

1980

7 Д363. Спектры молекул MgH и MgD в области 230—235 нм. MgH and MgD spectra in the 230—235-nm region. Balfour Walter J. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 79, № 2, 507—511 (англ.)

Получены с высоким разрешением и проанализированы спектры поглощения молекул MgH и MgD в области 230—235 нм. Подтверждена ранее предложенная идентификация полос в спектре молекулы MgH. Уточнены вращательные постоянные этой молекулы в состоянии  $^2\Pi$ . Показано, что P и R ветви полос 0—0 и 1—1 перехода  $^2\Pi-X^2\Sigma$  предиссоциированы состоянием  $B^{12}\Sigma^+$ . Серия дублетов в спектре MgH в области 235—233 осталась неидентифицированной. Слабая полоса в спектре поглощения молекулы MgD с началом 232,90 нм приписана переходу  $^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ . Для энергии диссоциации возбужденного состояния MgD ( $^2\Sigma^+$ ) получено значение  $\sim 15\,000\text{ см}^{-1}$ . Библ. 13.

MgH  
MgD

Ш. И.

ф. 1980. № 7

1980

MgH  
MgD

92: 67117m Magnesium hydride (MgH) and magnesium deuteride (MgD) spectra in the 230-235 nm region. Balfour, Walter J. (Dep. Chem., Univ. Victoria, Victoria, BC Can. V8W 2Y2). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 79(2), 507-11 (Eng). New observations on MgH and MgD spectra in the 230-235 nm range are reported and compared to previous work. For MgH, the main features of the 234.8-nm band as reported by A. Guntsh (1934, 1935, 1939) and by L. A. Turner and W. T. Harris (1937) were confirmed and extended and a considerable no. of addnl. lines were found in the same spectral region. The obsd. lines all of which occur both in absorption and emission, can be divided into 3 independent groups: (1) the Q branch of a  ${}^2\Pi-X^2\Sigma^+$  0-0 band; (2) the Q branch of the corresponding 1-1 band; and (3) a series of regularly spaced doublets (doublet splitting 1.5-2 cm<sup>-1</sup>). For MgD, a very weak band of somewhat unusual appearance was obsd. near 232.9 nm; line assignments are given.

M.H.



O.A. 1080.92, 108

1980

MgH  
MgD

16 Б190. Спектры MgH и MgD в области 230—235 нм. Balfour W. J. MgH and MgD spectra in the 230—235-nm region. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 79, № 2, 507—511 (англ.)

Сфотографированы спектры поглощения и испускания молекул MgH и MgD в области 230—235 нм. Приведены волновые числа линий вращательной структуры Q-ветви полос 0—0 и 1—1 системы  ${}^2\Pi-X^2\Sigma+MgH$ . Абсолютная нумерация линий по  $N$  в полосе 1—1 не определена. Получены след. мол. постоянные  $\nu_0=42573,7 \text{ см}^{-1}$ ,  $B'-B''=+0,415 \text{ см}^{-1}$ ,  $D'-D''=1,1 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ ,  $\Delta G'_{1/2} \sim 1550 \text{ см}^{-1}$ . В области 233—235 нм наблюдались серии дублетов, отнесение к-рых не дается.

M117.

L 1980 N 16

На основании отсутствия во вращательной структуре  
 полос MgD Q-ветви, а также линейной зависимости  
 величины спинового расщепления от  $N$  в P и R-вет-  
 вях наблюдаемых в этом диапазоне, спектр отнесен к  
 переходу  ${}^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ . Аномалии в интенсивностях линий  
 вращательной структуры при высоких  $N$  являются,  
 по-видимому, следствием возмущений в верхнем элек-  
 тронном состоянии. Согласно результатам выполненных  
 ранее расчетов с этим состоянием коррелируют атомы  
 Mg ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 4p^1; {}^2P$ ) + H ( $1s^1; {}^2S$ ) (в этом случае  
 энергия диссоциации молекулы  $\approx 15\,000$  см $^{-1}$ ).

В. М. Ковба



1980

MgH

MgD

(M.N.)

92: 101791p Magnesium hydride (MgH) and magnesium deuteride (MgD) spectra in the 230-235 nm region. Balfour, Walter J. (Dep. Chem., Univ. Victoria, Victoria, BC Can. V8W 2Y2). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 79(2), 507-11 (Eng). The main features of the 234.8-nm band of MgH as reported by A. Guntch (1934, 1935, 1939) and by L. A. Turner and W.T. Harris (1937) were confirmed and extended and a considerable no. of addnl. lines were found in the same spectral region. The obsd. lines, all of which occur both in absorption and emission, can be divided into 3 independent groups: (1) the *q* branch of a  $2H-X^2\Sigma^+$  0-0 band; (2) the *q* branch of the corresponding 1-1 band; and (3) a series of regularly spaced doublets (doublet splitting 1.5-2 cm<sup>-1</sup>). The absorption spectrum of heated Mg/D<sub>2</sub> mixts. exhibits a very weak band of somewhat unusual appearance near 232.9 nm. The transition has as its lower state the  $v=0$  level of  $X^2\Sigma^+$  MgD. The absence of identifiable *Q* lines and the observation of spin-splitting varying linearly with *N* in the *R* and *P* branches suggest a  $2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$  transition.

C. A. 1980. 92. N12

MGH

1980

Becker P.

Electron and Magn.  
Densities Mol. and Cryst.  
Lect. NATO Adv. Study  
Inst. Arles, 1978, New-York  
London, 1980, 569-70

ew.  
noct.

Cue Bem ; III

1980.

MgH

Jiang Feng-Lin, et al.

молекулы.  
эмфунт,  
букенна,  
расчет

Tsui Hua Hsueh Pao  
1980, 1 (1), 65-72

$\text{Al}_2\text{M}_2$

1980

Sakai Yoshiko, et al.

Int. J. Quantum Chem.

1980, Quantum Chem.

Symp. N4, 107-112.

расчёт  
равновесн.  
геометрии

(сер. NaF; III)

MgH<sup>+</sup>

Commun 12736 | 1980.

Tripathi R, Rai S.B.

from,  
M.N.

Indian J. Pure and  
Appl. Phys., 1980, 18,

● 372 - 7ef.

Algh

annua 9944 1980

Trivedi H.P., et al

paper  
M.N.

J. Chem. Phys., 1980, 72,  
N5, 3438-39.

● (see Ref) III

МгМ<sup>+</sup>

1980

Kirillov Yu. B., et al.

Кв. сек.  
патри

Deposited Doc. 1980,  
VINITI 1685-80, 29 pp.

●  
(с. Вет<sup>+</sup>; III)

$MgMg^{2-}$   
 $MgH_3^-$

Кв. мех.  
расчет,  
равновесн.  
геометрия.

1981

Болдырев А.У. и др.  
Тез. докл. 14<sup>го</sup> Всес. Чува-  
шевского совещ. по химии  
кочии. соедин., 1981,  
Ч. 2. Иваново, 1981, 655

● (ан.  $BeH_3^-$ ; III)



ЛГМ

1981

4 Б1705. Начальные вращательные распределения, полученные методом лазерной накачки и зондирования. Breckenridge W. H., Umemoto H. Initial rotational distributions using a laser pump-and-probe technique. «J. Photochem.», 1981, 17, № 1—2, 101 (англ.)

Метод лазерной накачки и зондирования использовали для определения начального распределения по вращательным квантовым состояниям  $MgH$  ( $v=0$ ), получаемого в р-ции  $Mg(3s3p^1P_1)$  с рядом углеводородов и с  $H_2$ . Для всех углеводородов распределения одинаковы, максимум находится при  $N=10$ . Они похожи на уширенное больцмановское распределение с  $T=1500$  К, что указывает на быструю атаку по индивидуальной связи C—H под углом  $\sim 180^\circ$  (отрыв). Для  $H_2$  вращательное распределение совершенно другое, двухмодовое. Населенности вращательных состояний большей компоненты возрастают до  $N=30$ , что интерпретируется как результат преимущественного угла атаки  $\sim 90^\circ$  (внедрение), а меньшая компонента является больцмановской с  $T \sim 1000$  К. Она интерпретируется как результат атаки при углах  $\sim 180^\circ$  С.,

Л. И. Лившин

вращат.  
распредел.

Х. 1982, 19, № 4.

MgH

1981

( $X^2\Sigma^+$ ,  $v=0$ )

вращам-  
состояние

95: 176014h Bimodal rotational quantum state distribution of magnesium hydride ( $MgH(X^2\Sigma^+, v=0)$ ) in the reaction of atomic magnesium ( $3s3p\ ^1P_1$ ) with diatomic hydrogen: evidence for microscopic branching. Breckenridge, W. H.; Umemoto, H. (Dep. Chem., Univ. Utah, Salt Lake City, UT 84112 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(8), 4153-5 (Eng). The initial rotational state distribution was detd. of the product  $MgH(X^2\Sigma^+, v=0)$  in the rapid reaction of  $Mg(3s3p\ ^1P_1)$  with  $H_2$  by using a pump-and-probe method (B. and U., 1981). There is little barrier for formation of linear or nonlinear transition-state configurations resulting in the microscopic branching (J. C. Polanyi et al., 1979) and a bimodal distribution of product rotational states.

C. A. 1981, 95, ~20

Algh†

Lommuca 11506 | 1981

Laerrenzi B. J.

. faeres

(do)

J. Chem. Phys., 1981, 74

(3), 1840-51.

MgH

Compend 12874 | 1981.

Pandey R.P., et al.

M. n; Do.

факт  
номер.  
номер.

Indian J. Chem.,  
1981, A20 (6)

● 592-93.

Сел Lit; III)

MgH

1981.

Svyatkin I.A.

Deposited Doc. 1981,

(fmr) JB

VINITI 3167-81, 110-112.

(сч. MgO; III)

МдН

1981

Святкин Ч. А.

спектр  
показат.

ф.т.н

Автореф. диссертации  
на соискание ученой  
степени кхн. М.: ИГУ,  
1981.

MgH

Оттиск (14131) 1982

20 Б21. Спиновое расщепление в состоянии  $X^2\Sigma^+$  молекулы MgH. Cooper David L. Spin splitting in the  $X^2\Sigma^+$  state of MgH. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 7, 3692—3693 (англ.)

С точностью до 2-го порядка теории возмущений вычислена константа спин-орбитального взаимодействия для состояния  $X^2\Sigma^+$  молекулы MgH. Найдено, что основной вклад в константу для колебательного подуровня  $v=0$  вносит взаимодействие с состоянием  $A^2\Pi_r$ . Полученная константа  $\gamma_0=0,019 \text{ см}^{-1}$  сравнена с постоянной  $\lambda$ -удвоения. В. Б. Павлов-Веревкин

М.П.

X. 1982, 19, N 20

MgH

Оммуек 14431

1982

196: 189820p Spin splitting in the  $X^2\Sigma^+$  state of magnesium hydride (MgH). Cooper, David L. (Harvard-Smithsonian Cent. Astrophys., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(7), 3692-3 (Eng). The spin splitting const. for the  $X^2\Sigma^+$  state of MgH was calcd. as  $\gamma_0 = 0.019 \text{ cm}^{-1}$  by using second-order perturbation theory with ab initio wave functions. The nature of the spin splitting const. is considered and comparison is made with the  $\Lambda$ -doubling parameter  $p_0$ .

носм.

сумм. пацисена.

$X^2\Sigma^+$

С. А. 1982, 96, N 22



AlqH

1982

Jain P.C., Kauer A.J.,  
et al.

( $2, W_2Xe$ , Indian J. Chem., Sect.  
D<sub>e</sub>-разделу) A 1982, 21A (10), 945-  
-948.

(Сер. 2<sup>x</sup> ат. раздѣлу LiH; III)

MgH

1982

Dhwada Ken.

расчёт J. Chem. Phys., 1982,  
сер. русск. 77, N 1, 424-428.  
и E.

(сер. ВЕВ; III)

NgH

[Ummuck 13987]

1982

Okwada K.,

Кв. мех.  
расшир.

J. Chem. Phys., 1982,

76, NS, 2565-2568.

MgH<sup>+</sup>

Omnisc 13917

1982

факторы

Singh P. D., De Almeida

A. A.

франка-

J. Quant. Spectrosc. and  
Radiat. Transfer. 1982,

Кондома

27, N4, ● 471-479.

NgM

1982

Ramani K., Ghod-  
gaonkar A. M.

Indian J. Chem., 1982,  
A21, N8, 803-804.

पाचिस  
म. न.

(Ser. Li H; III)

MgH

1982

98: 24963r The  $A^2\Pi-X^2\Sigma$  and  $C^2\Pi-X^2\Sigma$  electronic transition strengths in a magnesium hydride molecule. Svyatkin, I. A.; Kuznetsova, L. A.; Kuzyakov, Yu. Ya. (USSR). *Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim.* 1982, 23(5), 446-8 (Russ). Anal. of the previously reported (S., et al., 1980) absorption spectra of MgH mol. obtained behind a reflected shock wave gave the values  $S_e = 10.4 \pm 1.6$  and  $6.7 \pm 1.3$  a.u. for the oscillator strengths of the  $A^2\Pi - X^2\Sigma$  and  $C^2\Pi - X^2\Sigma$  electronic transitions. The former value agrees well with that obtained spectroscopically by D. L. Lambert, et al. (1971) but substantial differences exist with the data obtained by other methods.

$A^2\Pi - X^2\Sigma$

$C^2\Pi - X^2\Sigma$

C. A. 1983, 98, N4.

MgH

1982

3 Д532. Силы  $A^2\Pi-X^2\Sigma$  и  $C^2\Pi-X^2\Sigma$  электронных переходов молекулы MgH. Святкин И. А., Кузнецова Л. А., Кузьяков Ю. Я. «Вестн. МГУ. Химия», 1982, 23, № 5, 446—448

С помощью измерения интенсивностей в спектрах поглощения, полученных за фронтом отраженной ударной волны, определены силы  $A^2\Pi-X_2\Sigma$  ( $10,4 \pm \pm 1,6$  ат. ед.) и  $C^2\Pi-X^2\Sigma$  ( $6,7 \pm 1,3$  ат. ед.) переходов молекулы MgH. Величина силы  $A^2\Pi-X^2\Sigma$ -перехода удовлетворительно согласуется с литературными данными.

Автореферат

М.П.

р. 1983, 18, N 3

MgH

1982

4 Б218. Силы  $A^2\Pi-X^2\Sigma$  и  $C^2\Pi-X^2\Sigma$  электронных переходов молекулы MgH. Святкин И. А., Кузнецова Л. А., Кузьяков Ю. Я. «Вестн. МГУ. Химия», 1982, 23, № 5, 446—448

С помощью измерения интенсивностей в спектрах поглощения, полученных за фронтом отраженной ударной волны, определены силы  $A^2\Pi-\Sigma_2\Sigma$  ( $10,4 \pm 1,6$  ат. ед.) и  $C^2\Pi-X^2\Sigma$  ( $6,7 \pm 1,3$  ат. ед.) переходов молекулы MgH. Величина силы  $A^2\Pi-X^2\Sigma$ -перехода удовлетворительно согласуется с лит. данными.

Из резюме

Вероятность  
переходов

X. 1983, 19, N 4



MgH

1983

12 Д287. Резонансы формы и сечение фотодиссоциации MgH вблизи порога. Shape resonances and the photodissociation cross section of MgH near threshold. Bhattacharyya S. S., Basu D. «Chem. Phys.», 1983, 79, № 1, 129—135 (англ.)

В рамках полуклассич. метода Коннора (Конног J. N. L. «Mol. Phys.», 1968, 15, 621) рассчитаны сечения фотодиссоциации MgH из основного состояния  $X^2\Sigma^+$  с  $v=0$  и вращательным квантовым числом  $J=12-31$  через промеж.  $B'^2\Sigma^+$ -состояние и исследовано их поведение вблизи порога, где резонансы формы, отвечающие квазисвязанным состоянием, существенно влияют на зависимость сечения от длины волны исходного излучения. Л. Н. Иванов

сечение  
фотодис-  
социации

ф. 1983, 18, № 12

MgH

1983

3 Л284. Определение не искаженных релаксацией распределений по вращательным состояниям с помощью методики накачки и пробы. Measurement of unrelaxed rotational distributions using the laser pump-and-probe technique. Breckenridge W. H., Umemoto H. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 101, № 4—5, 377—380 (англ.)

Изучена столкновительная релаксация распределения по вращательным квантовым состояниям молекул MgH( $X^2\Sigma^+$ ,  $v=0$ ), образуемых при реакции  $H_2$  и  $SiH_4$  с  $Mg(3s3p^1P_1)$ , путем удлинения времени задержки второго пробного импульса лазера в т. наз. лазерном методе «накачки и пробы». Этот метод использует «временную» изоляцию продуктов, получаемых при однократном столкновении. Возбужденные атомы создаются с помощью короткого лазерного импульса, а распределение продукта MgH( $X^2\Sigma^+$ ,  $v=0$ ) по квантовым состояниям регистрируется (через индуцированную флуоресценцию) посредством другого короткого лазерного

спектр

ср. 1984, 18, №3

импульса, отстоящего от первого на некоторый промежуток времени (от нескольких наносекунд и больше). Показано, что эмпирический «масштабный» закон воспроизводит процесс релаксации достаточно хорошо и что распределения, найденные при наименьших экспериментально доступных временах задержки, существенно не искажено вторичной столкновительной релаксацией.

А. П. Калинин



AlqH

1983

Cooper D.L., Black J.H.

J. Chem. Phys., 1983,  
78, N3, 1371-1376.

u.n.

(see  $\bullet$  ALH<sup>+</sup>; III)

MgH

1983

12 Д289. Фотодиссоциация MgH в атмосфере Солнца. Photodissociation of MgH in the solar atmosphere. Datta K. K., Basu D., Saha Samir, Barua A. K. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1983, 16, № 13, 2377—2384 (англ.)

Рассчитаны сечения фотодиссоциации молекулы MgH, обусловленной электронным возбуждением ~~X<sup>2</sup>Σ<sup>+</sup>~~ → B'<sup>2</sup>Σ<sup>+</sup>. В расчетах использованы теоретич. кривые потенц. энергии и ф-ции дипольного момента перехода (Saxon R. P. et al. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, 5301). Вращательное квантовое число J положено равным 18, что соответствует максимуму заселенности при t-ре 5780 К. Сечения получены для всех существующих при этом значениях J колебательных уровней состояния X и для всевозможных длин волн переходов (2500—4600 Å). Найдено, что скорость фотоионизации MgH для планковского распределения энергий излучения при 5780 К (в условиях атмосферы Солнца) равна  $1,91 \cdot 10^2 \text{ с}^{-1}$ .

А. В. Зайцевский

фотодиссоциация

ср. 1983, 18, N 12

Mgtl

OM. 20049

1983

Kaur A. J. (et al.), Singh et al.,  
et al.,

теор.  
анализ  
оп-ер  
потенци.  
энергии

Indian J. Phys., 1983,  
BSF, NS, 334-343.

МгН

1984

7 Л391. Распределение внутренней энергии возбуждения радикалов MgH, образующихся в реакции атомов Mg ( $3s3p^1P_1$ ) с различными многоатомными молекулами. Nascent internal energy distributions of MgH produced in the reaction of Mg( $3s3p_1P_1$ ) with a variety of polyatomic molecules. Breckenridge W. H., Umamoto H. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 9, 3852—3865. (англ.)

Методом возбуждаемой лазером флуоресценции с разрешением во времени изучено вращательное распределение радикалов MgH ( $v=0,1$ ), образующихся в реакции атомов Mg ( $3s3p^1P_1$ ) с различными многоатомными молекулами. Атомы Mg ( $^1P_1$ ) генерировались путем лазерной накачки паров Mg/He излучением  $\lambda=2852$  нм. Установлено, что вращательное распределение для большинства реакций имеет бимодальный характер. Для всех исследованных соединений, содержащих связи C—H, N—H и O—H, за исключением  $(CH_3)_2O$  и  $(C_2H_5)_2O$ , доля радикалов с высоким вращательным возбуждением составляет  $0,5 \pm 0,1$ . Для реакций с моле-

спектр

ср. 1985, 18, № 7

кулами  $\text{SH}_4$ ,  $\text{PH}_3$  и  $\text{GeH}_4$  эта величина  $>0,9$ . Полученные результаты объяснены влиянием стерич. факторов в исследованных реакциях. Проведено также сопоставление результатов измерений с аналогичными данными для реакций атомов  $\text{O}(^3P)$ ,  $\text{O}(^1D)$ ,  $\text{F}(^2P)$ . В. А. Е.



MgH

1984

10 Б4435. Первичное распределение по внутренним энергиям радикалов  $\text{MgH}$ , полученных в реакции атомов  $\text{Mg}(3s3p^1P_1)$  с рядом многоатомных молекул. *Nascent internal energy distributions of MgH produced in the reaction of Mg(3s3p<sup>1</sup>P<sub>1</sub>) with a variety of polyatomic molecules.* Breckenridge W. H., Umemoto H. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 9, 3852—3865 (англ.)

Методом лазерной накачки и зондирования исследовали перв. распределения по вращат. квант. состояниям N радикалов  $\text{MgH}$  ( $v=0,1$ ), полученных в р-ции возбужденных атомов  $\text{Mg}^*(3s3p^1P_1)$  с рядом многоатомных молекул (22 соед.). В потоке смеси He-пары Mg (полное давл.  $\sim 17$  Торр) с добавкой 0,2—1,2 Торр соед. RH светом 2852 А импульсного лазера на красителе возбуждали атомы Mg и с временем задержки  $\sim$ неск. нс при помощи 2-го лазера на красителе методом лазерно-индуцированной флуоресценции зондировали радикалы  $\text{MgH}$ , образованные в р-ции  $\text{Mg}(^1P_1) + \text{RH} \rightarrow \text{MgH}(X^2\Sigma^+) + \text{R}$ . Энергии, выделяющиеся в этом процессе, обычно составляют 31—53 ккал/моль (для  $\text{RH}=\text{CH}_4$  это 28 ккал/моль), т. е. превышают энергию

спектр

Х. 1985, 19, N 10

связи радикала  $MgH$  (29,3 ккал/моль), т. е. в этих р-циях могут заселяться практически все внутр. квантовые состояния  $MgH$ . Найденные вращат. распределения бимодальны: они обнаруживают два максимума — при низких ( $N \approx 10$ ) и при больших значениях  $N$ . Для всех  $RH$ , содержащих хим. связи  $C-H$ ,  $N-H$  и  $O-H$ , за исключением  $Me_2O$  и  $Et_2O$ , к-рые дают  $MgH$  лишь с очень малым вращат. возбуждением, доля компоненты  $MgH$  с большими значениями  $N \alpha = 0,5 \pm 0,1$ . В случае  $RH = SiH_4$ ,  $GeH_4$  и  $PH_3$   $\alpha \geq 0,9$ . Эти результаты интерпретированы по аналогии с известными из лит. закономерностями для р-ций атомов  $O(^3P)$ ,  $O(^1D)$  и  $F(^2P)$  на основании представлений о конкуренции различных путей атаки атомов  $Mg^*$  молекул  $RH$ : боковой (с внедрением в молекулу) и концевой (с отщеплением атома  $H$ ). Колебат. возбуждение  $MgH$  обычно мало при всех  $RH$ , что объясняется крайне «поздним» выделением энергии в кинематич. условиях соударения в системе типа «тяжелая частица — легкая частица — тяжелая частица».

В. Е. Скурат

пр.  
оооме

р

1984



8 Б1016. Неэмпирические квантовомеханические расчеты  $MgH^+$  и  $Mg_2H^+$ . Liu Hong-Lin, Chen Nian-Yi, Dai Ding-Guo, Hua Guo-Dong. «Хуасюэ сюэбао, Acta chim. Sin.», 1984, 42, № 11, 1123—1127 (кит.; рез. англ.)

Методом ССП рассчитаны потенциальная кривая  $MgH^+$  и сечения потенциальной поверхности  $Mg_2H^+$ , соотв. линейным конфигурациям  $MgHMg^+$  (симметрия  $D_{\infty h}$ ) и  $MgMgH^+$  (симметрия  $C_{\infty v}$ ). Использован миним. базис сгруппированных гауссовых ф-ций OCT-3Г. Проведен анализ заселенностей по Малликену. Для  $MgH^+$  получено равновесное расстояние  $r_{MgH} = 1,60$  А; заряд на Mg составил 1,5963, на H — 0,5963. Для конфигурации  $MgHMg^+$  получено  $r_{MgMg} = 2,41$  А,  $r_{MgH} = 1,63$  А; заряд на Mg, не связанном с H, составил 0,6455, на Mg, связанном с H, 1,0725, на H — 0,7180. Для конфигурации  $MgHMg^+$  получено  $r_{MgH} = 1,73$  А. Конфигурация  $MgHMg^+$  имеет энергию на 50 ккал/моль более высокую, чем  $MgMgH$ . Полученные результаты о длине связи MgH достаточно хорошо согласуются с эксперим. данными. Обсуждена устойчивость рассмотренных конфигураций  $Mg_2H^+$ . А. А. Сафонов

расчет по метр., стр.

М.П. 17(4)

Х. 1985, 19, № 8

1984

MgH<sup>+</sup>Mg<sub>2</sub>H<sup>+</sup>

102: 51166r Ab initio quantum chemical calculations of magnesium hydride cations (MgH<sup>+</sup> and Mg<sub>2</sub>H<sup>+</sup>). Liu, Honglin; Chen, Nianyi; Dai, Dingguo; Hua, Guodong (Shanghai Inst. Metall., Acad. Sinica, Shanghai, Peop. Rep. China). *Huaxue Xuebao* 1984, 42(11), 1123-7 (Ch). The potential energy curve of MgH<sup>+</sup> and the potential energy surface of Mg<sub>2</sub>H<sup>+</sup> were calcd. by quantum chem. ab initio SCF MO method with STO-3G basis set. The electronic wave functions and populations are obtained. The equil. internuclear distance of MgH<sup>+</sup> is 1.60 Å. There are two possible configurations of Mg<sub>2</sub>H<sup>+</sup>: C<sub>∞v</sub> and D<sub>∞v</sub>. The former is [Mg-Mg-H]<sup>+</sup>, with the bond lengths  $r_{\text{Mg-Mg}} = 2.41 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{Mg-H}} = 1.63 \text{ \AA}$ , and the latter is [Mg-H-Mg]<sup>+</sup>, with the bond length  $r_{\text{Mg-H}} = 1.73 \text{ \AA}$ . The total energy of the former is 50 kcal/mol, lower than that of the latter. The cause of the stability of these species are discussed. The result of calcul. about bond length of MgH<sup>+</sup> consists reasonably well with exptl. value. The conclusion about the stability of [Mg-Mg-H]<sup>+</sup> ion supports the hypothesis proposed by Porter (1977), based on the result of thermodynamical calcul.

потенци.

кривые,

структурн.

параметры,

ab initio

С. А. 1985, 102, № 6.

AlgH<sup>+</sup>

1984

Raber Douglas J,  
Raber Nancy K, et al.

Inorg. Chem, 1984, 23,  
N24, 4076-4080

meop.

раєрєєє

(cell. Li<sup>+</sup>; III)

MgH

(Om. 23 119) 1985

103: 203320x The spectrum of magnesium hydride. Bernath, Peter F.; Black, John H.; Brault, James W. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *Astrophys. J.* 1985, 298(1, Pt. 1), 375-81 (Eng). Emission spectra of the  $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$  system of MgH were studied at high resolu. and with high signal-to-noise ratio through the use of a Fourier transform spectrometer. On the basis of a rotational anal. of these data, frequencies are predicted for the lowest pure rotational transitions with an accuracy approaching  $\pm 30$  MHz. Frequencies of the (1,0) vibration-rotation lines were calcd. to an accuracy of  $\pm 0.002$   $\text{cm}^{-1}$ . The excitation and observability of MgH in interstellar clouds are discussed.

( $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ )

C.A. 1985, 103, N 24

MgH

1985

12 Д220. Сопоставление триплетной и синглетной реакционных способностей  $3s^1 3p^1$  состояний Mg с  $H_2$ . Теоретические неэмпирические исследования в рамках метода ССП-КВ. Triplet vs. singlet reactivity of  $3s^1 3p^1$  states of Mg on  $H_2$ . A theoretical ab initio SCF-CI investigation. Chaquin Patrick, Sevin Alain, Yu Hengtai. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 13, 2813—2818 (англ.)

Для исследования реакционной способности  $^3P$  и  $^1P$  состояний Mg в реакции  $Mg + H_2$  проведена серия неэмпирич. расчетов в рамках метода ССП-КВ. Рассматривались реакции, в которых расположение взаимодействующих партнеров соответствует точечным группам симметрии  $C_{2v}$  и  $C_{\infty v}$ . При рассмотрении реакционной способности  $^3P$ -состояния установлено, что наиболее предпочтительна реакция, соответствующая взаимному расположению частиц симметрии  $C_{\infty v}$ , при этом должны образовываться молекулы MgH, возбужденные на низко-

структура

(H) ⊗

ср. 1985, 18, N 12

MgH<sub>2</sub>

лежащие вращательные уровни. Реакции в  $^1P$ -состоянии должны идти в соответствии с взаимодействием Mg и  $H_2$ , соответствующим  $C_{2v}$  симметрии, с образованием изогнутой молекулы  $MgH_2$ . Далее возможен либо переход к линейной конфигурации молекулы  $MgH_2$ , либо распад угловой  $MgH_2$  на  $MgH$  и  $H$ . Образующиеся молекулы  $MgH$  должны быть возбуждены на высолежащие вращательные уровни. Этот вариант хорошо согласуется с эксперим. данными.

В. А. Куликов



MgH

10M-22695

1985

Yenc F., Brandt B. A.,

кривые  
потемн.  
Энергии,  
основн.  
состоян.

Spectrochim. Acta,

1985, A41, N10,

1211-1214.



MgH

[DM. 27587]

1985

(кличка) Kliber P.D. et al.,

Phys. Rev. Lett., 1985,

54, N 18, 2003.

Far-Wing ● Absorption

Profiles of a reactive  
Collision:  $Mg + H_2$ .

AlqH

1986

Bernath P. F.

лазерное  
спектр  
высокого  
разрешения.

AIP Conf. Proc.  
1986, 146, 443-6.

(см.  $\bullet$  CaOH; III)

MgH

От. 23808

1986

У 17 Б1185. Спектр гидрида магния в длинноволновой инфракрасной области. The far infrared spectrum of magnesium hydride. Leopold K. R., Zink L. R., Even-

son K. M., Jennings D. A., Mizushima M. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 3, 1935—1937 (англ.)

Измерены вращат. переходы молекулы MgH ( $X^2\Sigma^+$ ) в обл.  $\sim (1-2) \cdot 10^6$  МГц. Молекулы MgH образовывались в разряде постоянного тока при пропускании  $H_2$  (0,15 мм) над магнием. Получены след. значения молек. постоянных  $^{24}MgH(X^2\Sigma^+)$  (в МГц):  $B_0 = 171975,25$ ,  $D_0 = 10,5857$ ,  $\gamma_0 = 790,50$ ,  $\gamma_D = 0,159$ ,  $b_F = 307,2$ .

В. М. Ковба

(М.П.)

X-1986, 19, N17

MgH

(Am. 23808)

1986

104: 98456s The far infrared spectrum of magnesium hydride. Leopold, K. R.; Zink, L. R.; Evenson, K. M.; Jennings, D. A.; Mizushima, M. (Natl. Bur. Stand., Boulder, CO 80303 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(3), 1935-7 (Eng): Rotational spectra of MgH were obsd. by using a tunable far-IR spectrometer; this constitutes the 1st observation of the pure rotational spectrum of an alk. earth hydride. The obsd. transitions and their assignments are listed. The data consist of 2 types of transitions: those for which  $\Delta F = \Delta J = 1$ , and those for which  $\Delta F = \Delta J = 0$ . The rotational, centrifugal distortion, and spin rotation consts. are in good agreement with those obtained by P. F. Bernath et al. (1985) but are an order of magnitude more accurate.

вращат.  
спектр, и.п.

с.А. 1986, 104, N 12

$MgH^+$

1986

5 Б1034. Об энергии диссоциации молекулы  $MgH^+$ .  
On the dissociation energy of  $MgH^+$  molecule. Rajamanickam N. «Proc. Indian Acad. Sci. Chem. Sci.», 1986, 95, № 5—6, 489—492 (англ.)

Модифицированным методом РКР определена потенциальная кривая основного электронного состояния  $X^1\Sigma^+$  молекулы  $MgH^+$ . Изучена применимость ряда эмпирич. потенциальных функций для воспроизведения этой кривой. Найдено, что наиболее точным для аппроксимации является выражение, содержащее в качестве параметров электроотрицательности атомов. С помощью этого выражения оценена энергия диссоциации молекулы  $MgH^+$ :  $2,05 \pm 0,02$  эВ. В. Б. Павлов-Веревкин

(De)

X. 1987, 19, N5

Algh

1986

Lirk Lyndon Robert.

u. n.

Diss. Abstr. Int. B 1987,  
47 (11), 4563.

(Ces. CO; III)



MgH<sup>+</sup>

(OM. 29806)

1987

Fuentealba P., Reyes O.,

Расчет  
основн.  
составн.,  
колебани.  
частоты,  
До

Mol. Phys., 1987, 62,  
№ 6, 1291-1296.

MgH

[om. 2:8365]

1987

Fuentealba P., Reyes O.,

потенц.

крив.

основн.

состоян.,

де,

колебат.

частоты,

длина связи

J. Chem. Phys., 1987,

87, N 9, 5338-5345.



(see. LiH i II)

1987

Мг Н<sup>+</sup>

Гусейнов И.И.,  
Мурсалов Т.И. и др.

л. п.

Взаимодействие частиц  
с ядрами, атомами и  
молекулами. Баку, 1987,  
75-79.

(Сер. ● Вел<sup>+</sup>; III)

1987

Мг Н<sup>+</sup>

Гусейнов И.И.,  
Мурсалов Т.И. и др.

л. п.

Взаимодействие частиц  
с ядрами, атомами и  
молекулами. Баку, 1987,  
75-79.

(Сер. ● Вещ<sup>+</sup>; III)

MgH<sup>-</sup>

1987

Ortiz J. V.

Int. J. Quantum Chem.!

ii. n. Quantum Chem. Symp.,  
1987, N 21, 469-473.

(see  BeH<sup>-</sup>; III)

$\text{MgH}^+$

1987

Rytkko Pekka,  
Sundholm Tage, et al.

теор.  
расчит.

Mol. Phys. 1987,  
60(3), 597-604.

(см. ●  $\text{BeH}^+$ ; III)

MgH

[OM-27975]

1987

Richman R. W.,

Shi Z., et al.

no cm.  
pacuzera.

Chem. Phys. Lett.,

1987, 141, N3, 186-



- 192.

MgH

(DM. 29379)

1988

Barclay V. J.,

Wright J. S.

Chem. Phys., 1988,

121, 213, 381-391.

пометы.

кривые,

основы.

соединяю.

л. п.



NgH

(DM. 31363)

1988

Laaksonen L.,  
Müller-Plathe F., et al.,

(X<sub>2</sub><sup>+</sup>)

Chem. Phys. 1988, 89, 118,  
4903-4908.



MgH

Om 30568

1988

137858z Infrared diode laser spectra of magnesium hydride  
and magnesium deuteride (MgH and MgD) ( $X^2\Sigma^+$ ). Lemoine, B.;  
Grynck, C.; Destombes, J. L.; Davies, P. B. (Lab. Spectrosc.  
Lorraine, Univ. Sci. Tech. Lille, 59655 Villeneuve, Fr.). *J. Chem.*

*Phys.* 1988, 89(2), 673-7 (Eng). IR absorption spectra of Mg in its  
 $2\Sigma^+$  ground state were measured at Doppler limited resolu. in a d.c.  
discharge of H over Mg. Most of the transitions arise from the  
fundamental bands of  $^{24}\text{MgH}$  and  $^{24}\text{MgD}$ , but a few lines attributable  
to  $^{25}\text{Mg}$  and  $^{26}\text{Mg}$  species were detected, as well as  $v = 2 \leftarrow 1$  hot  
band transitions in  $^{24}\text{MgH}$  and  $^{24}\text{MgD}$ . Most of the lines are  
characterized by a doublet splitting due to the electron spin-rotation  
interaction which helps to distinguish them from the broader  
Rydberg transitions of at. Mg obsd. in the same spectral region. The  
spectra were analyzed in a combined fit with the far-IR pure  
rotational transitions which leads to an accurate set of mol.  
parameters either for each vibrational level or as Dunham coeffs.  
The mass dependence of the mol. parameters was examd. in terms of  
possible breakdown of the Born-Oppenheimer approxn.

UK crukmp

(A)  $\otimes$  MgD ●

C. A. 1988, 109, N 16.

Alg H<sup>+</sup>

(DM 31600)

1988

Murthy Nareedhara,

Indian. J. Pure and Appl.

De

Phys. 1988, 26, N8, c.

533-534.

(see Bell; III)

MgH

(OM. 31600)

1988

Murthy N.S.,

Indian J. Pure and Appl.

Phys., 1988, 26, N8, 533-534.

Re;

RKRV Potential Energy Curves.  
Dissociation Energies of some  
Diatomic Molecules.

Alg H Müller-Plathe Flo- 1989  
rian, Diercksen Geerd H.F. et al.  
Numer Determin. Electron.  
Struct. Atoms, Diatom. and  
al. n. Polyatom. Mol.: Proc, NATO  
Adv. Res. Workshop. Versailles,  
17-22 Apr., ● 1988. Dordrecht

etc., 1989. c. 311-315.  
(c.w. BeM; III)

МгН<sup>+</sup>

[от. 31283]

1989

Мусаев Д.Т., Чаркин О.Т.,

геометр.,  
энергия,  
неэмитирит.  
расчет.

Координатная линия,

1989, 15, №, 161-169.



Night<sup>†</sup>

[Om. 32 159 a"]

1989

Walther P., Grondler W.,

M.A. Z. Chem., 1989, 29, N 6,  
221.



MgH

1990

113: 220611s Laser spectroscopy on the MgH  $A^2\pi - X^2\Sigma^+$  band system. Hsiao, Tein Chai; Luo, Yeung Long; Lin, King Chuen; Luh, Wei Tzou (Dep. Chem., Natl. Taiwan Univ., Taipei, Taiwan 10764). *J. Chin. Chem. Soc. (Taipei)* 1990, 37(5), 473-8 (Eng). The  $A^2\Pi - X^2\Sigma^+$  electronic transition of MgH was studied by the laser excitation spectroscopy. Some new transitions were obsd. for the first time. Rotational parameters of the X and A state was derived and compared with other exptl. values.

$A^2\Pi - X^2\Sigma$

M.H.

C.A. 1990, 113, n 24

MgH<sup>+</sup>

(DM 33895)

1990

Walther P., Gründler W.,

Z. Chem. 1990, 30, 15,  
181-83.

Berechnung der Strukturen,  
Dipolmomente ● und Elektronen

dichten von Mydrüden der 3.  
Periode mit der FSGO-CI-Me-  
thode.

MgH

Om. 35131

1990

113: 141535s Laboratory measurements for the astrophysical identification of magnesium hydride (MgH). Zink, L. R.; Jennings, D. A.; Evenson, K. M.; Leopold, K. R. (Time Freq. Div., Natl. Inst. Stand. Technol., Boulder, CO 80303 USA). *Astrophys. J.* 1990, 359(2, Pt. 2), L65-L66 (Eng). A tunable far-IR spectrometer was used to observe the pure rotational spectrum of MgH in a d.c. discharge of H<sub>2</sub> with magnesium. The frequencies of the hyperfine components of the N = 1 → 0 transition are predicted to an estd. accuracy of ±350 kHz, which should be sufficient for the astrophys. identification of this species.

Prouty, am.  
C. A. K. M. P.

C. A. 1990, 113, IV 16

$MgH^+$

1992

21 Б1034. Связь в квазимолекуле  $(MgH)^+$ . Bonding in the  $(MgH)^+$  quasimolecule /García-Madroñal J. C., Mó O., Cooper I. L., Dickinson A. S. //J. Mol. Struct. Theochem. —1992.—260.—С. 63—79.—Англ.

Рассчитаны потенциальные кривые семи состояний  $1^3\Sigma$  трех состояний  $1^1\pi$  и четырех состояний  $3^1\pi$  молекулы  $MgH^+$ . Расчеты проведены полным методом конфигурац. вз-вия для двух валентных электронов с использованием локального основного потенциала  $Mg^{2+}$  в базисе  $(6s5p)$  на Mg и  $(6s3p)$  на H. Для расчета радиального и вращат. вз-вий между рассмотренными состояниями волновые ф-ции метода конфигурац. вз-вия модифицированы с помощью общего трансляц. множителя. А. А. Сафонов

М.Н.

X. 1993, N 21

MgH<sup>+</sup>

1992

- 8Д115. Связи в квазимолекуле (MgH)<sup>+</sup>. Bonding in the (MgH)<sup>+</sup> quasimolecule / García-Madroñal J. C., Mó O., Cooper I. L., Dickinson A. S. // J. Mol. Struct. Theochem.. — 1992. — 260. — С. 63—79. — Англ.

The potentials for the MgH<sup>+</sup> quasimolecule, including seven <sup>1,3</sup>Σ, three <sup>1</sup>Π and four <sup>3</sup>Π states have been calculated. The calculations were carried out in the framework of full configuration interaction (CI) for the two valence electrons, the interaction of these electrons with the MgH<sup>3+</sup> core being described through a local pseudopotential. The radial and rotational couplings between these states using the CI wavefunctions modified with a common translation factor are report also.

CP 1993, N 8

MgH<sup>+</sup>

1992

117: 198761z Bonding in the magnesium hydride ((MgH)<sup>+</sup>) quasimolecule. Garcia-Madronal, J. C.; Mo, O.; Cooper, I. L.; Dickinson, A. S. (Dep. Quim., Univ. Autonoma Madrid, Madrid, Spain 28049). *THEOCHEM* 1992, 92, 63-79 (Eng). The authors have calcd. the potentials for the MgH<sup>+</sup> quasimol., including seven <sup>1</sup>Σ, three <sup>1</sup>Π, and four <sup>3</sup>Π states. The calcs. were carried out within the framework of full CI for the two valence electrons, the interaction of these electrons with the MgH<sup>3+</sup> core being described through a local pseudopotential. They report also the radial and rotational couplings between these states using the CI wavefunctions modified with a common translation factor (CTF).

теор. расчет  
потенциалов  
φ-иπ

C. A. 1992, 117, N 20

Mg H

1993

de, Weke,  
оценка с  
помощью  
различн.  
моделей.  
потому.

Singh H. N., Singh V. B.

Indian J. Pure Appl.

Phys. 1993, 31 (5),

341-4.

● (см. Li H; III)



MgH

118

1993

118: 897:79 The millimeter-wave spectrum of the magnesium monohydride and monodeuteride radicals. Ziurys, L. M.; Barclay, W. L., Jr.; Anderson, M. A. (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). *Astrophys. J.* 1993, 402(1, Pt. 2), L21-L24 (Eng). The pure rotational spectrum of the MgH radical ( $X^2\Sigma^+$ ) in its ground state  $\nu = 0$  and  $\nu = 1$  vibrational modes was obsd. in the lab. using millimeter/submillimeter direct absorption spectroscopy. The rotational spectra of 2 isotopically substituted species, MgD and  $^{26}\text{MgH}$ , were detected as well. These free radicals were produced by the reaction of Mg, vaporized in a Broida-type oven, with H atoms generated in a microwave discharge. All 6 hyperfine components of the  $N = 0 \rightarrow 1$  transition of MgH were obsd. for  $^{26}\text{MgH}$ . The  $N = 0 \rightarrow 1$  and  $N = 1 \rightarrow 2$  transitions of MgD were also detected. Rotational, fine structure, and hyperfine consts. were detd. for all species from a nonlinear least-squares fit to the data using a  $^2\Sigma$  Hamiltonian. Measurement of these frequencies for MgH should greatly aid in establishing its presence in interstellar space.

$X^2\Sigma^+$ , MEMO -  
Kauzham - chert,  
Kauzham - nom

c.A. 1993, 118, N 10

NgH

(om. 37773)

1994

Boldyrev A.I., Penzalez N.,  
Simons J.,

$d_2^+$ ,  
D,  
Железун,  
теорет-  
ическ



J. Phys. Chem., 1994,  
98, N 40, 9931 - 9944.

MgH<sup>d+</sup>

1995

123: 179930m Ab initio energies and tunneling lifetimes of the doubly charged AH<sup>2+</sup> (A = Mg-Ar) diatomics. Nefedova, V. V.; Boldyrev, A. I.; Simons, J. (Dep. Chem., Univ. Utah, Salt Lake City, UT 84112 USA). *Int. J. Quantum Chem.* 1995, 55(6), 441-57 (Eng). Potential energy curves for the ground and low-lying excited states of the AH<sup>2+</sup> (A = Mg-Ar) dications have been calcd. using high-level ab initio methods with large AO basis sets. Quasibound potential energy curves with local min. and deprotonation barriers have been found for most of the dications studied. The energies, tunneling lifetimes, and widths of the quasibound states have been calcd. by numerical soln. of the radial Schroedinger equation using the Numeov method. All these dications except ArH<sup>2+</sup> have low-lying states which support quasibound vibrational states. The ArH<sup>2+</sup> dication has a <sup>2</sup>Π<sub>g</sub> potential energy curve with a min. so shallow that it does not support any quasibound vibrational states. Results of our calcns. are compared with previous ab initio calcns. and available exptl. data.

романы.  
 φ-ил  
 грейамоник  
 парем

(76)  AH<sup>2+</sup> 

SiH<sup>2+</sup>, PH<sup>2+</sup>, SH<sup>2+</sup>  
~~AlH<sup>2+</sup>~~, ~~ClH<sup>2+</sup>~~, ArH<sup>2+</sup>

C.A. 1995, 123, N 14

MgD

MgD<sup>+</sup>

(D<sub>0</sub>)

2000

134: 107299s Transition probabilities and dissociation energies of MgD and MgD<sup>+</sup> molecules. Raja, V.; Rajamanickam, N. (Phys. Res. Cent., VHNSN Coll., Virudhunagar, 626001 India). *Ukr. Fiz. Zh.* 2000, 45(8), 914-917. (Eng); Natsional'na Akademiya Nauk Ukraini, Viddilennya Fiziki i Astronomii. The Franck-Condor factors (vibrational transition probabilities) and r-centroids were evaluated by a more reliable numerical integration procedure for the bands of A-X system of MgD and MgD<sup>+</sup> mols., using a suitable potential. By fitting the Szoke-Baitz electronegativity function to the exptl. potential curve using a correlation coeff., the dissocn. energies for the electronic ground states of MgD and MgD<sup>+</sup> mols., resp., are estd. as  $D_0^0 = (157.60 \pm 0.32)$  and  $(195.71 \pm 0.80)$  KJmol<sup>-1</sup>.



C.A. 2001, 134, N 8