

Ng Hg

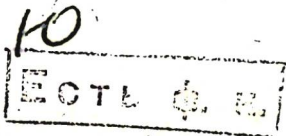
IX 2661

1962

из №2 (Vi)

Мальцева Н.Н., Каримжанов Ю. Я.,

Иссл. химии, 1962, 7, №4, 947-948



Р.Х., 1962, 235131

MgH<sub>2</sub> (Kp)

9

[K 779

1969

Bousquet J., Blanchard J.-M.,  
Bonnetot B., Claudy P.

Bull. Soc. chim. France, 1969, N6, 1341-1343

(frans.)

Analyse thermique différentielle sous pression d'hydrogène. Application: mesure des pressions de dissociation de l'hydruure de magnésium.

RH. Soc., 1970

451148

C

S

M (CP)

Y 2993

1971

Ze, 2497 (para, gas mixture  
light atoms III period)

910

14 11  
13

San Y., Frost A.A.,

Chem. Phys., 1971, 54, v2, 760-763  
(am)

Floating spherical Gaussian or-  
bital model of molecular struc-  
ture. VIII. Second-row atom hydrides.

ЕСТЬ ОРИГИНАЛ

Publ. Rev., 1971, 7D132 W. C. C. C.

статья 3221

1975

1-11

5060

69

MgH<sub>2</sub>

кв. мех. р.

(+5)

⊗

1 Б37. Расчеты молекулярных систем методами КВ-ПНО (конфигурационного взаимодействия в базисе парных натуральных орбиталей) и ПВЭП-ПНО (приближения взаимодействующих электронных пар в базисе парных натуральных орбиталей). III. Молекулы MgH<sub>2</sub>, AlH<sub>3</sub>, SiH<sub>4</sub>, PH<sub>3</sub> (плоская и пирамидальная), H<sub>2</sub>S, HCl, и атом Ar. Ahlrichs R., Keil F., Lischka H., Kutzelnigg W., Staemmler V. PNO—Cl (pair natural—orbital configuration interaction) and CEP—PNO (coupled electron pair approximation with pair natural orbitals) calculations of molecular systems. III. The molecules MgH<sub>2</sub>, AlH<sub>3</sub>, SiH<sub>4</sub>, PH<sub>3</sub> (planar and pyramidal), H<sub>2</sub>S, HCl, and the Ar atom. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 1, 455—463 (англ.)

Методами КВ-ПНО и ПВЭП-ПНО проведен расчет молекул MgH<sub>2</sub>, AlH, AlH<sub>3</sub>, SiH<sub>4</sub>, PH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>S, HCl при фиксированной геометрии ядер, а также атома Ar. Использовано два типа наборов базисных гауссовых функций: «малые» наборы включали d-орбитали одного типа, «стандартные» наборы — d-орбитали двух типов и f-орбитали одного типа на тяжелом атоме. Для MgH<sub>2</sub> и Ar использованы также «большой» и «очень большой» базисы, содержащие доп. поляризац. функции. Исследо-

x 1976 n 1

вано влияние добавления различных поляризац. функций, а также проведены оценки хартри-фоковского предела для молек. энергий. Рассчитанные корреляц. энергии для электронов валентной оболочки проанализированы с помощью величин, введенных в сообщ. I (см. РЖХим, 1975, 15Б25), в частности, с помощью корреляц. энергий  $\epsilon_\mu$  и ошибки  $\Delta E_{\text{ПНЭП}}$  приближения независимых электронных пар (ПНЭП). Межорбитальные парные корреляц. энергии для валентной оболочки и ошибки  $\Delta E_{\text{ПНЭП}}$  меньше по абс. величине, чем соответствующие величины для гидридов второго периода (при использовании представления локализованных орбиталей). Молекулы  $\text{MgH}_2$ ,  $\text{AlH}_3$  и  $\text{SiH}_4$  очень хорошо описываются приближением ПНЭП ( $\Delta E_{\text{ПНЭП}} \approx 0$ ). Для Ag приведены величины корреляц. энергий для K, L и M оболочек. Для эксперим. не обнаруженных молекул  $\text{MgH}_2$  и  $\text{AlH}_3$  предсказаны энергии связи, равновесные геометрии и силовые постоянные симм. вал. колебаний.  $\text{MgH}_2$  нестабильна относительно распада на Mg и  $\text{H}_2$ : энергия образования  $\text{MgH}_2$  из Mg и  $2\text{H}$  получена равной 104 ккал/моль. Энергия образования  $\text{AlH}_3$  из Al и  $3\text{H}$  получена равной  $\sim 205$  ккал/моль. Барьер инверсии в  $\text{PH}_3$ , равный 38 ккал/моль в приближении ССП, уменьшается при учете электронной корреляции до  $\sim 35$  ккал/моль. Сообщ. II см. РЖХим, 1975, 15Б26. Резюме

MgH<sub>2</sub>

Amuree 3221

1975

Bq-5060-IX

nb. sec.  
fraction

(+7)



103534v PNO (pair natural-orbital)-CI (configuration interaction) and CEPA (coupled electron pair approximation)-PNO calculations of molecular systems. III. - Molecules magnesium hydride, aluminum hydride, silane, phosphine (planar and pyramidal), hydrogen sulfide, hydrogen chloride, and the argon atom. Ahlrichs, R.; Keil, F.; Lischka, H.; Kutzelnigg, W.; Staemmler, V. (Inst. Phys. Chem., Univ. Karlsruhe, Karlsruhe, Ger.). *J. Chem. Phys.* 1975, 63(1), 455-63 (Eng). PNO-CI and CEPA-PNO calcs. were performed for the mols. MgH<sub>2</sub>, AlH, AlH<sub>3</sub>, SiH<sub>4</sub>, PH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>S, HCl, and the Ar atom. Two types of Gaussian basis sets are used; both sets contain 1 *p*-set on H. The small set includes 1 *d*-set on the heavy atom, the std. basis 2 *d*-sets and 1 *f*-set. Both for MgH<sub>2</sub> and Ar, a large and a very large basis are used as well, which contain addnl. polarization functions. The energy improvement due to the different polarization functions is analyzed. Hartree-Fock limits for the mol. energies are estd. The computed valence shell

C. A. 1975. 83.

N/2

correlation energies are analyzed in terms of the IEPA (independent electron pair) correlation energies  $\epsilon_{\mu}^{\text{IEPA}}$  and the error  $\Delta E^{\text{IEPA}}$  of the IEPA scheme. Both the valence shell interorbital pair correlation energies and the IEPA error are smaller in abs. value than those of the corresponding 1st row hydrides, provided that one uses the localized representation.  $\text{MgH}_2$ ,  $\text{AlH}_3$ , and  $\text{SiH}_4$  are good IEPA mols., i.e.,  $|\Delta E^{\text{IEPA}}|$  is usually small for them. For Ar, calcns. that include the  $L$  and  $M$  shell, and the  $K$ ,  $L$ , and  $M$  shell correlation energy are reported. The best known variational energy of the Ar atom is obtained as  $-527.2592$  at. units, the (nonvariational) CEPA energy being  $-527.2916$  at. units. For the unknown mols.  $\text{MgH}_2$  and  $\text{AlH}_3$ , binding energies, equil. geometries, and symmetric-stretching force consts. are predicted,  $\text{MgH}_2$  has a binding energy of  $104$  kcal/mole referred to  $\text{Mg} + 2\text{H}$ ; it is hence expected to be unstable with respect to  $\text{Mg} + \text{H}_2$ . The predicted binding energy of  $\text{AlH}_3$  is  $\approx 205$  kcal/mole referred to  $\text{Al} + 3\text{H}$ . The inversion barrier of  $\text{PH}_3$  which amts. to  $\approx 38$  kcal/mole on SCF level is reduced by electron correlation to  $\approx 35$  kcal/mole.

$MgH_2$

1976.

Чаркин О.П. и др.

Ж. неорг. хим. 1976, 21,  
№8, 2022-9

(расчет  
эл. сир.)

(ср  $BeF_2$ ) III

IX - 5257

1976

Ug H<sub>2</sub>, ClO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, PH<sub>2</sub>, PF<sub>3</sub>O, NH<sub>2</sub>Cl,  
SiH<sub>2</sub>, HCP, OCS, HNCS, CH<sub>2</sub>FCl, BCl<sub>3</sub>  
(кб. нек. паекст)

Marsh F. J., Gordon M.S.

J. Mol. Struct., 1976, 31, n2, 345-357

⊕

10

15

CA, 1976, 89, n24, 169958p

Alg H2

Alg M

Alg H0

Alg H7

(расчет  
за скуп.)

1976

Рубцов М. А. и др.

руж. гл. в. БИМММ  
3625-76 ДЕТ



(coll. BeF) III

Mg H<sub>2</sub>

Ryabov M. A. et al. 1977

Zh. Fiz. Khim 1977,

51(3) 770 (Russ)

(см Be F; III)

кв. мех.  
расчет  
электронн.  
структуры

1973

90; 44717b Determination of thermodynamic constants of simple and complex hydrides of aluminum. II. Measurement of molar heat capacities at 298 K. Claudy, P.; Bonnetot, B.; Letoffe, J. M.; Turck, G. (Lab. Phys.-Chim. Miner., Inst. Natl. Sci. Appl., Villeurbanne, Fr.). *Thermochim. Acta* 1978, 27(1-3), 199-203 (Fr). The molar heat capacities of  $MgH_2$ ,  $Mg(AlH_4)_2$ ,  $LiAlH_4$ ,  $NaAlH_4$ ,  $Li_3AlH_6$ ,  $Na_3AlH_6$ ,  $AlH_3$   $\alpha$  and  $\gamma$  were measured at 298 K with a Calvet microcalorimeter.

$MgH_2$   
 $Mg(AlH_4)_2$   
 $LiAlH_4$   
 $Li_3AlH_6$

$NaAlH_4$   
 $Na_3AlH_6$

(cp)

(+4)

~~4~~



$2-\gamma-AlH_3$

C. A. 1979, 90, N6

$MgH_2^{4-}$

ammonia 7228

1978.

$MgH_2^{3-}$

Takahata Y.

$MgH_2^{2-}$

Chem. Phys. Lett.,

1978, 59 (3), 472-77.

кв. мех.  
расчет,  
гроссвизч.



MgH<sub>2</sub>

ommuen 8738

1979

Кв. мех.  
растет

E, Ze, do  
сел. поет.

Рукко Р.

J. Chem. Soc. Faraday  
Trans. II, 1979, p1259-76

MgH<sub>2</sub>

1980.

Знобих А. С., Таракан О. П.

Рв. ссех.  
факет

Ис. ст. фукт. химии,  
1980, 21(3), 3-8.

(см. LiH; III)

MgH<sub>2</sub>

[номер 11249] 1980.

Höller R., et al.

Аб. мех.  
расчет

Mol. Phys., 1980, 41

матн. сб-ва

(5), 1041-50

$Mg + H_2$

Оттиск 11655

1981

18 Б46. Теоретическое исследование реакции  $Mg(3s3p, ^3P)$  с  $H_2$ . Adams Noah, Breckenridge W. H., Simons Jack. A theoretical study of the reaction of  $Mg(3s3p, ^3P)$  with  $H_2$ . «Chem. Phys.», 1981, 56, № 3, 327—335 (англ.)

С целью исследования механизма тушения возбужденных состояний атомов металла в присутствии молек. водорода проведены неэмпирич. квантовохим. расчеты поверхности потенциальной энергии системы  $Mg + H_2$  в низшем триплетном состоянии, отвечающей реакции  $Mg(3s3p, ^3P) + H_2 \rightarrow MgH + H$ . Расчеты выполнены в базисе ( $8s4p$  Mg;  $4s1p$  H). Использован неограниченный метод ССП и метод МК ССП с включением конфигурац. взаимодействия. Найдено, что при боковом сближении реагентов барьер для р-ции (сверх эндотермичности 11—12 ккал/моль) практически отсутствует ( $\geq 1,8$  ккал/моль). При терминальном сближении обнаруживается заметный барьер сверх эндотермичности реакции порядка 14 ккал/моль. Не обнаружено связанного или метастабильного триплетного состояния молекулы  $MgH_2$ .

А. Багатурьянц

поверхн.  
потенци.  
энергии

Ж 1981 N 18

$MgH_2$

Отмуч 11655 1981

/ 94: 214856y A theoretical study of the reaction of atomic magnesium ( $3s3p\ ^3P$ ) with diatomic hydrogen. Adams, Noah; Breckenridge, W. H.; Simons, Jack (Dep. Chem., Univ. Utah, Salt Lake City, UT 84112 USA). *Chem. Phys.* 1981, 56(3), 327-35. (Eng). Theor. calcns. on relevant portions of the potential surface of the 1st triplet state of  $MgH_2$  were done at the SCF and MCSCF CI level to learn more about the detailed mechanism of the reaction  $Mg(3s3p\ ^3P) + H_2 \rightarrow MgH + H$ . This reaction can proceed with essentially no activation barrier ( $\leq 1.8$  kcal/mol) above the reaction's 11-12 kcal/mol endothermicity via side-on attack by  $Mg(^3P)$  of the H-H bond; whereas end-on attack gives rise to a barrier of  $\approx 14$  kcal/mol above the endothermicity. Anal. of the orbital occupancy variations along the  $C_{2v}$  side-on approach coordinate indicates that  $Mg^+-H_2^-$  partial charge-transfer interactions are important. No indication of a bound or metastable triplet state of  $MgH_2$  was found.

Кв. лиз  
факет  
номеров.  
поверхн.

C.A. 1981. 94, N 26

$MgH_2$

1981

Pandey R. P., et al.

Indian J. Chem., 1981,  
A20, N6, 592-593.

parvini,  
et al.

(see  $LiH_2$ ; III)

MgH<sub>2</sub>

1989

re: C.N.  
bp.n.; Vi  
Kb. ex.p.

Sakai Yoshiko et al  
J. Comput. Chem., 1989,  
2 (1), 108-25.

● (see HCC) III

MgH<sub>2</sub>

MgH<sub>3</sub><sup>-</sup>

MgH<sup>-</sup>

теор.; Vi,

сч. по сф.

кв. всех,

расчет.

1981  
Сушаков А. П. и др.

Пез. докл. 14<sup>20</sup> Всес. Чу-  
гаевского совещ. по всс.  
есть комплексы соедин.  
1981, Ч. 2. Иванова, 1981,

653 - 654.

(сч. LiH; III)

Algt<sub>2</sub>

[Ommuck 14778]

1982

meopen-  
pacrem

Blickensolderfer R.,  
Jordan K.D., et al.,  
J. Phys. Chem., 1982,  
86, N11, 1930 - 1932.

$(\text{Alg } M_{k+1})^-$

1982

$k=2,3$

Boldyrev A. I.,  
Sukhanov L. P.,  
et al.

У,

теорет.,  
расчѣт.

Koord. Khim. 1982,  
8 (4), 430-436.

●  
(сер.  $(M_{k+1})^-$ ; III)

Mg H<sub>2</sub>

1982

Blickensderfer Roger  
P., Jordan Kenneth D.,  
et al.

Do, Vi;

J. Phys. Chem., 1982,  
86, N11, 1930 - 1932.

(see. ● Be H<sub>2</sub> ; III)

$Mg^{2+} \dots H_2$

1982

Pinchuk V. M.  
Sulimchenko A. N.

теорет.  
расчет

Zh. Fiz. Khim. 1982, 56  
(5), 1189-1193.

(см.  $Li^+ \dots H_2$ ; III)

$MgH_2$

1982

Характер  
связи,

Ковалент-  
ная связь

/98: 132631q Study of the bond type in magnesium hydride and aluminum hydride by positron annihilation. Yin, Dingzhen; Gu, Hua (Inst. High Energy Phys., Acad. Sin., Beijing, Peop. Rep. China). Nucl. Tech. 1982, (6), 61-3 (Ch). The bond type of  $MgH_2$  and  $AlH_3$  was studied by positron lifetime and Doppler widening of annihilation radiation. The results suggest covalent bonds for these compds.  $LiH$ ,  $ZrH_{1.9-2.0}$  and metals such as Al, Mg and Zr which are known to have ionic bonds, were also studied.

$\text{AlH}_3$

С. А. 1983, 98, N 16.

$\text{MgH} \cdot \text{Hk}^{\pm}$

1984

$(\text{MgH})_2 \text{Hk}^{\pm}$

Чаркин О. П.,  
Знобич А. С. и др.

расчет  
Тр. Моск. хим.-технол.  
ин-та, 1984, N 134,  
13-26

(соед.  $\text{Li}^+ \text{Hk}^{\pm}$ ; III)

MgH<sub>2</sub>

1984

6 Д105. О вычислении матричных элементов неадиабатического взаимодействия с использованием волновых функций МКССП-УС-КВ и аналитических градиентных методов Ч. I. On the evaluation of nonadiabatic coupling matrix elements using SA-MCSCF/CI wave functions and analytic gradient methods. I. Lengsfeld Byron H., Saxe Paul, Yarkony David R. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 10, 4549—4553 (англ.)

Предложен метод вычисления матричных элементов оператора неадиабатич. взаимодействия между электронными волн. ф-циями адиабатич. состояний молекулы, рассчитанными многоконфигурац. методом ССП (МКССП) с усреднением по состояниям (УС). Необходимые производные конфигурац. ф-ций состояния (КФС) и весов КФС по ядерным координатам получаются при помощи решения связанных возмущенных уравнений МКССП—УС. Для построения эффективной расчетной процедуры использована аналогия с аналитич. расчетом градиента потенц. энергии молекулы. Метод легко обоб-

расчет

ср. 1985, 18, № 6

щается на случай волн. ф-ций, построенных с дополнительным учетом конфигурац. взаимодействия (KB). Отмечены преимущества метода по сравнению с конечно-разностными процедурами. В качестве иллюстрации вычислены матричные элементы неадиабатич. взаимодействия двух низших электронных состояний системы  $\text{MgH}_2$  в области квазипересечения потенц. поверхностей, соответствующих  $\text{Mg}^c + \text{H}_2^0$  и  $\text{Mg}^+ + \text{H}_2^-$ .

А. В. Зайцевский



$\text{Mg H}_2^+$

1984

Немусин А. В., Сте-  
панов М. Ф.

расчёт  
 $\epsilon_i$ ,  
и. п.

Теор. и эксперим. ис-  
следования, 1984, 20, N2, 153-

● - 157.  
(Сел. ВЕ F; III)

MgH<sub>2</sub>

DM. 22 232

1985

1 Б1042. Сравнение реакционной способности Mg в синглетном и триплетном состояниях электронной конфигурации  $3s^1 3p^1$  по отношению к H<sub>2</sub>. Исследование неэмпирическим методом ССП КВ. Triplet vs. singlet reactivity of  $3s^1 3p^1$  states of Mg on H<sub>2</sub>. A theoretical ab initio SCF—Cl investigation. Chaquin P., Sevin A., Yu H. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 13, 2813—2818 (англ.)

поверхность  
потенц. энергии

Неэмпирическим методом ССП с учетом КВ в рамках пертурбационно-вариационного подхода (алгоритм CIPSI, S. Evangelisti, J. P. Daudey, J. P. Malgouyres «J. Chem. Phys.», 1983, 75, 91) исследованы Пв потенциальной энергии (ППЭ) реакции Mg+H<sub>2</sub> в основном и низших возбужденных синглетных и триплетных состояниях, коррелирующих с состояниями атома Mg с конфигурацией  $3s^1 3p^1$ . Расчеты выполнены в базисе 6-31 ГФ\*\* и

X. 1986, 19, 41

в том же базисе, но без  $d$ -АО на Mg. Найдено, что в основном состоянии как перпендикулярный, так и линейный подход Mg к  $H_2$  приводят к отталкиванию. В случае состояния Mg  $^1P$  перпендикулярный подход приводит к понижению энергии, тогда как линейный подход эндотермичен. В случае перпендикулярного подхода образующийся эксиплекс может адиабатически перейти на ППЭ основного состояния с образованием устойчивого линейного  $MgH_2$ , либо образовать  $MgH + H$  через диссоциационный канал р-ции. Последний путь более вероятен.

А. А. Багатурьянц

MgH<sub>2</sub>

(Om. 22232)

1985

103: 27496y Triplet vs. singlet reactivity of 3s<sup>1</sup>3p<sup>1</sup> states of magnesium on molecular hydrogen. A theoretical ab initio SCF=CI investigation, Chaquin, Patrick; Sevin, Alain; Yu, Hengtai (Lab. Chim. Org. Theor., Univ. Pierre et Marie Curie, 75230 Paris, 05 Fr.), *J. Phys. Chem.* 1985, 89(13), 2813-18 (Eng). The reactions between Mg and H<sub>2</sub> were studied on the basis of ab initio calcs., within C<sub>2v</sub> and C<sub>∞v</sub> point groups. A complete set of model potential energy surfaces (PES's) were also calcd. for the reactions Mg + H<sub>2</sub> → MgH<sub>2</sub> and Mg + H<sub>2</sub> → MgH + H. The only attractive PES is of <sup>1</sup>B<sub>2</sub> symmetry, and a triangular exciplex is found along this surface. The formation of MgH + H rather than MgH<sub>2</sub> from this exciplex is discussed as well as the existence of two reactive channels yielding MgH + H.

no metal.  
no peroxide,  
ab initio  
pariem

C. A. 1985, 103, N 4.

Kleiber P.D et al. Phys. Rev. Lett. 54, 18, p.2000-  
Far-Wing Absorption Profiles of a  
Reactive Collision:  $\text{Hg} + \text{H}_2$  1985.

$\text{Hg H}_2^*$ ,  $\text{Hg H}$  (Kukeruka)

Dybbob B.C.

MgH<sub>2</sub>

От 23014

1985

7 8 Б4540. Фотохимический синтез дигидрида магния и метилгидрида магния в криогенных матрицах. Photochemical synthesis of magnesium dihydride and methyl magnesium hydride in cryogenic matrices. McCaffrey John G., Parnis J. Mark, Ozin Geoffrey A., Breckenridge W. H. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 23, 4945—4950 (англ.)

Методом абсорбц. ИК-спектроскопии изучены продукты Фт светом в полосе резонансного перехода Mg ( $3p^1P \leftarrow 3s^1S$ ) атомов Mg, захваченных в матрицах Ar, Kr или Xe при т-ре 10—12 К, содержащих H<sub>2</sub> в кол-ве 1:10, или в метановой матрице. Полоса резонансного перехода атомов Mg в газовой фазе лежит при 2852,1 А, а в Ar, Kr, Xe — при 2815, 2836 и 2914 А соотв. В матрицах редких газов, содержащих H<sub>2</sub>, наблюдали образование MgH<sub>2</sub> без признаков фрагментации на MgH + H, к-рая является единственным процессом при аналогичной р-ции в газовой фазе. Это различие между матрич-

Х. 1986, 19, № 8.

ным и газофазным Фт объяснено клеточным эффектом матрицы и различиями скоростей колебат. релаксации в конден. и в газовой фазах. В процессе Фт Mg в матрице Хе наблюдали эмиссию света Mg в переходах  $3p^1P \rightarrow 3s^1S$  и  $3p^3P \rightarrow 3s^1S$ , а при Фт Mg в матрице метана — более длинноволновую эмиссию, природа которой обсуждается.

В. Е. Скурат

Mg H<sub>2</sub>

1985

Kobayashi Hisayoshi,  
Koga Toshikatsu.

Theor. chim. acta, 1985,  
67, N 1, 1-10.

(cu. Si H<sub>2</sub>; III)

$Mg^{2+} \dots H_2$

1985

Энергия  
связи,  
равновес.  
расст.,  
спектроск.  
посей.

Темчук В. М., Соро-  
ченская В. Е., и др.  
Координат. химия,  
1985, 11, N 2, 147-149.

(см.  $Li^+ \dots H_2$ ; III)

1988

MgH<sub>2</sub>

Богаринцева Е. М.

Астрон. циркуляр.

м.н.

1988. N 1527. С. 11-12.

●  
(см. MgO; III)

MgH<sub>2</sub>

1988

' 109: 135205k Electronic and structural properties of magnesium hydride. Yu, Rici; Lam, Pui K. (Dep. Phys. Astron., Univ. Hawaii Manoa, Honolulu, HI 96822 USA). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1988, 37(15), 8730-7 (Eng). The electronic and structural properties of MgH<sub>2</sub> were calcd. using an ab initio pseudopotential method. The calcd. quantities are the equil. structural parameters, the cohesive energy, a few selected elastic consts., the bulk modulus, the phonon frequency of a zone-center optical mode involving H vibration, the energy-band structure, the d. of states, and the electronic charge distributions. The structural parameters and the cohesive energy agree with expts. The bonding nature of MgH<sub>2</sub> is interpreted in terms of the band structure and the charge distribution. Covalent bonding was not found. Based on the band-structure and charge-d. results, MgH<sub>2</sub> doped with a monovalent element could be a superconductor.

структурн.  
параметры,  
теор. струк.

C. A. 1988, 109, N 16

MgH<sub>2</sub>

1989

Hürva Pipsa,  
Pakkannen Tapani.

сирокт.,  
теор.  
расчет

THEOCHEM 1989,  
53 (1-2), 79-85.

(сир. NaH; III)

MgH<sub>2</sub>

от. 31283

1989

Мусаев Д.Т., Чаркин О.Т.,

геометр.,  
энергия,  
мезмкрит.  
расчет.

Координат. химия,  
1989, 15, №2, 161-169.

Mgtz

[Om. 35182]

1990

~~mem.~~

mem.  
parum

Curtiss L.A., Jones Ch.,  
et al.,

J. Chem. Phys., 1990,  
93, N 4, 2537-2545

Gaussian-1  
molecular



theory of  
energies

for  
ends. second - row compo. -

$MgH_2^{2+}$

1991

14 Б1028. Неклассические водородные комплексы щелочноземельных металлов. Nonclassical hydrogen complexes of the alkaline earths / Simandiras Emmanu-el D., Nicolaides Cleanthes A. // Chem. Phys. Lett.— 1991.— 185.— № 5—6.— С. 529—534.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП с использованием расширенных базисных наборов, а также с учетом электронной корреляции в рамках теории возмущений Меллера—Плессета второго порядка (МП2) проведены расчеты электронного и геометрич. строения комплексов состава  $MgH_2^{2+}$ ,  $CaH_2^{2+}$ ,  $OMgH_2$ ,  $OCaH_2$ ,  $SBeH_2$ ,  $SMgH_2$  и  $SCaH_2$ . Показано, что комплексы  $MgH_2^{2+}$  и  $CaH_2^{2+}$  отвечают локальным минимумам на поверхности потенциальной энергии в основном состоянии. Длина связи Н—Н и ее частота в комплексах изменяются очень мало по сравнению с соотв-щими х-ками в изолированной молекуле водорода, а маллиkenовские заряды на катионе Mg (1,76) и Ca (1,90) также изме-

М.П.

⊗ (46)

Х. 1992, N 14

няются очень несущественно. Метастабильные комплексы с ионной структурой типа  $S^{2-}-Mg^{2+} \dots H_2$  найдены также и для  $SBeH_2$  и  $SMgH_2$  (как на уровне ССП, так и МП2), а для  $OMgH_2$ ,  $OSaH_2$  и  $SCaH_2$  расчеты на уровне МП2 в более полном базисе не дают локальных минимумов, отвечающих комплексам, в к-рых молекула водорода связана в молек. форме.

И. Н. Сенченко



$MgH_2^{2+}$

1991

116: 28451v Nonclassical hydrogen complexes of the alkaline earths. Simandiras, Emmanuel D.; Nicolaides, Cleanthes A. (Theor. Phys. Chem. Inst., Natl. Hell. Res. Found., Athens, Greece 116 35). Chem. Phys. Lett. 1991, 185(5-6), 529-34 (Eng). Based on the recent findings that  $BeH_2^{2+}$  and  $OBH_2$  exist in metastable ground states as nonclassical hydrogen complexes, the authors have carried out calcns. at the SCF and MP2 levels on the stability of related compds., such as  $MgH_2^{2+}$ ,  $CaH_2^{2+}$ ,  $OMgH_2$ ,  $OCaH_2$ ,  $SBeH_2$ ,  $SMgH_2$  and  $SCaH_2$ . The dications of the alk. earths bind  $H_2$  in mol. form. Metastability is also found for  $SBeH_2$  and  $SMgH_2$  with ionic structures  $S^{2-}-Be^{4+}...H_2$ ,  $S^{2-}-Mg^{4+}...H_2$ , while

MP2 with reasonably large basis sets does not predict stable min. for  $OMgH_2$ ,  $OCaH_2$  and  $SCaH_2$ .

(48) 

$CaH_2^{2+}$

$SBeH_2$

$OMgH_2$ ,  $OCaH_2$ ,  
 $SMgH_2$ ,  $SCaH_2$

C. A. 1992, 116, N4

MgH<sub>2</sub>

1993

120: 86924k An ab initio Hartree-Fock study of electronic and structural properties of MgH<sub>2</sub>. Baraille, Isabelle; Pouchan, Claude; Causa, Mauro; Pisani, Cesare (Laboratoire de Chimie Structurale, Universite de Pau et des Pays de l'Adour, URA 474, I.F.R., Rue Jules Ferry, 64000 Pau, Fr.). *Chem. Phys.* 1993, 179(1), 39-46 (Eng). A periodic ab initio Hartree-Fock method was used to evaluate a no. of electronic and structural properties of MgH<sub>2</sub>. The calcd. quantities are the equil. lattice parameters, the cohesive energy, the elastic consta., the energy-band structure, the d. of states, the electronic charge distribution and the Compton profiles. For the 2 former properties correlation effects are taken into account and improve the agreement with the exp'l. data. The strongly but not fully ionic character of MgH<sub>2</sub> is confirmed by the present study.

структура  
и

стабильн.

теор. расчет

С.А. 1994, 120, N 8

$MgH_2^+$

1993

118: 87922d The ground and low-lying excited states of dihydromagesium(1+) ( $MgH_2^+$ ). Bauschlicher Jr., Charles W. (NASA Ames Res. Cent., Moffett Field, CA 94035 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 201(1-4), 11-14 (Eng). The ground state and low-lying states of  $MgH_2^+$  were studied at the CAS-SCF and MR-CI levels of theory. The binding energies of the  $^2B_1$  and  $^2B_2$  states (relative to their asymptote) are significantly larger than that of the  $^1A_1$  ground state. The  $Mg^+$  inserts into the  $H_2$  bond for the  $^2B_2$  state. The  $(2)^1A_1$  state is very weakly bound, because the  $Mg-H_2$  repulsion is larger than in the ground state.

(MgH<sub>2</sub> for  
CCM-, meop-  
pamem)

C.A. 1993, 118, n 10

MgH<sub>2</sub>

1993

120: 173748z A post-SCF study on the excited states of MgH<sub>2</sub>. Yang, Jie; Yan, Guosen; Tian, Anmin (Dep. Chem., Sichuan Univ., Chengdu, Peop. Rep. China 610064). *Chin. Chem. Lett.* 1993, 4(2), 171-4 (Eng). The electronic structure of the ground and two excited states of the MgH<sub>2</sub> system were studied using the second order CI (SOC) method. The vibrational parameters and the localization were also detd. The bent geometry of the excited states is discussed.

ОСН. И ВЕЩАНИ.  
ВОЗБУЖД. СОСТ.,  
ТЕОР. РАСЧЕТ

С.А. 1994, 120, N14

Mg H<sub>2</sub>

1994

сверхкритич.,  
теор. расчёт

Koga Toshikatsu,  
Saito Maki, et al.

THEOCHEM 1994,  
112 (2-3), 249-60.

(сери.  NaH; III)

$MgH_2$

1995

Bythelway Ian,  
Gillespie R. J. et al.

синабиль-  
носив

Inorg. Chem. 1995,  
34 (9), 2407-14.

(сир.  $MgF_2$  ; III)

MgH<sub>2</sub>

компьютера,  
ab initio.  
расчет

(Михеилов)

CA. 1998,  
128, N 17

1998

128: 209107w Ab initio calculation for potential energy surfaces relevant to the microscopic reaction pathways for  $\text{Mg}(3s3p^1P_1) + \text{H}_2 \rightarrow \text{MgH}(^2\Sigma^+) + \text{H}$ . Ou, Yaw-Ren; Liu, Dean-Kuo; Lin, King-Chuen (Department of Chemistry, National Taiwan University, Taipei, Taiwan 106). *J. Chem. Phys.* 1998, 108(4), 1475-1484 (Eng), American Institute of Physics. Two ab initio methods have been employed to calc. the dynamic potential energy surfaces (PES's) for the excited ( $^1B_2$  or  $^1A'$ ) and the ground ( $^1A_1$  or  $^1A'$ ) states in the  $\text{Mg}(3s3p^1P_1) - \text{H}_2$  reaction. The obtained PES's information reveals that the prodn. of MgH in the  $^2\Sigma^+$  state, as  $\text{Mg}(^1P_1)$  approaches  $\text{H}_2$  in a bent configuration, involves a nonadiabatic transition. The  $\text{MgH}_2$  intermediate around the surface crossing then elicits two distinct reaction pathways. In the first one, the bent intermediate, affected by a strong anisotropy of the interaction potential, decmps. via a linear  $\text{HMgH}$  geometry. The resulting MgH is anticipated to populate in quantum states of rotational and vibrational excitation. In contrast, the second pathway produces MgH in low rotational and vibrational states, as a result of the intermediate decmpn. along the stretching coordinate of the Mg-H elongation. These two tracks may account for the previous exptl. findings for the MgH distribution, which the impulsive model has failed to comprehend. By far, different interpretations have been proposed esp. for the low-N MgH product. The supply of a detailed PES's information in this work helps to clarify the ambiguity. It is also conducive to an interpretation of the isotope and temp. effects on the product rotational distribution.

MgH<sub>2</sub>

1998

129: 19853j A comparison between the CISD[TQ] wave function and other highly correlated methods: Molecular geometry and harmonic vibrational frequencies of MgH<sub>2</sub>. Tschumper, Gregory S.; Schaefer, Henry F., III (Center for Computational Quantum Chemistry, University of Georgia, Athens, GA 30602-2556 USA). *J. Chem. Phys.* 1998, 108(18), 7511-7515 (Eng), American Institute of Physics. The linear MgH<sub>2</sub> mol. was selected as a model system to compare the total electronic energy ( $E_{TOT}$ ), equil. bond length ( $r_e$ ), and vibrational frequency ( $\omega_n$ ) predictions from six different CI and coupled-cluster (CC) methods using three large correlation consistent basis sets. The three CI procedures employed incorporated all single and double substitutions (CISD) as well as all triple and quadruple substitutions (CISDTQ).

структур.  
параметры,  
D<sub>h</sub>,  
мол. параметры  
G.A. 1998,  
129, N2

Ngth

1998

Ali, Abd Sadique  
et al.,

Wetle,  
de,  
neop.  
parum

Indian J. Pure Appl.  
Phys. 1998, 36(9),  
508-571.

(Am. Lith. ; III)

F: MgH

P: 3

1999

132:16773      The MgH B' 2.SIGMA.+ -X 2.SIGMA.+  
transition: a new tool for studying magnesium isotope

abundances.      Wallace, Lloyd; Hinkle, Kenneth; Li,  
Gang; Bernath, Peter Kitt      Peak      National  
Observatory, National Optical Astronomy Observatories

Tucson, AZ 85726, USA      Astrophys. J., 524(1,  
Pt. 1), 454-461 (English) 1999 The authors have  
identified lines from the 0-3, 0-4, 0-5, 0-6, 0-7, 1-  
3, 1-4, 1-7, and 1-8 bands of the 24MgH B' 2.SIGMA.+ -  
X 2.SIGMA.+ transiti in sunspot umbral spectra.  
Lines of the 0-7 and 1-8 bands in the unclutt 7500 A  
region are the most obvious, but B' 2.SIGMA.+ -X  
2.SIGMA.+ lines we tracked as far to the blue as 5300

C. H. Loo, 132

A. In combination with weak lines of 0-7 bands of the  $^{25}\text{MgH}$  and  $^{26}\text{MgH}$  isotopes, the solar isotope ratio  $^{24}\text{Mg}:^{25}\text{Mg}:^{26}\text{Mg}$  was measured as 76:12:12, in agreement with the much better determined terrestrial ratio 79:10:11.

The intensity distribution of bands with  $w_i = 4-8$  was measured and showed no anomalies; the excitation temperature of 3100 agrees with a value of 3200 K determined from SiO in a sunspot spectrum. The lines of the  $\text{MgH}$  B'  $2\Sigma^+ \leftarrow 2\Sigma^+$  transition are much more cleanly separated and much less blended than lines from the stronger A  $2\Pi \leftarrow 2\Sigma^+$  transition. The B'  $2\Sigma^+ \leftarrow 2\Sigma^+$  lines should prove useful in isotopic abundance analyses for stars where the A  $2\Pi \leftarrow 2\Sigma^+$  transition is too strong to yield useful results.

---

$\text{MgH}_2$

(om. 40621)

2000

Robert G. Hinde<sup>†</sup>,

J. Phys. Chem. 2000,  
A104, 7580 - 7585

Ab Initio  
Acidities



for - Phase  
of  $\text{NaH}$ ,  $\text{MgH}_2$ ,

and  $AlH_3$



2000

F: MgH<sub>2</sub>

P: 3

133:141876      Vibrational spectrum of magnesium  
hydride.      Santisteban, J. R.; Cuello, G. J.;  
Dawidowski, J.; Fainstein, A.; Peretti, H. A.;  
Ivanov, A.; Bermejo, F. J. . Centro      Atomico  
Bariloche (CNEA)      Bariloche (RN) 8400, Argent.

Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.,  
62(1), 37-40 (English) 2000. The      vibrational  
spectrum of hydrogen atoms in MgH<sub>2</sub> was studied by  
inelastic-neutron and Raman-scattering expts. at 12

and 295 K. After careful evaluation of multiple scattering and multiphonon contributions, the authors provide a vibrational frequency spectrum up to 180 meV and the mean-square displacement of hydrogen atoms. The inelastic light scattering spectra of  $\text{MgH}_2$  powders show 3 Raman allowed modes ( $A_{1g}$ ,  $B_{1g}$ , and  $E_g$ ) and some smaller features that can be related with 2nd-order and disorder-induced processes.

---

MgH<sub>2</sub>

DM ~~APP~~

2000

(конд. спектр)

133: 141876s Vibrational spectrum of magnesium hydride. Santesteban, J. R.; Cuello, G. J.; Dawidowski, J.; Fainstein, A.; Peretti, H. A.; Ivanov, A.; Bermejo, F. J. (Centro Atómico Bariloche (CNEA), 8400 Bariloche (RN), Argent.). *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* 2000, 62(1), 37-40 (Eng), American Physical Society. The vibrational spectrum of hydrogen atoms in MgH<sub>2</sub> was studied by inelastic-neutron and Raman-scattering expts. at 12 and 295 K. After careful evaluation of multiple scattering and multiphonon contributions, the authors provide a vibrational frequency spectrum up to 180 meV and the mean-square displacement of hydrogen atoms. The inelastic light scattering spectra of MgH<sub>2</sub> powders show 3 Raman allowed modes ( $A_{1g}$ ,  $B_{1g}$ , and  $E_g$ ) and some smaller features that can be related with 2nd-order and disorder-induced processes.

F: MgH<sub>2</sub>

P: 3

2000

132:227703

A computational study of the hydride affinities of Group I and II metals. Wenthold, Paul G.

Department of Chemistry, Purdue University

West Lafayette, IN 47907-1393, USA

Int. J.

Mass Spectrom., 195/196, 319-325 (English) 2000 Hydride affinities are reported for MH and M (M = Li, Na) and MH<sub>2</sub> and MH (M = Be, Mg). Calcd. hydride affinities range from ~35 kcal mol<sup>-1</sup> for Na kcal/mol for BeH. The unusually high hydride affinity for BeH is shown to reflect the high Be-H bond energy in BeH<sub>2</sub>. Where comparisons are possible results obtained using the MP2, MP4, BLYP, and B3LYP methods with a 6-311++G(3df,3pd) basis set are in good agreement with exptl. or high level values. Hydride affinities calcd. using the G2 approach are too high because the G2 energy for hydride ion.

More reasonable values are obtained from calculations using the exact energy for the hydride ion.

---



C.A. 2000, 132

F: MgH

P: 3

2000

132:227703      A computational study of the hydride affinities of Group I and II metals. Wenthold, Paul G.

Department of Chemistry, Purdue University

West Lafayette, IN 47907-1393, USA      Int. J.

Mass Spectrom., 195/196, 319-325 (English) 2000 Hydride affinities are reported for MH and M ( $M = \text{Li, Na}$ ) and  $\text{MH}_2$  and MH ( $M = \text{Be, Mg}$ ). Calcd. hydride affinities range from  $\sim 35 \text{ kcal mol}^{-1}$  for Na kcal/mol for BeH. The unusually high hydride affinity for BeH is shown to reflect the high Be-H bond energy in  $\text{BeH}_2$ . Where comparisons are possible results obtained using the MP2, MP4, BLYP, and B3LYP methods with a 6-311++G(3df,3pd) basis set are in good agreement with exptl. or high level values. Hydride affinities calcd. using the G2 approach are too high because the G2 energy for hydride ion.

More reasonable values are obtained from calculations using the exact energy for the hydride ion.

---



C.A. 2000, 132

MgH<sub>2</sub>

[On 41857]

2003

кон-фр-  
миссион.  
спектр

Schayesteh A. et al.,  
J. Chem. Phys., 2003,  
119, N 15, 7785-7788