

$\text{Be}_2\text{F}_4$

Be<sub>2</sub>F<sub>4</sub>

91825e Infrared matrix isolation spectrum and normal coordinate analysis of the beryllium fluoride dimer. Snelson, A.; Cyvin, B. N.; Cyvin, S. J. (Res. Inst., Illinois Inst. Technol., Chicago, Ill.). Z. Anorg. Allg. Chem. 1974, 410(2), 206-12. (Eng).

Four frequencies were identified as belonging to the dimer Be<sub>2</sub>F<sub>4</sub> in the ir spectra (190-2000 cm<sup>-1</sup>) of the BeF<sub>2</sub> vapor species isolated in Ne and Ar matrixes. Assuming a planar bridge structure of D<sub>2h</sub> symmetry for Be<sub>2</sub>F<sub>4</sub>, the frequencies in the Ne matrix were tentatively assigned. A normal coordinate anal. of the dimeric mol. is presented together with the calcd. vibrational frequencies and mean amplitudes of vibration.

V<sub>i</sub>; cm<sup>-1</sup>;  
calc. root.

#4-8233

C.A. 1975, 82, N14

1974  
11-1-781-49

$\text{Be}_2\text{F}_4$

(i, i)

ВФ-4861-IX  
ХУ-8233

1974

1) 12 Б200. Инфракрасный спектр димера фтористого бериллия, изолированного в матрице, и анализ нормальных колебаний. Snelson A., Cyvin B. N., Cyvin S. J. The infrared matrix isolation spectrum and normal coordinate analysis of the beryllium fluoride dimer. «Z. anorg. und allg. Chem.», 1974, 410, № 2, 206—212 (англ. рез. нем.)

В спектральной области  $190\text{--}2000\text{ см}^{-1}$  измерены ИК-спектры поглощения фтористого бериллия, изолированного в матрицах Ne и Ar ( $M/A=1000:1$ ) при сверхнизких т-рах. Отнесены четыре полосы принадлежащие димеру  $\text{Be}_2\text{F}_4$ . На основании предположения о плоской структуре димера с симметрией  $D_{2h}$  проведено предв. отнесение частот для случая Ne матрицы (503, 827, 842 и  $1251\text{ см}^{-1}$ ). Выполнен анализ нормальных колебаний для молекулы димера и приведены результаты расчетов частот и среднеквадратичных амплитуд колебаний.

О. Г. Гаркуша

Х. 1975 N 12

Вез F4

1981

4 Б105. АВ INITIO исследование силовых полей и колебательных спектров некоторых простых и комплексных молекул и ионов. Соломоник В. Г., Озерова В. М., Коновалов С. П., Погребная Т. П., Краснов К. С. «12-й Менделеев. съезд по общ. и прикл. химии. Реф. докл. и сообщ. № 3». М., 1981, 149

Предложен способ расчета силовых полей молекул в рамках метода Хартри—Фока—Рутаана, основанный на численном дифференцировании энергии по координатам симметрии  $S$ . Способ обеспечивает выполнение условий Эккарта для смещенных конфигураций молекулы и позволяет определять все коэф. наиболее общего силового поля по миним. числу точек на потенциальной поверхности. Обсуждена точность расчета силовых коэф. методом конечных разностей и выбор оптим. шага по  $S$ . Представлены результаты расчетов силовых полей, колебательных спектров и среднеквадратичных амплитуд

$V_i$ , ссч. постр.,  
кв. мех.  
расчет

⊠  
(43)

X. 1982, 19, №4

на обгтоте

колебаний молекул  $\text{Be}_2\text{F}_4$ ,  $\text{LiNO}_3$ ,  $\text{Li}_2(\text{OH})_2$  и иона  $\text{Li}_2\text{OH}^+$ . Выполнены расчеты термодинамич. ф-ций указанных соединений в состоянии идеального газа. Рассчитанные св-ва сопоставлены с имеющимися эксперим. данными. Уточнено отнесение полос в колебательном спектре молекулы  $\text{Be}_2\text{F}_4$ . Из резюме

$\text{LiNO}_3$ ,  $\text{Li}_2(\text{OH})_2$ ,  $\text{Li}_2\text{OH}^+$

Be<sub>2</sub>Fy

ном.

сир-ра

Pearson R.G. 1970

J. Chem. Phys.,

1970, 52, 5, 2164

(C<sub>60</sub>H<sub>2</sub>)<sub>4</sub>

$\text{Be}_2\text{F}_4$

Оптима 12725 | 1981

Захаржевский В. Г.

(E) факт,

изр.

координат.  
параметры

Координат. Зем.

1981. в печати.

теоретическое исследование  
зеркала газодиффузионной конвекции —  
отражающей

$\text{Be}_2\text{F}_4$

От. 16048

1982

20 Б185. Ab initio исследование геометрического строения, силового поля и колебательного спектра молекулы  $\text{Be}_2\text{F}_4$ . Соломоник В. Г., Озерова В. М., Слизнев В. В. «Ж. неорган. химии», 1982, 27, № 7, 1636—1642

геометрия,  
структура,  
сил. пост.,  
Описан метод ab initio расчета коэф. силового поля и интенсивностей ИК-спектров многоатомных молекул. Использование координат симметрии позволяет определить полную матрицу силовых постоянных по миним. кол-ву точек на потенциальной поверхности молекулы. Методом Хартри — Фока — Рутана с двухэкспонентным базисом Хузинаги — Даннинга ( $9s5p/4s2p$ ) выполнены неэмпирич. расчеты молекулы  $\text{Be}_2\text{F}_4$ . Найдено, что  $\text{Be}_2\text{F}_4$  имеет плоскую циклич. равновесную конфигурацию с двумя мостиковыми атомами фтора (симметрия

Di  $\otimes$  (+1)  $\text{Be}_2\text{F}_4$  ● (методом)  
ф-ии

Х. 1982, 19, № 20

$\nu_{2h}$ ). Вычислены коэф. наиболее общего силового поля, частоты, формы и интенсивности в ИК-спектре нормальных колебаний  $\text{Be}_2\text{F}_4$ . Результаты расчетов сопоставлены с ИК-спектром димерной молекулы фторида бериллия, полученным Снелсоном и др. методом матричной изоляции. По теор. молек. константам рассчитаны термодинамич. функции  $\text{Be}_2\text{F}_4$  в состоянии идеального газа.

Резюме

Be<sub>2</sub>F<sub>4</sub>

Om. 16048

1982

97: 115612w Ab initio study of geometric structure, force field, and vibrational spectrum of a beryllium fluoride (Be<sub>2</sub>F<sub>4</sub>) molecule. Solomonik, V. G.; Ozerova, V. M.; Sliznev, V. V. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). Zh. Neorg. Khim. 1982, 27(7), 1636-42 (Russ). A method is presented for ab initio calcn. of force field coeffs. and IR intensities of multiat. mols. By using symmetry coordinates, the total matrix of force consts. can be obtained from the minimal

структура,

сущ. ноем

и, меопен

распрем

no. of points on the mol. potential surface. Calcs. on Be<sub>2</sub>F<sub>4</sub> were made by the Hartree-Fock-Roothaan method by using double-zeta Huzinaga-Dunning (9s5p/4s2p) basis set. Be<sub>2</sub>F<sub>4</sub> has a planar cyclic structure with 2 bridging F atoms (D<sub>2h</sub>). The calcd. force consts., frequencies, and IR intensities of normal vibrations of Be<sub>2</sub>F<sub>4</sub> are presented. Thermodyn. functions (heat capacity, entropy, enthalpy) of Be<sub>2</sub>F<sub>4</sub> were also calcd.

C.A. 1982, 97, N 14

ВзГ4

послано 5/II-1982г.  
(в печать)

ави́тио  
расче́т.

В. Г. Соломо́вник,  
Математические методы  
расчета силовых полей и  
колебательных спектров много-  
атомных молекул.  
М.: Наука, 1982.

Вел. Г.

от. 18437

1983

6 Д90. Неэмпирические МО ЛКАО ССП расчеты силовых полей и колебательных спектров многоатомных неорганических молекул. Соломоник В. Г. «Ж. структур. химии», 1983, 24, № 1, 29—38

Представлены результаты неэмпирич. расчетов силовых полей и колебательных спектров «высокотемпературных» неорганич. молекул и ионов: фторидов, окислов, гидроокисей металлов, солей кислородсодержащих кислот и соответствующих анионов. Расчеты выполнены с использованием двухэкспонентного ( $9s5p/4s2p$ ) и валентно-трехэкспонентного ( $10s6p/5s/3p$ ) базисов Хузинаги — Данинга с учетом и без учета поляризац.  $d$ -ф-ций. Обсуждена зависимость точности расчета от полноты набора базисных ф-ций. Показано, что двухэкспонентный базис позволяет получать частоты колебаний многоатомных молекул и ионов, построенных из

См. пост. .

Д

40

ф. 1984, 18, № 6

см. 8/м.

атомов второго периода, со средней погрешностью 4%. Предсказаны частоты колебаний, изотопич. сдвиги и интенсивности в ИКС для ряда соединений ( $\text{Be}_2\text{F}_4$ ,  $\text{Li}_2(\text{OH})_2$ ,  $\text{Li}_2(\text{OH})^+$ ,  $\text{Li}(\text{OH})_2^-$ ,  $\text{BeO}_2$ ,  $\text{Be}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Be}(\text{OH})_2$ ,  $\text{Be}(\text{OH})\text{F}$ ,  $\text{LiNO}_3$ ,  $\text{LiNO}_2$ ,  $\text{LiBO}_2$  и др.). Отмечены закономерности в изменении свойств молекулярных фрагментов — равновесных межъядерных расстояний, валентных углов, силовых постоянных — в рассмотренных рядах молекул.

Резюме

$\text{Be}_2\text{F}_4$

1992

24 Б1147. Неэмпирическое изучение димеров  $\text{Be}_2\text{F}_4$ ,  $\text{Mg}_2\text{F}_4$ , смешанных димеров  $\text{BeMgF}_4$  и  $\text{LiNaF}_2$  и ионных пар  $\text{Li}_2\text{BeF}_4$ ,  $\text{LiBCl}_4$  и  $\text{LiAlCl}_4$ . Ab initio study on the  $\text{Be}_2\text{F}_4$ ,  $\text{Mg}_2\text{F}_4$  dimers, on the mixed dimers  $\text{BeMgF}_4$  and  $\text{LiNaF}_2$  and on the  $\text{Li}_2\text{BeF}_4$ ,  $\text{LiBCl}_4$  and  $\text{LiAlCl}_4$  ion pairs / Ramondo F., Bencivenni L., Spoliti M. // J. Mol. Struct. Theochem. — 1992. — 96, Dec. — С. 171—184. — Англ.

ab initio  
расчет



$\text{Mg}_2\text{F}_4$

$\text{BeMgF}_4$

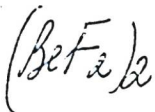
$\text{LiNaF}_2$

$\text{Li}_2\text{BeF}_4$ ,  $\text{LiBCl}_4$

$\text{LiAlCl}_4$

X. 1995, N 24

1994



122: 89971a The stability of the  $\text{BeF}_2$ ,  $\text{MgF}_2$  and  $\text{CaF}_2$  dimers. Spoliti, M.; Bencivenni, L.; Ramondo, F.; Rossi, V. (Dipartimento di Chimica, Universita degli Studi di Roma, P.le Aldo Moro 5, I-00185 Rome, Italy). *THEOCHEM* 1994, 121, 19-27 (Eng). The dimers of  $\text{BeF}_2$ ,  $\text{MgF}_2$  and  $\text{CaF}_2$  have been studied by means of the HF-SCF and MP2 methods. Their stability and vibrational spectra have been calcd. The IR spectra of the possible models of the  $\text{Ca}_2\text{F}_4$  dimer are discussed.

$\text{Vi}$ ,  $\text{cm}^{-1}$ .



C. A. 1995, 122, N 8



$\text{Ca}_2\text{F}_4$  (анализ ир  
с помощью  
T. спек-  
трального  
анализа)

BeaFy  
MaeFy

1996

Попрежне Т.П., Соломонов В.Р.

1 Решение. мелбуз. конгр.

" Актуал. пробл. химии,  
хим. технор. и хим. обраб."

М.А.

" Химия - 96", Ивачко,  
96. Изд. Гос. С. 25

22-26 апр., 19

Р.д. Х. N 11, 1997, 115 160

$M_2F_4$ ,

$MM'F_4$

$M, M' = Be,$

$Mg, Ca$

compd.,  $D_{2h}$

calculation;

ab initio

program

(15)

17

C. A. 1997, 127, N 15

$Be_2F_4$

1997

127: 210554a An ab initio study of the isomerism and vibrational spectra of the dimeric  $M_2F_4$  and  $MM'F_4$  molecules ( $M, M' = Be, Mg, \text{ or } Ca$ ). Pogrebnaya, T. P.; Sliznev, V. V.; Solomonik, V. G. (Ivanovo State Academy of Chemistry and Technology, Ivanovo, Russia). *Russ. J. Coord. Chem. (Transl. of Koord. Khim.)* 1997, 23(7), 461-468 (Eng), MAIK Nauka/Interperiodica. The geometry, stability, force field, and vibrational spectra of the  $Be_2F_4$ ,  $Mg_2F_4$ ,  $Ca_2F_4$ ,  $BeMgF_4$ ,  $BeCaF_4$ , and  $MgCaF_4$  mols. are calcd. by the ab initio Hartree-Fock-Roothaan method using a second-order perturbation theory (MP2). Particular emphasis is placed on the isomerism of these compds. and its spectroscopic manifestations. The Huzinaga-Dunning, McLean-Chandler, and Wachters basis sets of contracted Gaussian orbitals were augmented by the d functions on all the atoms:  $Be(9s5p1d/4s3p1d)$ ,  $Mg(12s8p1d/6s4p1d)$ ,  $Ca(14s11p3d/9s8p3d)$ , and  $F(9s5p1d/4s2p1d)$ . Calcns. suggest the cyclic-planar equil. geometry of symmetry  $D_{2h}$  for the  $Be_2F_4$  and  $Mg_2F_4$  mols., while the structure of the  $Ca_2F_4$  mol. includes three bridging fluorine atoms ( $C_{3v}$  symmetry). The mixed dimers  $MM'F_4$  have a cyclic-planar structure of symmetry  $C_{2v}$ . For each mol., except  $Be_2F_4$ , there is another,

$Mg_2F_4$ ,  $Ca_2F_4$ ,

$BeMgF_4$ ,  $BeCaF_4$ ,  $MgCaF_4$

though less stable isomer: cyclic of symmetry  $D_{2h}$  for  $Ca_2F_4$  and isomers of  $C_{3v}$  symmetry for the remaining mols. The chem. bonding in the isomers of symmetry  $C_{3v}$  can be formulated as  $[MF_3]-[MF]^+$ . The MP2 relative energies of these isomers are (kJ/mol)  $[BeF_3]MgF$  83,  $[BeF_3]CaF$  47,  $[MgF_3]BeF$  132,  $[MgF_3]MgF$  58,  $[MgF_3]CaF$  34,  $[CaF_3]BeF$  78,  $[CaF_3]MgF$  5, and  $[CaF_3]CaF$  -12. One more isomer of symmetry  $D_{4h}$  with relative energy 130 kJ/mol is found for the  $Ca_2F_4$  mol. The relative stability of structure  $C_{3v}$  is found to increase in the order  $BeMF_4 \rightarrow MgMF_4 \rightarrow CaMF_4$ .

F: (BeF)<sub>2</sub>

P: 3

134:316381 Dimers of alkaline earth metal halide radicals, (MX)<sub>2</sub> (M=Be, Mg, Ca; X=F, Cl): A theoretical study. Li, G. P.; Hamilton, I. P. Department of Chemistry, Wilfrid Laurier University, Waterloo, Can. J. Chem. Phys. (2001), 114(4), 1534-1538. in English.

Alk. earth metal halide radical dimers, (MX)<sub>2</sub> (M=Be, Mg, Ca and X=F, Cl) have not yet been obsd. exptl. and their existence could be doubted since MX is known to disproportionate in the bulk. We study the (MX)<sub>2</sub> species using DFT and MP2 methods and show that they are either thermodynamically or kinetically stable with respect to various reactions including disproportionation. Energetics, geometries, and vibrational frequencies of singlet and triplet equil. structures and some transition states are calcd. The ground states of (MX)<sub>2</sub> are all singlet except (CaF)<sub>2</sub> which is triplet and, with the possible exception of (CaF)<sub>2</sub>, the ground states have a rhombic structure in which the X atoms are shared equally with each M atom. The ionization potentials of the (MX)<sub>2</sub> species are significantly lower than those of the corresponding MX species suggesting that their chem. may be significantly different.

2001