

Be_2H_4

Be_2H_4

пол.

суп-ра

Pearson R. G. 1970

J. Chem. Phys.,

1970, 52, 5, 2164

(Calc. C_2H_2) 11

BeH_2 , Be_2H_4 , Be_3H_6 (pairs ϵ_i , 1974
referred components) IX-4863

Pomassay - Lentei I., Szaniszló J.,

Acta phys. et chem. Szeged, 1974, 20, 13,
351-356 (aurel).

Investigation of the possibility of
polymerization for the BeH_2 molecule.
The ground state of BeH_2 , Be_2H_4 and
 Be_3H_6 systems by the FSGO method.
P. J. J. J., 1975, 13547

10.11 (p) 6

кб. мех. пакет

61104.7502
Ch, Ph, TC

29864

1976

Be₂H₄

* 13-14873

K p.N 61104.7501

ВФ-5451-IX

Pakistani Ali H., Linnett John W.
Applications of a simple molecular wave-
function. Part 13. Open-shell calculations
for hydrogen-bridge structures.

"J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1976,
Part 2, 72, N 8, 1288-1297 (англ.)

0740 лнк

701

707

332

ВИНИТИ

Be_2H_4

номер 8609

1979

Friedemann F. et al.

молекула.
сущ.

Z. phys. Chem. (DDR), 1979,
260, 14, 693-700

сущ. H_4 -III

Be_2H_4

Be_2H_3^+

кв. мех.
расчет
геометрич.
сил. поля

1055 127221

1980

14 БЗЗ.

Неэмпирические МО ЛКАО ССП расчеты геометрического строения и силового поля молекулы Be_2H_4 и иона Be_2H_3^+ . Соломоник В. Г., Сазонова И. Г., Краснов К. С. «Теор. и эксперим. химия», 1980, 16, № 6, 785—791

На основании неэмпирич. расчетов в гауссовом базисе, включавшем по 3 ГФ для слейтеровских s-орбиталей и по 2 ГФ для p-орбиталей, установлено, что единственной равновесной конфигурацией ядер в молекуле Be_2H_4 является плоская мостиковая конфигурация симметрии D_{2h} , а в ионе Be_2H_3^+ — линейная конфигурация симметрии $D_{\infty h}$. Вычислен полный набор молек. постоянных Be_2H_4 и Be_2H_3^+ , необходимый для проведения статистич. расчетов термодинамич. функций этих соединений.

Е. Розенберг

(+1)



2: 1981. № 14

1980

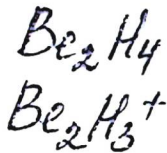
 Be_2H_4 Be_2H_3^+

Кб. сел.
 пакет,
 структура,
 сел. ност.

✓ 94: 127692y Nonempirical MO LCAO-SCF calculations of the geometric structure and force field of a beryllium hydride (Be_2H_4) molecule and ion (Be_2H_3^+). Solomonik, V. G.; Sazonova, I. G.; Krasnov, K. S. (Ivanov.-Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Teor. Eksp. Khim.* 1980, 16(6), 785-91 (Russ). The equil. geometry of the most general force field and normal-vibration frequencies of Be_2H_4 and Be_2H_3^+ were calcd. by the "Orbital" 8" program (D. A. Zhogolev and V. B. Volkov, 1976) and the R. Stewart (1970) expansion of Slater-type orbitals. The singular equil. configuration of nuclei in Be_2H_4 mol. is a flat bridge configuration of O_h symmetry and that of Be_2H_3^+ a linear configuration of D_{2h} symmetry.

C.A. 1981 24N16

1980



хв. лех.
расчет,
сильн. пост.
геометрия

И

ср. 1980/1/4

7 Д105. Неэмпирические МО ЛКАО ССП расчеты геометрического строения и силового поля молекулы Be_2H_4 и иона Be_2H_3^+ . Соломоник В. Г., Сазонова И. Г., Краснов К. С. «Теор. и эксперим. химия», 1980, 16, № 6, 785—791

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в миним. базисе гауссовых ф-ций ОСТ-3-2ГФ исследовано электронное строение Be_2H_4 (I) и Be_2H_3^+ (II). Из восьми гипотетич. структур I стабильными по отношению к распаду на BeH_2 (III) оказались структуры $\text{HBe} \dots \text{H}_2 \dots \text{BeH}$ (симметрия D_{2h} , самая стабильная) и $\text{HBe} \dots \text{H} \dots \text{BeH}_2$ (симметрия C_{2v} , энергия диссоциации на 2 молекулы III $\sim 0,6$ ккал/моль). Детальные исследования показали, что равновесной является только структура D_{2h} , а C_{2v} отвечает седловой точке поверхности потенц. энергии. Для II из четырех исследованных структур стабильной найдена только линейная $\text{H}-\text{Be} \dots \text{H} \dots \text{Be}-\text{H}$ (энергия диссоциации на III+IV ~ 53 ккал/моль), а еще две циклич. структуры отвечают седловым точкам. Приведены силовые постоянные, колебательные частоты и распределения потенц. энергии по внутренним координатам. В. Л. Лебедев

Be₂H₄

1983

6 Д148. Ab initio расчет структуры и стабильности комплексных гидридов MgBeH_4 и Mg_2H_4 . Кирillow Ю. Б., Болдырев А. П., Клименко Н. М., Чаркин О. П. «Ж. структур. химии», 1983, 24, № 1, 144—146

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в двух-экспонентном базисе Хузинаги — Данинга с оптимизацией геометрии исследовано электронное строение Be_2H_4 (I), Mg_2H_4 (II) и MgBeH_4 (III). Обнаружено, что для всех молекул энергетически наиболее выгодными являются ромбич. конфигурации с двумя мостиковыми атомами H, которые устойчивы к любым типам мономолекулярного распада. Подчеркнуто, что димеризация способствует стабилизации, т. к., напр., MgH_2 неустойчив по отношению к распаду на Mg и H_2 . Молекула I устойчива по отношению к отщеплению атома Be, а II и III неустойчивы по отношению к отщеплению ато-

стр., 2е;

(+2) 
фр. 1984, 18, № 6

ма Mg. Проанализирована возможность аддитивного подхода к оценке геометрич. параметров цикла, образованного двумя атомами металла и двумя мостиковыми атомами Н. Аддитивно оцененные длины связей, валентные углы и полные энергии отличаются от точных значений на 0,05 Å, 6° и менее, чем на 1 ккал/моль.

В. Л. Лебедев

ВезН₄

1983

13 Б1026. Ab initio расчет структуры и стабильности комплексных гидридов $MgBeH_4$ и Mg_2H_4 . Киррилов Ю. Б., Болдырев А. И., Клименко Н. М., Чаркин О. П. «Ж. структур. химии», 1983, 24, № 1, 144—146

расчет и-п.,
ком., структ

Неэмпирическим методом ССП МО проведены расчеты электронного строения и энергетич. стабильности комплексных гидридов Be_2H_4 , Mg_2H_4 и $MgBeH_4$. Использованы двухэкспоненциальные базисные наборы Хузинаги—Даннинга для всех атомов. Равновесные геометрич. параметры определены путем последовательной оптимизации. Для всех 3 молекул основными найдены ромбич. конфигурации. Все молекулы в основных конфигурациях энергетически устойчивы к любым типам мономолек. распада и могут быть изучены экспериментально, напр., в условиях матричной изоляции. Проанализирована возможность применения аддитивного подхода к оценке геометрич. и энергетич. параметров в цикле, образованном двумя центральными и двумя мостиковыми лигандами. Для молекулы $MgBeH_4$ отклоне-

(72)

☒

X. 1984, 19, N 13

ние аддитивных оценок от полностью оптимизированных геометрич. параметров составляет $\sim 0,05$ Å для межатомных расстояний и $\sim 6^\circ$ для валентных углов, для полной энергии менее 1 ккал/моль. Сделан вывод, что аддитивная схема приемлема для описания циклич. фрагментов комплексных молекул, где разбиение цикла на фрагменты проходит по мостиковым атомам.

И. Н. Сенченя

Be_2H_4
 Be_2H_5

1984

Паркин О. П.,
Знобчев А. С. и др.

рачет
Тр. Моск. хим.-технол.
ин-т, 1984, N 134,
13-26

(соед. $Li^+H_k^-$; III)

$\text{Be}_2\text{H}_4^{2-}$

1984

З Б1021. Теоретическое исследование структуры и стабильности аниона $\text{Be}_2\text{H}_4^{2-}$ и молекулы $\text{Li}_2\text{Be}_2\text{H}_4$. Кириллов Ю. Б., Болдырев А. И., Клименко Н. М., Чаркин О. П. «Координац. химия», 1984, 10, № 9, 1178—1181

Неэмпирическим методом Хартри—Фока—Рутана рассчитаны равновесные геометрич. параметры, энергии газофазного комплексообразования, относительные энергии наиболее стабильных конфигураций молекулы $\text{Li}_2\text{Be}_2\text{H}_4$. Установлено, что анион $\text{Be}_2\text{H}_4^{2-}$ не стабилен к распаду на $\text{BeH}_3^- + \text{BeH}^-$ и $\text{Be}_2\text{H}_3^- + \text{H}^-$. Рассмотрена возможность особого типа внутримолек. перегруппировок в молекуле $\text{Li}_2\text{Be}_2\text{H}_4$ с разрушением и перестройкой аниона $\text{Be}_2\text{H}_4^{2-}$. Автореферат

структура,
теорет. расчёт

(4) ☒

Х. 1985, 19, N3.

BeH₄

[DM-25254]

1986

BeH₄

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

кондам.
гастотн,
расчём

Munnon karaky kaiceu,
J. Chem. Soc. Jap., Chem.
and Ind. Chem., 1986,
N 11, ● 1377-83.

Be_2H_4

[om. 26553]

1987

De Frees D. J., Raghava-
chari K., et al.,

empykm,

$\Delta_f H$,

теорет.

расчет.

J. Phys. Chem., 1987,
91, № 7, 1857-1864.

(coll. Li_2H_2 III)

$\text{Be}_2\text{H}_4^{2+}$

М.П.

Х. 1991, № 8

1990

8 Б1041. Водородсодержащие комплексы Be_2^{2+} .
Hydrogen complexes of Be_2^{2+} / Nicolaides Cleanthes A.,
Valtazanos Petros // Chem. Phys. Lett.— 1990.— 174,
№ 5.— С. 489—493.— Англ.

Электронное и геометрич. строение гипотетич. комплексов $\text{Be}_2\text{H}_4^{2+}$ (I) и $\text{Be}_2\text{H}_8^{2+}$ (II) изучено методами КВ и МК ССП в стандартном базисе Даннинга—Хея, расширенным одной поляризац. ф-цией на каждом атоме. Для сравнения рассчитаны также дикатион Be_2^{2+} и комплексы $\text{Be}^{2+}-\text{H}_2$, $\text{HBe}^{2+}-\text{H}_2$ и $\text{H}_2\text{Be}^{2+}-\text{H}_2$. Абс. минимум найден только для S_4 -конфигурации II, $(\text{H}_2)_2-\text{Be}-\text{Be}-(\text{H}_2)_2$, тогда как для S_2 -конфигурации I энергия выше (0,25 эВ) чем $2\text{Be}^++2\text{H}_2$. Связи в димерах обусловлены акцептированием π -орбиталями $\text{Be}^+\sigma$ -электронной плотности H_2 . Найдено сокращение связей $\text{Be}-\text{Be}$ и $\text{H}-\text{H}$ и удлинение связей $\text{Be}-\text{H}$ при переходе от I к II. Отмечена возможность синтеза стабильных комплексов (мономерных и димерных) переходных и непереходных элементов с такими лигандами, к-рые имея заполненную оболочку, могут частично заселять π -орбитали соотв-щего атомного или молек. центр. иона.

С. П. Долин