Без

1975

Be_3

kv. mech. fiaeem

35292p Exchange repulsion between beryllium atoms. Bulski, Marek (Quantum Chem. Lab., Univ. Warsaw, Warsaw, Pol.). *Mol. Phys.* 1975, 29(4), 1171–9 (Eng). The 1st order interaction energy of ground state Be_3 was calcd. assuming the wave functions for free atoms in the form of the closed shell SCF determinants. The atoms occupied the vertices of an equilateral triangle with interat. distances of 4.2–10.0 bohr. Decomps. of 2- and 3-body interaction energies into individual intershell contributions was proposed. The electrostatic energy was approximated by the interaction of outer shells. For 2- and 3-body exchange energies this approxn. applied only for small orbital overlaps.

C.A. 1975. 83 NY

Be3

Be4

*Y-14810

1976

86: 8804m **The importance of non-additive terms in the interaction energy of tetrahedral tetraatomic beryllium clusters.** Kolos, W.; Nieves, F.; Novaro, O. (Inst. Fis., Univ. Nac. Auton. Mexico, Mexico City, Mex.). *Chem. Phys. Lett.* 1976, 41(3), 431-4 (Eng). Study of 3- and 4-body interaction energies in the Be_3 (equilateral triangle) and Be_4 (tetrahedral) clusters at several internuclear distances is presented. The SCF LCAO MO method with a 9s2p gaussian basis set for each Be atom was used. At this level of approxn. it is concluded that the 2- and 4-body terms give a repulsive contribution to the interaction energy, whereas the 3-body terms are attractive. Although the latter are not sulfficiently strong to stabilize the Be_3 clusters they do imply a bound state for Be_4 in the region that is close to the nearest neighbour distance in solid beryllium.

кв. мех. расчет

(+1) ☒

C.A. 1977 86 N2

Без отписки 5731 1977

Bruch L. W., et al.

потенц

энергия J. chem. Phys., 1977

67, N5, 2374–74

Be_3

1974

Jordan K.D. et al.
"J. Chem. Phys." 1974, 61,
No, 4027-4037 (см.)

теоретич
м.м

(см. Erratum:
J. Chem. Phys, 1978, 69 (3)
1324)
см. Be_2 - м

Be_3 аннот. 5990 1977

Be_4

Be_5

88: 79240b **Nonadditive effects in small beryllium clusters.** Novaro, O.; Kolos, W. (Inst. Fis., Univ. Nac. Auton. Mexico, Mexico City, Mex.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(11), 5066–9 (Eng). A SCF anal. of few-body contributions to the energy of Be_3, Be_4 and Be_5 clusters is presented. Some nonadditive terms are decisive for the stability of such clusters. An explicit evaluation of the nonadditive 5-body interaction is given.

кл. сист. расчет

(+2)

C. A. 1978. 88 N 12

Вс3 оттиск 6325 1978

Murrell J. N.

Chem. Phys. Lett,

равнов. 1978, 55 (1), 1-5...

конфигур. Potential energy surfaces...

Be_3

1979

Dawley J. P. et al.

J. Chem. Phys. 1979, 71(11), 4294-303.

хв. мех. раств.

сер. Mg_3 – III

Be_3 1982

Be_3^- Jordan Kenneth D.,

Be_3^- Simons Jack:

расчет Ei,

потенц. J. Chem. Phys., 1982,

кривые. 77, N 10, 5250-5252.

(см. Be_2^-; III)

Be_3 1984

Handy N. C.

Faraday Symp. Chem. Soc., 1984, N 19: Symp. Mol. теорем. Electron. Struct. Calc. Meth. and Appl., Cambridge, 12-13 Dec., 1984, 17-37. рассем.

(сел. H_2O; III)

Be3 (Dm. 24134) 1986

105: 85498c **Perturbation calculations of the nonadditivity of the exchange-dispersion energy for the beryllium trimer system.** Bulski, M.; Chalasinski, G. (Dep. Chem., Univ. Warsaw, 02-093 Warsaw, Pol.). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 128(1), 25-30 (Eng). The nonadditivity of the exchange-dispersion energy for the Be trimer in the region of small overlap is calcd. using UCHF wavefunctions and an outer-shell approxn. This effect, unlike in He_3, cannot be neglected even for sepns. twice as large as the nearest-neighbor distance in the Be crystal. The role of various contributions to the total nonadditivity of the interaction energy is discussed.

(вклад · расчет)

C. A. 1986, 105, N 10

Be3

Оп. 23316

1986

Bey

Harrison R.J., Handy N.C.;

Chem. Phys. Lett.,
1986, 123, N 4, 321-326.

Энерг. сверх, теор. расч.

Be3

1986

6 Д121. Роль корреляции электронов в системах Be_n и Be_n—H (n=3, 4, 5). The effect of electron correlation in the Be_n and Be_n—H systems (n=3, 4, 5). Rubio J., Illas F., Ricart J. M. «Afinidad», 1986, 43, № 406, 467—468 (англ.; рез. исп., каталон.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовых ф-ций 4*s*4*p*/4*s*, сгруппированном в 2*s*2*p*/2*s*, с использованием псевдопотенциала и учетом конфигурац. взаимодействия (КВ) исследовано электронное строение систем Be_n и Be_nH (n=3—5) в различных состояниях. Структуры моделировали поверхность (0001) металлического Be и хемосорбцию водорода. Обнаружено, что в ряде случаев ССП и КВ приводят к различным основным состояниям. Оценены энергии взаимодействия водорода с поверхностью Be и обнаружено, что на нее значительное влияние оказывает структура не только поверхностного, но и следующего слоя атомов Be.

В. Л. Лебедев

М.П.

Ж

Ф. 1987, 18, № 6

Be n (n=4,5)

Вд3 (от. 31013) 1988

Gosavi R.K., Strausz O.P.,

потенц. кривые низлеж. трипл. состоян., ab initio расчет

Can. J. Chem. 1988, 66,
N 8, 2034-2040.

Be3

Ом 34640

1990

Rendell A.P., Lee T.J.,

колеба-
частоты

J. Chem. Phys. 1990, 92,
N12, 7050 – 7056.

Vibrational frequencies for Be3 and Be4

Be3

1990

21 Б1036. Вклады трехкратных и четырехкратных возбуждений в связь в кластерах Be. Калибровочные расчеты Be_3. Triple and quadruple excitation contributions to the binding in Be clusters: Calibration calculations on Be_3 / Watts John D., Cernusak Ivan, Noga Jozef, Bartlett Rodney J., Bauschlicher Charles W. (Jr.), Lee Timothy J., Rendell Alistair P., Taylor Peter R. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 12.— С. 8875—8880.— Англ.

Исследованы вклады трехкратных и четырехкратных возбуждений в энергию связи кластера Be_3. Расчеты проведены различными вариантами метода связанных кластеров и ограниченного метода конфигурац. взаимодействия (КВ) с одноконфигурац. исходной волновой ф-цией. Использован базис атомных натуральных орбиталей, аппроксимир. набором сгруппир. гауссовых ф-ций [4*s*2*p*1*d*]. Результаты расчетов сопоставлены с данными полного метода КВ и метода КВ с однократными и

М.П.

Х.1991, №21

двукратными возбуждениями по отношению к нескольким исходным конфигурациям. Показано, что метод связанных кластеров с однократными и двукратными возбуждениями не обеспечивает хорошей оценки энергии связи в Be_3, однако различные варианты приближенного учета связанных трехкратных возбуждений приводят к достаточно точным результатам; вклады четырехкратных возбуждений малы. А. А. Сафонов

Be_3^+

1992

5 Д78. Стабильность одно- и двухзарядных тримеров бериллия Be_3^+ и Be_3^{++}. On the stability of the singly and doubly charged beryllium trimers Be_3^+ and Be_3^{++} / Hogreve H. // Mol. Phys. .— 1992 .— 76 , № 6 .— С. 1489—1499 .— Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом корреляции электронов методом конфигурац. взаимодействия и частичной оптимизацией экспонент базиса гауссовых ф-ций 13s5p1d/8s5p1d исследовано электронное строение Be_3^+ (I) и Be_3^{2+} (II). Рассчитаны адиабатич. поверхности потенц. энергии для основных состояний, спектроскопич. постоянные. Обнаружено, что для I стабильна линейная симметричная форма с длинами связей 2,28 Å и энергией диссоциации 1,16 эВ ($^2\Sigma_g^+$). Для II обнаружено метастабильное состояние $^1\Sigma_0^+$, также линейное симметричное с длинами связей 2,17 Å. Исследование туннельной диссоциации II методом ВКБ показало, что время его жизни очень велико, поэтому можно рассчитывать на эксперим. обнаружение II.

М.Л.

Ф 1993, N5

Be_3^+

Be_3^{2+}

1992

12 Б1019. О стабильности одно- и двукратно заряженных тримеров бериллия Be_3^+ и Be_3^{2+}. On the stability of the singly and doubly charged beryllium trimers Be_3^+ and Be_3^{++} /Hogreve H. //Mol. Phys .—1992 .—76 ,№ 6 .—С. 1489—1499 .—Англ.

Методом конфигурац. вз-вия с несколькими исходными конфигурациями рассчитаны потенциальные поверхности основных электронных состояний ионов Be_3^+ и Be_3^{2+}. Найдено, что Be_3^+ имеет линейную равновесную конфигурацию (электронное состояние $X^2\Sigma_g^+$), межъядерное расстояние $R_e = 2{,}28$ Å и энергию диссоциации $D_e = 1{,}16$ эВ. Ион Be_3^{2+} метастабилен, локальный минимум энергии, лежащий на 1,44 эВ выше диссоциац. предела $Be_2^+ + Be^+$, отвечает линейной симм. конфигурации с $R_e = 2{,}17$ Å. Получена оценка времени жизни Be_3^{2+}, указывающая на возможность его эксперим. наблюдения. Библ. 36.

А. А. Сафонов

М.Л.

Х. 1993, N12

Be_3^+

Be_3^{2+}

1992

, 117: 198938n On the stability of the singly and doubly charged beryllium trimers Be_3^+ and Be_3^{2+}. Hogreve, H. (Cent. Phys. Theor., CNRS, F-13288 Marseille, Fr.). *Mol. Phys.* 1992, 76(6), 1489-99 (Eng). Extensive multireference CI calcns. were carried out to generate adiabatic potential energy surfaces for the electronic ground state of Be_3^+ and Be_3^{2+}. Resulting stability and other properties are investigated, showing that Be_3^+ is stable in a linear sym. equil. configuration with a bond length R_e = 2.28 Å and dissocn. energy D_e = 1.16 eV, the assocd. electronic state being $^2\Sigma_g^+$. The doubly charged system Be_3^{2+} is metastable due to relatively large and wide energy barriers. The corresponding local energy min. occurs also in a linear sym. geometry with R_e = 2.17 Å, but is unbound by 1.44 eV. A WKB est. for the tunnelling dissocn. shows that the lifetime of Be_3^{2+} is sufficiently long to allow its expt. observation.

теорем. расчет структуры, Dc

C. A. 1992, 117, N 20

Be_3^+

1994

120: 331617n **Polyatomic molecules without electron-pair bonds: high-spin trigonal, tetrahedral, and octahedral lithium clusters.** Glukhovtsev, Mikhail N.; Schleyer, Paul v. R. (Inst. Org. Chem., Friedrich-Alexander Univ. Erlangen-Nuernberg, D-8520 Erlangen, Germany). *Isr. J. Chem.* 1994, 33(4), 455–66 (Eng). Bound polyat. mols. without any spin-paired valence electrons are exemplified by lithium clusters in high-spin states. Three unpaired valence electrons are able to bind the ($^4A_1$) quartet states of Li_3 and of Li_4^+ in trigonal (D_{3h}) geometries. The tetrahedral Li_4 and Li_5^+ ($^5A_1$) quintet state structures illustrate bound mols. with four unpaired valence electrons. Five, six, and seven spin-uncoupled valence electrons bind the square pyramidal Li_5($^6B_1$) structure, the Li_6($^7A_{2u}$) distorted octahedral structure, and the Li_6-($^8A_{1g}$) octahedral (O_h) octuplet, resp. However, these high-multiplicity structures are only local min.; forms with lower spin states are more favorable energetically. Other high symmetry, high multiplicity clusters, e.g., triangular Be_3^+ ($^6A_1'$), also have pos. atomization energies. The results demonstrate that chem. bonding in multiatom species does not require spin-coupling.

($^6A_1'$)

(+6)

C. A. 1994, 120, N 26

На ст.

Li_3 ($^4A_1$)

Li_4^+ ($^4A_1$)

Li_4 ($^5A_1$)

Li_5^+ ($^5A_1$)

Li_6 ($^7A_{2u}$) (структура)

Li_6^- (^8A_g) — . —

X3

1994

X – исп. дем. металл

(спектр)

122: 145780b **High-resolution spectroscopic studies of alkaline earth triatomic molecules.** Scurlock, Christopher Todd (Arizona State Univ., AZ USA). **1994.** 145 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA9424152. From *Diss. Abstr. Int. B* **1994**, 55(4), 1455.

(сел. орг.)

C. A. 1995, 122, N 12

q.40469

2000

F: Be3
P: 3
133:313925 Nature of binding in the alkaline-earth clusters: Be3, Mg3, and Ca3. Kaplan, Ilya G.; Roszak, Szczepan; Leszczynski, Jerzy Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autonoma de Mexico Mexico City 04510, Mex. J. Chem. Phys., 113(15), 6245-6252 (English) 2000. The authors studied the interaction energy and its many-body decompn. for Ben, Mgn, and Can (n=2,3) clusters in a broad distance interval at the SCF and MP4 levels of

theory. The only stabilization factor in the dimers is the dispersion force; thus, the alk.-earth dimers can be attributed to the van der Waals mols. The trimers are stabilized by the two-body localized dispersion forces and three-body delocalized exchange forces. The binding in the alk.-earth trimers has a mixed phys. (van der Waals) and chem. (nonadditive exchange) nature. An NBO population anal. reveals a relatively large p-population in all clusters. A surprisingly large p-population at the MP4 level was also obtained for the isolated atoms.