими исходными конфигурациями

М.П.

Х. 1988, 19, N5

при использовании различных базисов — вплоть до $(20s13p6d4f/[6s5p3d2f])$. При определении энергий состояний учитывались релятивистские поправки. Найдено, что состояние $^3\Sigma_g^-$ лежит выше на 174 см^{-1} основного состояния $^3\Pi_u$. Состояние $^1\Sigma_g^+$ расположено на 2000 см^{-1} выше основного. Рассчитанная энергия диссоциации $D_0(^3\Pi_u)$ составила $1,55 \pm 0,15\text{ эВ}$. Длина связи Al_2 сильно зависит от базиса, но мало чувствительна к степени учета корреляц. эффектов. На основании результатов расчетов интерпретирован эксперим. спектр поглощения Al_2 . И. А. Тополь

Al₁₃

1987

108: 11441u Energetics of aluminum (Al₁₃), copper (Cu₁₃) and nickel (Ni₁₃) clusters of various symmetries. Elsasser, C.; Fahnle, M.; Brandt, E. H.; Böhm, M. C. (Inst. Phys., Max-Planck-Inst. Metallforsch., 7000 Stuttgart, 80 Fed. Rep. Ger.). *J. Phys. F: Met. Phys.* 1987, 17(11), L301-L304 (Eng). The stability was studied of Al₁₃, Cu₁₃ and Ni₁₃ clusters of various symmetries by a semiempirical self-consistent Hartree-Fock approach based on an INDO-type Hamiltonian. Authors have compared fcc., hcp., and icosahedral structures as well as an amorphous model. The calcd. energy min. always correspond to the icosahedral arrangement.

неопрем.
распрем
смазунбн.

(42)  Cu₁₃, Ni₁₃

C.A. 1988, 108, N2

Al_n^+

$(n=2 \div 7)$

$(Do, T, A.P.)$

X. 1988, 19, N5

1987

5 Б4053. Индуцированная столкновениями диссоциация кластерных ионов: фрагментация исходных кластеров, энергии связи и структура кластеров $Al_2^+—Al_7^+$. Collision-induced dissociation of aluminum cluster ions: fragmentation patterns, bond energies, and structures for $Al_2^+—Al_7^+$. Hanley Luke, Ruatta Stephen A., Anderson Scott L. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 1, 260—268 (англ.)

Для исследования физ. св-в и структуры ионных кластеров создана установка, включающая источник ионизированных кластеров от Al_2^+ до Al_7^+ , получаемых распылением тв. мишени, камеру охлаждения. Кл в столкновениях с атомами гелия в ионной ловушке, селекцию по массам с помощью фильтра Вина, систему ионопроводов, камеру столкновения и квадрупольный масс-фильтр. С помощью этой установки измерены ф-ции возбуждения р-ции $Al_n^+ + Xe \rightarrow Al_m^+ + Xe$, где $m < n$, а также ф-ции возбуждения для $m = 1—6$ при

всех n . Обнаружено, что р-ции Al_7^+ с Хе обладают более высоким порогом, чем р-ции с участием Кл с $n > 7$, а каналами с самыми низкими порогами являются р-ции с образованием Al^+ или Al_{n-1}^+ . Точные значения пороговых энергий определялись при помощи интеграла свертки распределения по энергии и простой формой ф-ции возбуждения $\sigma(E) = A(E - E_0)^\alpha / E^\beta$, где A , α и β — подгоночные параметры. Отмечено, что доминирующим каналом диссоциации является потеря одного атома Al , что указывает на компактные структуры исследованных Кл, согласующиеся со структурами нейтр. кластеров $Al_2 - Al_6$. Стабильности Кл в отношении столкновит. диссоциации уменьшаются в ряду $Al_7^+ \gg Al_6^+ > Al_{3,5}^+ > Al_2^+ > Al_4^+$. Определены энергии диссоциации Кл, которые оказались выше величин, рассчитанных из теорет. моделей. Экспериментально определенные Пт ионизации Кл $Al_2 - Al_6$ также несколько выше теоретических. Л. Ю. Русин

Al_n^+

$n=2, 3, \dots, 7$

1987

(Do)

107: 223550h Collision-induced dissociation of aluminum cluster ions: fragmentation patterns, bond energies, and structures for Al_2^+ - Al_7^+ . Hanley, Luke; Ruatta, Stephen A.; Anderson, Scott L. (Dep. Chem., State Univ. New York, Stony Brook, NY 11794-3400 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(1), 260-8 (Eng). Collision-induced dissocn. (CID) of cooled, mass-selected Al cluster ions (Al_{2-7}^+), by Xe, was studied over an energy range of 0-10 eV (center-of-mass). The product branching ratios and cross-section magnitudes were used to derive qual. structural information about the cluster ions. The fragmentation thresholds were analyzed to yield dissocn. energies, approx. ionization potentials, and further structural information about the cluster ions and their neutral counterparts. Cluster stabilities ranged from 0.85 ± 0.40 eV for Al_4^+ to 2.25 ± 0.70 eV for Al_7^+ . The results provided a stringent test for existing calcs. on Al_{2-6} .

C.A. 1987, 107, N 24

Al₃

1987

5 Д63. Поверхности потенциальной энергии для низколежащих состояний тримера алюминия. Potential energy surfaces of low-lying states of the aluminum trimer. Pacchioni Gianfranco, Fantucci Piercarlo, Koutecký Jaroslav. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 142, № 1—2, 85—91 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО исследовано электронное строение Al₃ в низколежащих состояниях ⁴A₂, ⁴B₁, ²B₁, ²A₁ и ²B₂ (симметрич. C_{2v}). Обнаружено, что основным является состояние ⁴B₁ (равнобедренный треугольник с углом при вершине 55,7°; энергия диссоциации 243 кДж/моль). Состояния ³A₂, (71,2°, 243 кДж/моль), ²B₁ (равносторонний треугольник, 236 ккал/моль) и ²A₁ (равносторонний треугольник, 233 кДж/моль) являются почти вырожденными. Проведен частичный колебат. анализ. Сделан вывод, что молекула является очень гибкой и способной к псевдовращению (барьер < 10 кДж/моль), аналогично тримерам щелочных металлов и Cu.

В. Л. Лебедев

М.П.

Ф. 1988, 18, №5

Al_n

$n=2-6, 13$

М.П.

ф. 1988, 18, № 2

Ом. 27734

1987

2 Д160. Небольшие кластеры Al. II. Структура и связь в Al_n ($n=2-6, 13$). Small Al clusters. II. Structure and binding in Al_n ($n=2-6, 13$). Pettersson Lars G. M., Bauschlichre Charles W., Jr., Halicioglu Timur. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 4, 2205—2213 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с использованием псевдопотенциала, описанного ранее (см. ч. 1, реф. 2Д159), в базисе гауссовых ф-ций 5s5p2d/3s3p2d с учетом взаимодействия одно- и двукратно возбужденных конфигураций и поправкой на высшие конфигурации, а также по схемам неограниченного конфигурац. взаимодействия и связанного парного функционала исследовано электронное строение Al_n $n=2-6, 13$ в различных геометрических и электронных состояниях. Приведены равновесная геометрия, энергии атомизации. Обнаружено, что для $n=2-5$ наиболее стабильны плоские структуры, для $n=6$ — октаэдрическая, для $n=13$ — икосаэдрическая и для $n=6, 13$ плоские струк-

туры близки по энергии к оптимальным. Обнаружено, что данные упрощенного описания с использованием потенциалов двух- и трехчастичных взаимодействий хорошо согласуются со структурными и энергетич. данными полных расчетов.

В. Л. Лебедев

ант.
снз

Al_n^+

$$n = 3 \div 26$$

(9)

1987

106: 220172e Collision induced dissociation of metal cluster ions: bare aluminum clusters, Al_n^+ ($n = 3-26$). Jarrold, Martin F.; Bower, J. Eric; Kraus, J. S. (AT and T Bell Lab., Murray Hill, NJ 07974 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(7), 3876-85 (Eng). The collision induced dissociation was studied of Al clusters, Al_n^+ ($n = 3-26$), by Ar, at a center of mass collision energy of 5.25 eV, using a low energy ion beam app. Product branching ratios and collision induced dissociation cross sections are presented and discussed. The main product is Al^+ for the smaller clusters and Al_{n-1}^+ for the larger ones. The cross sections rise to a peak at $Al_6^+-Al_9^+$ and then decrease with increasing cluster size. Cross sections for Al_7^+ , Al_{13}^+ , Al_{14}^+ , and Al_{23}^+ are significantly smaller than their neighbors. A crude kinetic model is used to derive approx. cluster ionization potentials from the product branching ratios. The IPs (ionization potentials) initially rise with cluster size, peak at Al_6^+ and then decrease. The IP of Al_7 is particularly low and there is a sharp drop in IP at Al_{14} where the IP falls below that of the atom. The results suggest that the dissociation energies increase for the larger clusters and there is evidence that Al_7^+ , Al_{13} , Al_{13}^+ , Al_{14}^+ , and Al_{23}^+ have enhanced stability. The results are compared to the predictions of the

C.A. 1987, 106, N26

electronic shell model which can account for some of the results b.
predicts addnl. features which are not obsd.



($n=3-26$)

Om. 29181

1987

13B4172. Детальное изучение реакций между селек-
тированными по размеру ионными кластерами алюми-
ния, Al_n^+ ($n=3-26$), и кислородом. A detailed study
of the reactions between size selected aluminum cluster
ions, Al_n^+ ($n=3-26$), and oxygen. Jarrold M. F.,
Bower J. Eric. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 10, 5728—
5738 (англ.)

С помощью сдвоенного квадрупольного масс-спектро-
метра с электростатич. энергетич. анализатором изуче-
ны р-ции ионных кластеров Al_n^+ ($n=3-26$) с O_2 при
~~энергии соударений 1,2 и 4,2 эВ.~~ Металлич. кластеры
 Al_n получали методом импульсного лазерного испаре-

Х. 1988, 19, N 13.

ния алюминиевого стержня в потоке гелия, охлаждаемого до т-ры -130°C . Ионизация кластеров осуществлялась электронами с энергией 2—3 кэВ. Получено, что полные сечения р-ции растут с увеличением числа атомов n примерно в соответствии с размером частиц. Основными продуктами являются Al_{n-4}^{+} , Al_{n-5}^{+} , Al_{n-6}^{+} и Al^{+} . Наличие кислорода зарегистрировано лишь в очень небольшом кол-ве продуктов. Предполагается, что р-ция идет через хемосорбцию O_2 с последующим быстрым отрывом двух молекул Al_2O . Осколок Al_{n-4}^{+} может далее диссоциировать, давая Al_{n-5}^{+} , Al_{n-6}^{+} и Al^{+} . Из энергетич. расчетов по теории Райса—Рамспергера—Касселя—Маркуса делается вывод, что молекулы Al_2O уносят с собой значит. часть энергии.

Н. И. Бутковская

Al₃

1987

2 10 Б1036. Поверхности потенциальной энергии низлежащих состояний тримера алюминия. Potential energy surfaces of low-lying states of the aluminum trimer. Pacchioni G., Fantucci P., Koutecký J. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 142, № 1—2, 85—91 (англ.)

Методами ССП и конфигурац. взаимодействия (КВ) с учетом всех одно- и двукратных возбуждений относительно нескольких исходных конфигураций рассчитаны Пв потенциальной энергии низлежащих состояний кластера Al₃. Использован базис ГФ [4s4p/2s2p], дополненный диффузными s и p ф-циями и поляризац. d-ф-цией. Согласно расчету КВ 4 нижние электронные состояния ⁴B₁, ⁴A₂, ²B₁ и ²A₁ почти вырождены. Равновесная геометрия кластера в состояниях ⁴B₁ и ⁴A₂ отвечает равновесному треугольнику с углами 55,7 и 71,2° соотв., а в состояниях ²B₁ и ²A₁ — почти равностороннему треугольнику. Основным состоянием найдено ⁴B₁, однако Пв потенциальной энергии квартетных

М.П.

X. 1988, 19, N10

состояний пересекаются и разность энергии между состояниями весьма мала. Сделан вывод, что кластер является нежесткой системой, в к-рой возможно псевдовращение с потенциальным барьером в 10 кДж/моль.

Н. В. Харчевникова

Al_n

$(n=2-6)$

М.П.

DM 2 + 734

1987

5 Б1028. Малые кластеры Al. II. Структура и связь в Al_n ($n=2-6,13$). Small Al clusters. II. Structure and binding in Al_n ($n=2-6,13$). Pettersson Lars G. M., Bauschlicher Charles W., Jr., Halicioglu Timur. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 4, 2205—2213 (англ.)

Методами ССП и конфигурац. взаимодействия оптимизированы структурные параметры и вычислена относит. стабильность кластеров Al_n ($n=2-6$). Аналогичные расчеты для икосаэдрич., гексагон., гранецентр. и двух плоских конформаций кластера Al_{13} проведены в приближении ССП. Использованы расширенные базисы гауссовых ф-ций. Наиболее низкоэнергетич. структуры кластеров Al_4 и Al_5 найдены плоскими. Основное состояние Al_6 соответствует октаэдрич. структуре. В кластере Al_{13} основное состояние отвечает икосаэдрич. структуре, а электронные состояния кластера с плоской структурой имеют низшие энергии возбуждения. Структура и стабильность кластеров исследованы в

X. 1988, 19, N5

рамках параметризованного метода, использующего двух- и трехчастичные Пт взаимодействия Леннарда—Джонса и Аксильрода—Теллера. Результаты этих исследований хорошо согласуются с данными неэмпирич. расчетов.

И. А. Тополь



Al₃

(Om. 28198) 1987

номер. групп.
низких состояний
состояний

108: 62877y Potential energy surfaces of low-lying states of the aluminum trimer. Pacchioni, Gianfranco; Fantucci, Piercarlo; Koutecky, Jaroslav (Dip. Chim. Inorg. Metall., Centro CNR, Univ. Milano, 20133 Milan, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 142(1-2), 85-91 (Eng). The potential energy surfaces for the low-lying states of the Al₃ mol. were investigated by Hartree-Fock CI calcs. Four states are candidates for the ground state: an acute isosceles triangle ⁴B₁, an obtuse isosceles triangle ⁴A₂, and two nearly equilateral triangles ²B₁ and ²A₁. The ground state is ⁴B₁, but because of the very small energy sepg. the 4 states they can be considered as nearly degenerate. A partial vibrational anal. is carried out considering only the totally sym. modes of the C_{2v} point group in order to show the different nature of the corresponding potential energy surfaces.

c.A. 1988, 108, v8

Al_n

Im. 27734

1987

$n = 2 \div 6, 13$

107: 184025u Small aluminum clusters. II. Structure and binding in (aluminum)_n ($n = 2-6, 13$). Pettersson, Lars G. M.; Bauschlicher, Charles W., Jr.; Halcioğlu, Timur (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(4), 2205-13 (Eng). The structure and stability were studied of Al clusters contg. up to 6 atoms using correlated wave functions and

extended basis sets. The lowest energy structure is planar for Al₄ and Al₅, but 3 dimensional for Al₆. The icosahedral, hcp., fcc., and 2 planar structures of Al₁₃ were considered at the SCF level. The lowest energy structure is the icosahedron, but the planar structures are fairly low lying even in this case. A simplified description using 2- and 3-body interaction potentials agrees well with the ab initio structures and binding energies.

структура
и стабильн.
теор. расч.

с. А. 1987, 107, ~20

Al₃

О.М. 29666

1988

18 Б1210. Спектроскопические исследования тримера алюминия, охлажденного в струе. Spectroscopic studies of the jet-cooled aluminum trimer. Fu Z., Lemire G. W., Hamrick Y. Mi, Taylor S., Shui Jin-Cheng, Morse M. D. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 6, 3524—3531 (англ.)

Методом резонансной двухфотонной ионизации с последующим масс-спектрометрич. детектированием образующихся ионов исследованы молекулы Al₃, образующиеся при лазерном испарении алюминия в импульсную сверхзвуковую струю. Спектр Al₃ наблюдался в обл. 520—610 нм с резким обрывом при 19 378 см⁻¹. Верхний предел энергии диссоциации D₀ (Al₂—Al) оценен в 2,40 эВ. Спектр представляет собой несколько прогрессивных полос, связанных в основном с симм. вал. кол. на фоне квазинепрерывного поглощения, интенсивность к-рого монотонно возрастает в коротковолновой обл. Поскольку абс. колебат. нумерация полос не определена, предполагено, что первая из наблюдаемых полос,

М.П.

X. 1988, 19, N 18

$16\,609,9\text{ см}^{-1}$ есть переход 0_0^0 и в этом предположе-
 нии из анализа колебат. структуры получены след. мо-
 лек. постоянные (в см^{-1}): $\nu_e = 16434,23$, $\omega_1' = 273,17$,
 $x_{11}' = -1,29$, $\omega_2' = 204,74$, $\omega_1'' = 132,60$. Для каждой из
 полос определено время жизни τ . В прогрессиях
 величина τ монотонно убывает с ростом верхнего коле-
 бат. квантового числа и лежит в пределах $\sim 20\text{—}$
 100 мкс . Необычно большое время жизни ($24\text{—}35\text{ мкс}$)
 квазиконтинуума указывает, что он связан с прямым
 возбуждением в обл. потенциальной Пв возбужденного
 электронного состояния сильно искаженной по отноше-
 нию к потенциальной Пв основного электронного со-
 стояния.

В. М. Ковба

Al_n^-

1988

(97C)

109: 179641d Photoelectron spectroscopy of jet-cooled aluminum cluster anions. Gantefor, G.; Gausa, M.; Meiwes-Broer, K. H.; Lutz, H. O. (Fak. Phys., Univ. Bielefeld, D-4800 Bielefeld, 1 Fed. Rep. Ger.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1988, 9(3), 253-61 (Eng). Al_n^- clusters were produced by laser vaporization without addnl. ionization and cooled by supersonic expansion. UPS from mass-identified anion bunches ($n = 2-25$) were detached by laser light ($h\nu = 3.68$ eV) and underwent energy anal. in a magnetic bottle-type time-of-flight spectrometer. The measurements provided information about the electronic excitation energies from ionic ground states to neutral states of the clusters. In contrast to bulk Al these cluster UPS partially had resolved bands which originate from low-lying excited bands. For small clusters, esp. the Al_2^- and Al_3^- , quantum chem. calcs. were compared to the measurements. The electron affinity size dependence of larger clusters showed evidence for shell effects.

C. A. 1988. 109, N 20.

Al_n

1988

$n \leq 6$

109: 27858s A mass spectrometric study of small aluminum clusters formed by a single-state free-jet expansion. Hawley, J. H.; Ficalora, P. J. (Cent. Integr. Electron., Rensselaer Polytech. Inst., Troy, NY 12180-3590 USA). *J. Appl. Phys.* 1988, 63(3), 979-80 (Eng). Small Al_n clusters ($n \leq 6$) formed in a free-jet expansion were obsd. Species of $n > 2$ have never been obsd. above a Knudsen cell by mass spectrometry. Since the pressure of the Al vapor in the crucible is subsatd., a heterogeneous nucleation mechanism is proposed.

C. A. 1988, 109, NY

Al_n

1988

109: 27906f Heterogeneous formation of small aluminum clusters. Hawley, J. H.; Ficalora, P. J. (Cent. Integr. Electron., Rensselaer Polytech. Inst., Troy, NY 12180-3590 USA). *J. Appl. Phys.* 1988, 63(8, Pt. 1), 2884-5 (Eng). The authors have previously reported that small aluminum clusters (Al_n; $n \leq 6$) were obsd. in a free jet expansion through a graphite nozzle. The length and the diam. of that nozzle was 1.5 mm. The results of those expts. led them to postulate that the clusters formed as the result of a heterogeneous process. Expts., utilizing a W nozzle with a 1.5 mm length and diam. showed no cluster formation. Further, expts. using a graphite nozzle with a larger surface area (1.5 mm diam, 48.0 mm length) produced clusters with $n \leq 10$. These results are presented in support of a heterogeneous formation process.

образование
кластер.

C. A. 1988, 109, N 4

Al_n
 $3 \leq n \leq 10$

мор.
раств.
(суперкрит.
и жидкост.)

1988
Jug Karl, Schluff
Hans Peter, et al.

J. Comput. Chem.
1988, 9(8), 803-9.

●
(see. Si_n ; III)

Al₃

1988

Rodger Alison,
Johnson Brian F. G.

inorg.
paper

Inorg. Chim. Acta
1988, 146 (1), 37-53.

(see Al₂; III)

Aly

1988

Rodger Alison,
Johnson Brian F. G.

meop.
paerem

Inorg. Chim. Acta
1988, 146 (1), 37-53.

(cer. Al_2 ; III)

Al₅

1988

Rodger Alison,
Johnson Brian F. G.

meop.
parim

Inorg. Chim. Acta
1988, 146 (1), 37-53.

(see Al_2 ; III)

Al₆

1988

Rodger Alison,
Johnson Brian F. G.

meop.
pacrim

Inorg. Chim. Acta
1988, 146 (1), 37-53.

(see Al₂; III)

Al₃

(OM 29337)

1988

Tse J.,

J. Mol. Struct. Theo-
chem., 1988, 165,
N 1-2, 21-35.

основн. и
низкие
возбужден-
ные состоян.,
теор. расчёт

1989

Al_n
КЛАСТЕРЫ

111: 160710v Energy barriers and structural transitions of small aluminum clusters. Halicioglu, T. (Dep. Mater. Sci. Eng., Stanford Univ., Stanford, CA 94305 USA). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1989, 12(1-4), 73-5 (Eng). Energy barriers between low-lying configurational states were calcd. for several small Al clusters. Calcns. were carried out considering a model potential comprising 2- and 3-body interactions. Parameters used in this potential energy function were evaluated from fits to high-level ab-initio calcns. for Al clusters. Energy barriers sepg. low-lying configurations were in varying heights. The results indicate that isomeric transformations between several low-lying high-symmetry forms of small Al clusters are quite likely and may take place at relatively low temps.

Структура

с. А. 1989, 111, N 18

Al_x

$x = 4-6$

ср. 1989, № 10

1989

7 10 Д56. Конфигурации изомеров и седловых точек для небольших кластеров Al. Isomers and saddle point configurations of small Al clusters / Halicioglu T., Pamuk H. O. // Surface Sci.— 1989.— 215, № 1—2.— С. 272—280.— Англ.

С помощью модельной потенц. ф-ции, параметры которой откалиброваны по данным точных неэмпирич. расчетов Al₂ и Al₃, исследованы различные структуры и седловые точки для кластеров Al_x, $x = 4-6$. Обнаружено, что для указанных систем наиболее стабильны ромбическая, плотноупакованная и треугольная плотноупакованная структуры соответственно. При этом энергетический активационный барьер для перехода от трехмерной структуры к двумерной для $x = 5$ и 6 оказывается больше, чем для перехода между двумя трехмерными структурами, даже если двумерная структура стабильнее трехмерной. В целом активационные барьеры переходов между высокосимметричными трехмерными структурами малы, что указывает на возможность изомеризации в газовой фазе при низких температурах.

В. Л. Лебедев

1989

 Al_n^+ $(n = 7 \div 17)$

Do

X. 1990, N 10

10 Б4456. Кинетика фотодиссоциации кластерных ионов алюминия. Определение энергий диссоциации кластеров. Photodissociation kinetics of aluminum cluster ions: Determination of cluster dissociation energies / Ray U., Jarrold M. F., Bower J. E., Kraus J. S. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 5.— С. 2912—2921.— Англ.

В области энергий фотонов $h\nu = 1,88—6,99$ эВ зарегистрированы спектры фотодиссоциации (ФД) выделенных по массе кластерных ионов (КИ) Al_n^+ ($n = 7—17$), полученных из факела плазмы импульсного лазерного испарения Al-мишени под действием излучения 308 нм эксимерного лазера на XeF в потоке буф. газа He. Измерены также времена жизни фотовозбужденных КИ. Наблюдавшиеся продукты ФД КИ идентичны продуктам изучавшейся ранее столкновительно-индуцированной диссоциации этих же КИ, хотя имеются малые различия в распределениях продуктов. Наименьшей энергией диссоциации КИ Al_7^+ и Al_9^+

обладает канал распада на $Al^+ + Al_{n-1}$, а для КИ Al_8^+ и $Al_{10}^+ - Al_{17}^+$ таким каналом является распад на $Al_{n-1}^+ + Al$. В предположении отсутствия активац. барьера для диссоциации отсюда следует, что при $n=6$ и 8 Пт ионизации Al_n выше, чем Пт ионизации Al , а при $n=7$ и 9—16 имеет место обратное соотношение. Путем сравнения измеренных времен жизни фотовозбужденных КИ с результатами расчетов по теории Райса — Рамспергера — Касселя — Маркуса определены энергии диссоциации КИ. Они увеличиваются с ростом n , обнаруживая значит. осцилляции при $n=7-8$ и $n=13-15$. Из этих результатов и лит. данных для КИ меньших размеров определены когезионные энергии КИ. При $n>6$ эти величины находятся в хорошем согласии с предсказаниями на основе простой модели, включающей объемную когезионную энергию и поверхн. энергию кластера. Библ. 44.

В. Е. Скурат

ацтек.
изуч

Алн
Краснень

Om 32159

1989

Al
(уеман.)

Pettersson L.G.M.,
Bauschlicher Ch.W., Jr.,

модем.
радем
спрухм. (re)
и жердем.

Chem. Phys., 1989,
131, 2, 3, 267-
279.

Al_n

[Am ~~33~~ 367]

1989

(Al₇-Al₁₇) Ray U., Farrold M.F.
et al.,

Do J. Chem. Phys. 1989,
91, N 5, ● 2912-2921

Al₂

[Om. 34 666]

1990

(g)

Harrington J.E., Weisshaar J.C.,

Al₂⁺

(X^{2Σ_g⁺})

J. Chem. Phys. 1990, 93,
N1, 854-855

Adiabatic ● ionization

potential of H_2 and vibrational spectrum of the $X^2\Sigma_g^+$ state of H_2^+ .

Al_n
(n < 17)

Do

113: 123632s Photodissociation of metal cluster ions. Dissociation energies and optical spectroscopy. Jarrold, Martin F.; Ray, Urmi; Bower, J. Eric; Creegan, Kathleen M. (AT and T Bell Lab., Murray Hill, NJ 07974 USA). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1990, 86(13), 2537-43 (Eng). Dissocn. energies and optical absorption spectra of metal clusters were measured from photodissocn. studies with a tunable dye laser. The dissocn. energies of Al clusters with up to 17 atoms were detd. from measurements of the dissocn. rates of photoexcited clusters. The dissocn. energies show an overall increase with cluster size, but there are large oscillations around the electronic shell closings. The measured dissocn. energies are in poor agreement with the results of a no. of recent theor. calcs., all of which underestimate the binding energies. Optical absorption spectra were recorded for Cu clusters by photodissocn. The spectrum for Cu₄⁺ contains 10 electronic transitions, most of which show vibrational fine structure. Some of the transitions can be correlated with an interband transition in bulk Cu, suggesting that the incipient band structure of the bulk is apparent even in a cluster contg. as few as 4 atoms.

(4) ☒
C. A. 1990, 113, N 14

Cu₄⁺ (7pekmpOH.)
(enekmp)

Вз

От 34334

1990

1 Д87. Стабильность и поверхности потенциальной энергии трех низколежащих электронных состояний Al_3 . Stability and potential energy surface of the three low lying electronic states of Al_3 / Tse John S. // J. Chem. Phys.— 1990.— 92, № 4.— С. 2458—2494.— Англ.

С помощью теории возмущений 2-, 3- и 4-го порядков рассчитаны поверхности потенц. энергии электронных состояний 2A_1 , 4A_2 и 4B_1 молекулы Al_3 . Найдены параметры равновесной геометрич. конфигурации, частоты колебаний и спектроскопич. постоянные для низших состояний 2A_1 и 4A_2 , которые являются связанными, в то время как состояние 4B_1 является переходным состоянием для псевдовращения. Расчеты, проведенные при оптимизированных значениях геометрич. параметров методом связанных кластеров с учетом одно- и трехкратных замещений, предсказывают следующий порядок стабильности этих состояний: $^2A_1 \approx ^4A_2 < ^4B_1$.

С. А. Богданова

стабильность,
поверхн.
потенц.
энергии

Ф. 1991, № 1

Al_n
 $n < 80$

1990

113: 65501k: Electronic shell structure of Group IIIA metal atomic clusters. Schriver, Kenneth E.; Persson, John L.; Honea, Eric C.; Whetten, Robert L. (Solid State Sci. Cent., Univ. California, Los Angeles, CA 90024-1569 USA). *Phys. Rev. Lett.* 1990, 64(21), 2539-42 (Eng). Ionization potentials of Al_n and In_n clusters ($n < 80$) in supercooled beams have been measured by photoionization spectroscopy. The abrupt leveling near $n = 5$ of the initial linear increase in ionization potentials and the subsequent gradual approach to the classical metallic sphere model are consistent with a simple picture of s-p band hybridization. For $n > 6$, there is clear evidence of electron-shell filling, yet substantial deviations from shell-model predictions remain. Crystal-field effects are considered the most probable source of symmetry breaking and give insight to cluster structure.

y;

(4) $\boxtimes$

In_n

$n < 80$

C.A. 1990, 113, n 8

Al₃

от 34334

1990

23 Б1034. Стабильность и поверхность потенциальной энергии для трех низколежащих электронных состояний Al₃. Stability and potential energy surface of the three low lying electronic states of Al₃ / Tse John S. // J. Chem. Phys.— 1990.— 92, № 4.— С. 2488—2494.— Англ.

М.П.

Различными вариантами теории возмущений Мёллера—Плессета с орбиталями неограниченного метода Хартри—Фока с учетом экстраполяц. поправок определены геометрич. конфигурации стационарных точек для трех низших состояний молекулы Al₃: ²A₁, ⁴A₂ и ⁴B₁. Во всех трех случаях равновесные конфигурации — треугольные симметрии C_{2v} с углом 54—75° и стороной 2,6—2,9 А. В наилучшем приближении (метод связанных кластеров с базисом [6s5p2d1f]) энергия первого квантового состояния ⁴A₂ выше энергии основного состояния ²A₁ на 0,92 ккал/моль, а энергия след. состояния ⁴B₁ еще на 5,92 ккал/моль выше. После ап-

Х. 1990, № 23.

проксимации рассчитанных точек на потенциальных ПВ полиномами от внутр. координат определены кватичные силовые поля. Найдено, что колебат. спектр Al_3 д. б. существенно разным для состояний 2A_1 и 4A_2 (состояние 4B_1 отвечает седловой точке). Обсуждены причины, приводящие к разным заключениям о мультиплетности основного состояния Al по данным о спектрах ЭПР в матрицах и по магнитному отклонению сверхзвукового пучка.

А. В. Немухин



1991

Al_n

(n ≤ 55)

IP, Ae,
энергетика
раствора

115: 263829c Structure and dynamics of aluminum clusters. Bernholc, J.; Yi, Jae Yei; Oh, Dirk J.; Sullivan, D. J. (Dep. Phys., North Carolina State Univ., Raleigh, NC 27695-8202 USA). *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 1991, 206(Clusters Cluster-Assem. Mater.), 209-20 (Eng). The energetics and structures of metallic clusters contg. up to 55 atoms are studied by the Car-Parrinello (quantum-mol. dynamics) method with Al chosen as a paradigm. The structural energy differences between small cluster (icosahedral) and bulk (fcc) structures are surprisingly small, indicating that the icosahedron-fcc structural transition can occur very early in Al clusters. The computed IPs and EAs differ by less than 0.1 eV for weakly annealed cuboctahedral and icosahedral clusters, making the structural identification on the basis of IP and EA measurements very difficult. The quantum-mech. results are also used to develop a classical potential for long-time mol. dynamics simulations of large clusters.

C.A. 1991, 115, N24.

Al_4^+

1991

Boldyrev A. I., Schleyer
Paul V. R.

$Ze, <, Vi,$

J. Am. Chem. Soc.

Do
paerim

1991, 113 (24), 9045-

● 9054.
(see Al_3O ; III)

Al_3^+ Boldyrev A.I., 1991
Schleyer Paul V.R.

$Re, <, Vi,$ J. Am. Chem. Soc. 1991,
113 (24), 9045-9054.

Do pocrēm

(cu. ● Al_3O ; III)

Alⁿ⁻

n=13

(OM-35344)

1991

Nakajima A., Kishi T.,
et al.,

Chem. Phys. Lett.,
1991, 177, N 3, 297-300

Mass distributions of alicyclic

num negative cluster
ions and their binary
cluster ions mixed with
a carbon atom.

Aln

1991

117: 76923h Production of metal cluster beams by laser vaporization. Pellarin, M.; Vialle, J. L.; Lerme, J.; Valadier, F.; Baguenard, B.; Blanc, J.; Broyer, M. (Lab. Spectrom. Ionique Mol., Univ. Claude Bernard, Lyon I, F-69622 Villeurbanne, Fr.). *J. Phys. IV* 1991, 1(C7, Int. Conf. Laser M2P, 2nd, 1991), C7/725-C7/728 (Eng). Using laser vaporization technique and std. time-of-flight (TOF) spectrometric methods, ionization potentials (IP) of Al and Fe clusters were measured in extensive size ranges.

(9)

(металлического
испарения)

(11) Fe_n

C. A. 1992, 117, N 8

1991

Al_n
 Al_n^+
 $(n \leq 6)$

17 Б1037. Влияние вырождения зон на электронную структуру: применение к кластерам алюминия. Effect of the band degeneracy on the electronic structure: Application to the aluminum clusters / Tarento René-Jean, Joyes Pierre // J. Chem. Phys.— 1991.— 95, № 9.— С. 6734—6737.— Англ.

Модифицированным методом Гуцвиллера изучено влияние вырождения зон на электронную структуру димера, описываемого гамильтонианом Хаббарда. Построены кривые зависимости энергии димера от параметра внутриаомной корреляции U и обнаружено, что поведение s -зоны резко отличается от поведения p -, d - и f -зон. Метод распространен на кластеры алюминия Al_n и Al_n^+ ($n \leq 6$). Найдено, что применяемая грубая модель воспроизводит тенденции энергий связи и ионизации, наблюдаемые в неэмпирич. расчетах. Переход от синглета к триплету в Al_n происходит при $n=4$. В. Я. Беспалов

X. 1992, N 17

1992

117: 198896x Structural transitions in metal clusters. Bernholc, J.; Yi, Jae Yel; Sullivan, D. J. (Dep. Phys., North Carolina State Univ., Raleigh, NC 27695-8202 USA). *Faraday Discuss.* 1991 (Pub. 1992). 92(Chem. Phys. Small Met. Part.), 217-28 (Eng). The methods for first-principles calcn. of the structure and dynamics of clusters have now progressed to a point where clusters contg. ca. 50 non-transition-metal atoms can be studied. We studied the energetics of structural transformations in 13- and 55-atom Al clusters, which can assume both perfect icosahedral and cuboctahedral structures. Using the Car-Parrinello formalism, we found Al_{13} has a unique structure, a slightly distorted icosahedron, but Al_{55} has several inequivalent but energetically nearly degenerate structures. The degeneracy in Al_{55} is due to the short range of the effective interat. interactions, and should lead to floppiness at finite temps. An accurate procedure for calcg. ionization potentials (E_i) and electron affinities (E_{ea}) within the Car-Parrinello formalism was developed and applied to Al clusters. It appears that at least for some clusters, most notably Al_{55} , E_i and E_{ea} are very similar for different structural models. A formulation and the first tests of a new multigrid-based method for real-space electronic structure calcns. are described. This method should make possible calcns. similar to the above for clusters contg. transition metal and/or first-row atoms.

(mop. paper)

C.A. 1992, 117, N 20

Al_n

1992

$n = 3 \div 55$

116: 221895m Molecular-dynamics computer simulation of aluminum clusters (Al_n; $n = 3$ to 55). Empirical many-body potential energy function calculation. El-Bayyari, Z.; Erkoç, S. (Dep. Phys., Middle East Tech. Univ., Ankara, Turk. 06531). *Phys. Status Solidi B* 1992, 170(1), 103-11 (Eng). The structural stability and energetics of Al_n ($n = 3$ to 55) clusters are investigated by using a recently developed empirical many-body potential energy function which contains two- and three-body at. interactions. Mol.-dynamics technique is employed in the simulation. The energetically most stable structures of Al clusters are in compact distorted buckled form.

структура,
стабильн.,
теор. расчет

C. A. 1992, 116, N 22

Al_n

1992

$$n = 2 \div 8$$

теоретический
исследование
составляющих

116: 113855q Electronic structure calculations of small aluminum (Al_n) ($n = 2-8$) clusters. Bastug, T.; Sepp, W. D.; Fricke, B.; Heinemann, D.; Kolb, D. (Dep. Phys., Univ. Kassel, W-3500 Kassel, Germany). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1992, 22(3), 641-4 (Eng). The electronic states of small Al_n ($n = 2-8$) clusters have been calcd. with a relativistic ab-initio MO-LCAO Dirac-Fock-Slater method using numerical at. DFS wave-functions. The excitation energies were obtained from a ground state calcn. of neutral clusters, and in addn. from neg. clusters charged by half an electron in order to account for part of the relaxation. These energies are compared with exptl. photoelectron spectra.

C. A. 1992, 116, N 12

Al⁺

DA 36 855

1992

Cha Chia-Yen,

Garteförz G., et al.

Ber. Bunsenges. Phys.

Chem. 1992, 96, N 9,

1223-1227.

Photoelectron Spectroscopy

qomo-
teemp.
cremp.

of Clusters and Adsorbates
on Clusters.

Al_n

1992

118: 176221s Structure and dynamics of intermediate size aluminum clusters. Debiaggi, S.; Caro, A. (Paul Scherrer Inst., 5232 Villigen, Switz.). NATO ASI Ser., Ser. C 1992, 374 (Phys. Chem. Finite Syst.: Clusters Cryst., Vol. 1), 375-80 (Eng). The authors use mol. dynamics with a semiempirical quantum chem. model at a Hartree level of approxn. to predict the structure of Al_n clusters. The relative simplicity of this model allows us to relax up to few hundred atoms. We find that icosahedral and cuboctahedral symmetries are almost degenerate, but that for the cases where we performed annealing, deeper min. exist without symmetry.

см. примеч.,
мод. расч.

с. А. 1993, 118, № 18

Al₁₄₇

1992

118: 67178n Structural study of aluminum cluster (Al₁₄₇).
Debiaggi, S.; Caro, A. (Paul Scherrer Inst., 5232 Villigen, Switz.).
Phys. Rev. B: Condens. Matter 1992, 46(11), 7322-5 (Eng).
The energetics and structure of several at. configurations of Al₁₄₇ are
studied in the framework of semiempirical quantum chem. via mol.
dynamics and simulated annealing. The structures corresponding to
energy min. correspond to disordered configurations without symmetry.
This result extends recent reports on similar conclusions for Al₁₃ and
Al₁₈.

(смаф. и смук
мупа)

с.А. 1993, 118, 28

Al₃

[Am. 37 175]

1992

Hamrick Y.M., VanZee R.J.,
Weltner W., Jr.,

creep

to

Hamrick

J. Chem. Phys., 1992, 96, N3,
1767 - 1775

Electron-spin 1230 ● nance and ground

Hates to the boron and aluminum
timers.

Хачинян АЛ

1992

118: 45918b Structure and bonding in aluminum and gallium clusters. Jones, R. O. (Inst. Festkoerperforsch., Forschungszent. Juelich, D-5170 Juelich, Germany). *Lect. Notes Phys.* 1992, 404(Nucl. Phys. Concepts Study At. Cluster Phys.), 305-11 (Eng). A review with 11 refs. The geometrical structure is one of the most basic properties of any aggregate of atoms. In principle, it is easy to calc., as one "only" has to find the structure with the lowest total energy. This is seldom practicable, as we must both calc. the energy surfaces and avoid unfavorable min. in them. We outline a method that addresses both problems, and show that it leads to interesting and unexpected results for clusters of aluminum and gallium up to $n = 10$.

(обзор)

Хачинян БА

⑦



C.A. 1993, 118, N 6

Al_n

1992

$n = 6, 8, 13, 23, 55$

118: 67244f A first principles investigation of aluminum clusters: geometries, reactivities, stabilities, and polarizabilities. Pederson, Mark R. (Complex Syst. Theory Branch, Nav. Res. Lab., Washington, DC 20375-50000 USA). NATO ASI Ser., Ser. C 1992, 374 (Phys. Chem. Finite Syst.: Clusters Cryst., Vol. 2), S61-6 (Eng). The local-spin-d. formalism was used to predict equil. geometries, cohesive energies, and electron affinities for a variety of aluminum clusters ($N = 6, 8, 13, 23$, and 55). For a 13-atom cluster, the icosahedral geometry is energetically more stable than the octahedral geometry. In contrast, for the 55-atom cluster, octahedral symmetry is preferred over icosahedral symmetry. Of the moderate sized clusters that were studied, the 13- and 23-atom clusters exhibit large electron affinities.

структура,

Ае, меоп. прам

С.А. 1993, 118, №8

Al_n

1992

118: 176229a Measurement of ionization potentials for aluminum (Al_n) and iron (Fe_n) clusters. Pellarin, M.; Vialle, J. L.; Lerme, J.; Valadier, F.; Baguenard, B.; Blanc, J.; Broyer, M. (Lab. Spectrom. Ionique Mol., Univ. Lyon I. 69622 Villeurbanne, Fr.) NATO ASI Ser., Ser. C 1992, 374 (Phys. Chem. Finite Syst.: Clusters Cryst., Vol. 1), 633-8 (Eng). Using laser vaporization technique and std. Time-Of-Flight (TOF) spectrometric methods. Ionization Potentials (IP) of aluminum and iron clusters have been measured in extensive size ranges. These results are compared with recently published exptl. works. For aluminum clusters, our results are extended to larger sizes and reveal new structures. For both types of clusters, the mass spectra recorded systematically for ionization energy just above the threshold reveal clear structures due to small effects in the ionization potential or in the ionization cross section. These effects are discussed in terms of the self consistent Spherical Jellium Background Model (SJBm).

масс-спектр.
и энергии.

(9)

(11) 

C.A. 1993, 118, N 18

Fe_n

Al₁₃

1992

Rothlisberger U.,
Andreoni W., et al.,

смакнута, *J. Chem. Phys.*, 1992,
неоп. 96 (2), 1248-56
рачуна

(all. Na₁₃●; III)

Al_n

1993

$n = 2, 6, 12, 33, 55, 147$

118: 132568 First-principles, local-orbital, density-functional study of aluminum clusters. Yang, Sang H.; Drabold, David A.; Adams, James B.; Sachdev, Amit (Phys. Dep., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1993, 47(3), 1567-76 (Eng). Ab-initio, mol-dynamics simulations, of small aluminum clusters, Al_n of $n = 2-6$, and 12, 13, 55, and 147, were done by using the d.-functional, local-orbital method of O. F. Sankey and D. J. Niklewski (1989). Equil. structures and total energies were calcd., and compared with expt. and the predictions of other calcs. The min. energy structures of Al₁₃ and Al₅₅ were found to be distorted icosahedrons; whereas, that of Al₁₄₇ appeared to be a slightly distorted cubo-octahedron. The d. of vibrational states was calcd. for most of these clusters. Embedded-atom-method calcs. were also done for Al₁₃, Al₅₅, and Al₁₄₇; these calcs. were compared to the ab-initio calcs.

ab initio
param

C.A. 1993, 118, N14

Al_3

1994

Gonzales N.,
Simons J.

J. Chem. Phys. 1994,
101 (12), 10746-52.

сирьку.
З. еосі.
ab initio
раерім

( сс. Al_3 H; III)

Al₁₃

1994

структура,
стабильн.,
мер. расчет

(120: 253861w Reactivity of hydrogen with open and closed shell clusters. Khanna, S. N.; Jena, P. (Physics Department, Virginia Commonwealth University, Richmond, VA 23284-2000 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 218(4), 383-6 (Eng). By using self-consistent calcns. based on d.-functional theory, the authors demonstrated that clusters with reduced chem. reactivity can be designed by suitably varying their size and compn. Analogous to the rare gas atoms, clusters with closed electronic shells were found to be less reactive to gas mols. such as hydrogen; whereas, those with unfilled shells react strongly. This finding can form the basis for synthesizing a new class of cluster-assembled materials. Calcns. of mol. structures, binding energies, and electronic energy levels were done for Al₁₃, Al₁₂C, Al₁₃H, and Al₁₂CH clusters.



C.A. 1994, 120, N 20

$Al_n, Al_n^+,$
 $n=1, 5$

меоп. paper
ссылка,
смаф,
De, I, A

C.A. 1995, 123, N 8

Al_n

1995

123: 93903t Gaussian density-functional study for small neutral (Al_n), positive (Al_n^+) and negative (Al_n^-) aluminum clusters ($n = 2-5$). Calaminici, Patrizia; Russo, Nino; Toscano, Marirosa (Dipartimento Chimica, Universita della Calabria, I-87030 Arcavacata di Rende, Italy). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1995, 33(4), 281-8 (Eng). The structures and properties of Al_n, Al_n^+, Al_n^- ($n = 1, 5$) clusters have been investigated by using the Linear Combination of Gaussian Type Orbitals (LCGTO) method, considering Local (LSD) and Non Local (NLSD) Spin D. Approxns. and employing a Model Core Potential (MCP) that allows the explicit treatment of $3s^2 3p^1$ valence electrons. For each system different geometrical structures and electronic states have been considered. For Al_3, Al_3^+, Al_3^- the most stable geometry proved to be the equilateral triangle (D_{3h}). Al_4 and Al_4^+ prefer the rhombus (D_{2h}) structure, while the corresponding anion prefers the square (D_{4h}) one. The trapezoidal form (C_{2v}) is the most stable isomer for Al_5, Al_5^+ and Al_5^- clusters. The anal. of vibrational frequencies shows that these structures are min. in the potential energy surface. The binding energies (D_e), the adiabatic ionization potentials (IP) and electron affinities (EA), the chem. potentials or abs. hardnesses (η) and electronegativities (χ) have been computed. Results are in good agreement with the available exptl. data and the previous high level theor. computations.

Al_n^{ti}

$n = 2-6$

1994

121: 164355n Stability of charged aluminum clusters. Martinez, Ana; Vela, Alberto (Departamento de Quimica, Universidad Autonoma Metropolitana-Iztapalapa, Distrito Federal, Mex. 09340). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1994, 49(24), 17464-7 (Eng). An all-electron study on neutral, singly, and doubly charged Al_n clusters ($n = 2-6$) has been carried out within the Kohn-Sham formalism incorporating a gradient corrections to the exchange and correlation energy contributions self-consistently. Results on their equil. geometries, adiabatic and vertical ionization potentials, electron affinities, atomization energies, global hardness, and possible fragmentation channels are presented.

стабильность,
структура,
Al, Al_n^{ti}

и т.д.
теор. расчет

С.А. 1994, 121, N14

Al₆

[Am. 38192]

1995

Al₁₃

(красный)

Pascal de Sainte Claire,
Gilles H. Pestherpe,
and William L. Hase[†],

J. Phys. Chem. 1995, 99,
8147-8161.

Energy Transfer ● Dynamics in the

Collision-Induced Dissociation
of Al_6 and Al_3 Clusters.

Al₃.

Li, S.; Van Zee, R. J.;
et al., 1996

из в

лампы, Chem. Phys. Lett. 1996,
Di, кукле 262 (3, 4), 298 - 302.
торм. соот.

(all. b3;  III)

Al₁₃

1997

ab initio
pacem,
madness

129: 100305d Melting of Al₁₃ cluster: ab initio investigations.
✓ Kanhere, D. G.; Shah, Vaishali; Vichare, Abhijat (Department of Physics, University of Pune, Pune, 411 007 India). *Condens. Matter Theor.* 1996 (Pub. 1997), 12, 441-449 (Eng). Nova Science Publishers, Inc.. The authors used d.-based mol. dynamics to show that a finite-size silver cluster shows 3 distinct regions similar to Lennard-Jones clusters: solid-like, liq.-like, and solid-liq. coexistence.

CA 1998, 129, 18

Al₄

In 38 960 1997

127:40182h Achieving reliability of calculations for flat potential surfaces in density functional theory: the case of Al₄ and Al₄⁺. Martinez, Ana; Vela, Alberto; Salahub, Dennis R. (Dep. Chimie, Univ. Montreal, Montreal, PQ Can. H3C 3J7). *Int. J. Quantum Chem.* 1997, 63(2), 301-311 (Eng), Wiley. Harmonic frequencies obtained by finite-differences from nonlocal d. functional calcns. are presented for the ground states of Al₄ (neutral and cationic). The effect of varying the step size used in the finite-difference evaluation and the influence of the d. convergence threshold are discussed. Potential energy curves along the most important normal coordinate are shown. With these results, we found that for Al₄ the square and the rhombus min. are almost degenerate with each other, while for Al₄⁺, the rhombus is more stable and the square is a transition state.

Di, эммуна,
мис. павет

C. A. 1997, 127, N 3

Al₇, Al₁₃

1997

128: 160500c Photoionization mass spectrometric study of neutral bare aluminum clusters and aluminum-carbon mixed clusters. Ni, Guo-quan; Zhou, Ru-fang; Zhai, Hua-jin; Wang, Yu-zhu (Shanghai Inst. Optics Fine Mechanics, Chinese Acad. Scis., Shanghai, Peop. Rep. China 201800). *Chin. Phys. Lett.* 1997, 14(12), 901-904 (Eng), Chinese Physical Society. Photoionization time of flight mass spectra of bare aluminum and aluminum-carbon mixed clusters as well as a variety of oxygen- and oxygen-carbon-adducted aluminum clusters are recorded and assigned. The discontinuities in the mass abundance spectra

н. к
рекомб.
сп-ра,
фотоиониз.
жиз.

масс-
спектр.

□ ⊕ Al₇C

с.а. 1998, 128, N 13

1998

Al₃Al₃ -

Handwritten
 Al₃ -
 CCSD(T),
 ab initio

Handwritten
 Al₃ -
 CCSD(T)

CA 1998, 129, 114

✓ 129: 181625h Ab initio study for the low-lying electronic states of Al₃ and Al₃⁻: The photoelectron spectroscopy of Al₃⁻. Baek, Kyoung K.; Bartlett, Rodney J. (Department of Chemistry, Kang-Nung University, Kang-Nung, 210-702 S. Korea). *J. Chem. Phys.* 1998, 109(4), 1334-1342 (Eng), American Institute of Physics. The low-lying electronic states of Al₃ (²A₁, ²B₁, ⁴A₂, ⁴B₁, ²B₂, ²A₁, ⁴B₂, ⁶A₂) and Al₃⁻ (¹A₁, ³B₂, ³A₁, ³A₂, ³B₁, ⁵A₂) are studied by coupled-cluster methods with a [6s5p2d1f] basis set. The geometries and harmonic frequencies are calcd. by the coupled-cluster single double triple (CCSD(T)) correlation method with frozen core and virtual MOs. The energetic splittings at CCSD(T) geometries are calcd. also by the CCSDT method. The calcd. vibrational frequencies of the obsd. states of Al₃ (²A₁, ²B₁, and ⁴A₂) and Al₃⁻ (¹A₁ and ³B₂) are in excellent agreement with exptl. results. Other frequencies of this work are expected to be correct within ±20 cm⁻¹.

4A_2 - $^4B_1(^4E'')$ and 2B_2 - $^2A_1(^2E')$ of Al_3 as well as 3B_2 - $^3A_1(^3E')$ and 3A_2 - $^3B_1(^3E'')$ of Al_3^- are pairs of min. and transition states on a potential energy surface of a pseudorotation of the corresponding degenerate states. The vertical excitation energies of addnl. states of $Al_3(^2E', ^4E', ^2A_1')$ and $Al_3^-(^1E'', ^1E')$ are calcd. by the electron-excitation equation-of-motion CC method and the electron-attachment equation-of-motion CC method. The possible processes of ionizations and vibronic transitions are analyzed based on the calcd. results. All features of the recent photoelectron spectroscopic study of Al_3^- are explained consistently. Also the photoelectron signals of electron binding energies of 2.65 and 4.4 eV in earlier expts. correspond to the ionization of the ground state of Al_3^- to higher-lying excited states of Al_3 . The 2 states of the resonant 2-photon ionization expt. are assigned to the lowest quartet state and the 3rd quartet state, $^4E''$ $^4E'$, without ambiguity. The anticipated features of 5 more electronic excitations with transition energies of 0.22, 0.69, 0.77, 0.98, and 1.06 eV are discussed.

Aln

1998

Ionov S.P., Kuznetsov N.T.,
et al.,

непрям
связь

Russ. J. Coord. Chem.
1998, 24(1), 9-13

(all. Bn ; $\bullet$ III)

Al₁₄

1998

ab initio
param
7A. coem.

(129: 8823y Structure and electronic properties of Al₁₄ and Al₁₃-Na clusters. Kumar, Vijay (Material Science Division, Indira Gandhi Centre for Atomic Research, Kalpakkam, 603102 India). *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* 1998, 57(15), 8827-8829 (Eng), American Physical Society. Ab initio mol. dynamics simulations on the Al₁₄ cluster show that in the capped icosahedron structure of this cluster, the 3s electrons of the capping Al atom behave more like core electrons, giving rise to an electronic shell closure effect known for simple metal clusters with 40 valence electrons and which we also find for Al₁₃Na. This makes the two clusters magic. Al₁₄ has a higher binding energy than Al₁₃. However, the HOMO-LUMO gap in Al₁₄ is lower than in Al₁₃ whereas in the case of Al₁₃Na it increases. These results are in complete agreement with the observation of a lower ionization potential for Al₁₄ and a higher ionization potential for Al₁₃Na.

(4)

Δ

Al₁₃Na

C.A. 1998, 129, 21

Al_3

[Dm. 39392]

1998

Al_3^-

Kyoung L.B.,

купленные.
физ. хим.
состоян.
J. Chem. Phys., 1998,
109, NY, 1384. . .

1998

Al_n $n = 2-23$ смысл,
 7-мел
 пацен

129: 235868k Ionization potential of aluminum clusters. Akola, J.; Hakkinen, H.; Manninen, M. (Department of Physics, University of Jyväskylä, P.O. Box 35, FIN-40351 Jyväskylä, Finland). *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* 1998, 58(7), 3601-3604 (Eng), American Physical Society. The structure, electronic structure, and ionization potentials of aluminum clusters of 2-23 atoms are studied with a total energy method based on d.-functional theory. The calcd. adiabatic ionization potentials agree remarkably well with the data from threshold photoionization measurements. The anal. of the results gives insight into hybridization effects in the smallest clusters as well as revealing certain clusters that exhibit a clear jellium-type shell structure. An explanation of the exptl. results in the size region of 12-23 atoms is given in terms of coexisting, competing icosahedral, decahedral, and fcc-based clusters.

C.A. 1998,

129, N 18

Al₅⁻

Al₅

Dm. 40374

2000

Grant D. Beske and
Alexander I. Boldyrev,

J. Chem. Phys., 2000,

113, 113,

5730-5733

On the origin ● of planarity

in Al_5^- and Al_5 clusters:

The importance of a four-center peripheral bond

Aln

2000

Majumder C; et al.,

Chem. Phys. Lett.
2000, 323 (5, 6), 393 - 99

смп-ра
и
Хиет,
неорем.
рацем

(сч. Aln-1 • Li; III)

Al₂

[Om. 41050]

2001

Ashley C. Stowe et al.,

J. Chem. Phys., 2001,

u.n.

115, N10, 4632-4639.

Al₁₂

2001

ab initio
расчет

теорет. расчет
смп - Н,
смагленн.,
спектра

(H) Ga₁₂

C.A. 2001, 135, №7

135: 97685u Ab initio calculations of closo alane and gallane anions $X@A_{12}H_{12}^{2-}$ with X atoms of inert gases or halogens inside the icosahedral $[Al_{12}]$ and $[Ga_{12}]$ clusters. Charkin, O. P.; Klimenko, N. M.; Moran, D.; Mebel, A. M.; Schleyer, P. v. R. (Inst. Problem Khim. Fiz., RAN, Chernogolovka, Russia). *Zh. Neorg. Khim.* 2001, 46(1), 120-130 (Russ), MAIK Nauka/Interperiodica Publishing. The authors used the Hartree-Fock and the DFT-B3LYP methods with 6-31G* and 6-311+G** basis sets to calc. geometries, vibrational, magnetic, and energetic characteristics of the title compds. Data are presented on isomers (local min. on potential energy surfaces), potential barriers for the escape of the inert-gas atoms from the cage, vibrational frequencies and IR intensities, and NMR chem. shifts.

2001

F: Aln**P: 3****135:24936 Atomic clusters - a possible source for novel materials.**

Rao, B. K. Physics Department, Virginia Commonwealth University, Richmond, VA, USA. Mater. Sci. Eng., A (2001), A304-306 211-214. in English.

Geometries of neutral and anionic clusters of Al_nK and Al_n ($n = 1 - 5, 12 - 14$) have been globally optimized at the first principles level using the d. functional theory and generalized gradient approxn. The electronic structures and electron affinities of these clusters clearly illustrate that the bonding of K with Al_{13} is different from that in the bulk phase where these elements are immiscible. The observation that two metallic elements Al_{13} and K are bound by an ionic bond, provides a glimpse into the rich chem. of at. clusters. Finally such clusters have been proposed as the building block for materials with unusual combinations of properties.

