

Mg-Al

$MgAl_2O_4$

Henning O., Klaus V. 1966

Wiss. Z. Hochschule Archit.
und Bauwesen Weimar.,

критич.
структура

13, N 5, 557 - 566.

УК - ментры моноано-
мента тов ценогоземець-
ков мее- тачнов,

(см. $BeAl_2O_4$)

MgO · Al₂O₃ (H₂O)₁₂

IX 124/984

(MgO₄ Al₂O₃ (H₂O)₁₀ (Al-O; Si-O)

Henning O., Danowski W.,

Kässhner B., Wiss. z. Hochsch.

Architekt und Bauwesen

Weimar, 1967, 14(6), 639-44

to

Encl. 14

ca 1968

$MgAl_2O_4$

omnick 7121 1978

Haycock V.E. et al.

semifor.
energ

J. Chem. Soc. Dalton Trans

1978,

1785-1790

The electronic Structure

~~Al₂AlF₅~~

MgAlF₅

ab initio

расчёты

структур,
поверхн.

потенц.

энергии,

геометрии.

Ommuck 13680 1982

Artiss L.A., Meirvi-
cher A.,

Chem. Phys. Lett.,
1982, 86, N5-6, 467-

● - 471.

MgAlF₅

[Оммуек 16101]

1982

Curtiss L. A.,

Бактер
инфекции,
теорет.
расчет

Inorg. Chem., 1982,
21, n 11, 4100-4101

MgAlB₁₄

1983

3 Б2016. Уточнение структуры MgAlB₁₄. Refinement of the structure of MgAlB₁₄. Higashi-Iwami, Ito Tetsuzo. «J. Less-Common Metals», 1983, 92, № 2, 239—246 (англ.)

Рентгенографически определена структура кристаллов MgAlB₁₄ (λ Mo, анизотропный МНК, R 0,023 для 1277 отражений), синтезированных взаимодействием элементов при t -ре 1500° С. Параметры ромбич. решетки: a 5,848 Å, b 8,112, c 10,312, ρ (изм.) 2,6, ρ (выч.) 2,59, Z 4, ф. гр. *Imam*. Основу структуры представляет собой каркас из атомов В, представленных как в виде икосаэдров В₁₂, так и в изолированном виде; на элементарную ячейку приходится 4 икосаэдра и 8 одиночных атомов В (В—В 1,7197—2,0370 Å). В пустотах каркаса располагаются атомы Al и атомы Mg, находящиеся в окружении из 16 атомов В (Al—В 2,0663—2,8248 Å, Mg—В 2,379—2,925). Положения атомов ме-

структура

Х. 1984, 19, № 3

таллов заселены не полностью: на 78% в случае Mg и на 75% в случае Al, в соответствии с чем истинный состав отвечает $Mg_{0,78}Al_{0,75}B_{14}$. В направлении оси *a* в структуре проходят линейные цепи из атомов Al (Al—Al 2,924 Å) и зигзагообразные цепи из атомов Mo (Mg—Mg 3,07—3,74). Вакансии в положениях атомов металла распределены статистически. С. В. Соболева

$MgAl_2O_4$

1983

/99: 128624t The high pressure disproportionation of spinel, $MgAl_2O_4$. Howald, Reed A.; Moe, Ardis A.; Roy, Bimalendu N. (Dep. Chem., Montana State Univ., Bozeman, MT 59717 USA). *High Temp. Sci.* 1983, 16(2), 111-21 (Eng). A new computer program was tested with calcns. on the system $MgAl_2O_4 (c) = MgO (c) + 2AlO_{1.5} (c, \text{corundum})$ provides a good test for proposed equations of state for pressure dependence of the equil. on temp. Murnaghan's logarithmic equation of state is satisfactory provided both the bulk modulus and its pressure deriv. are functions of the temp. Full equations of state are given for all three solids. The P - T phase diagram calcd. with these values differs substantially from that of Liu (1980). Depending on the thermodyn. values selected for $MgAl_2O_4$, the equil. line is near $9000 + 1.11(T - 1000)$ or $9700 + 1.50(T - 1000)$.

yp-ue
cocrystal,
 P - T diagram.

C.A. 1983, 99, N16

ЛигАН4

1984

ЛигАН5

Чаркин О. Л.,

Знобичев А. С. и др.

расчет

Тр. Моск. хим.-технол.

уч.-Т, 1984, N 134,

13-26

(см. ЛитК ±; III)

$Mg(AiH_4)_2$

и гр.

OM 30397

1988

2 Д39. Неэмпирический расчет структуры и стабильности молекул алюмогидридов магния с учетом электронной корреляции / Зюбин А. С., Горбик А. А., Чаркин О. П. // Ж. структур. химии.— 1988.— 29, № 5.— С. 9—15

В рамках приближения ССП/3-21Г* оптимизированы геометрич. параметры различных конфигураций молекул алюмогидридов магния $Mg(AiH_4)_2$, $HMgAlH_4$, $MgAlH_4^+$, $HMgAlH_2$, $MgAlH_2^+$. Относит. энергии конфигураций и энергии различных каналов их мономолекулярного распада уточнялись с учетом электронной корреляции в рамках метода Меллера—Плессета 3-го порядка с базисом ДЭХД+ПП. Результаты сравниваются с аналогичными данными, рассчитанными в том же приближении для однотипных алюмогидридов бериллия.

Резюме

М.А.

ср. 1989, №2

$Mg(AlH_4)_2$

и др.

Ом 30 397

1988

5 Б1043. Неэмпирический расчет структуры и стабильности молекул алюмогидридов магния с учетом электронной корреляции / Зюбин А. С., Горбик А. А., Чаркин О. П. // Ж. структур. химии.— 1988.— 29, № 5.— С. 9—15.— Рус.

В рамках приближения ССП/3-21Г* оптимизированы геометрич. параметры различных конфигураций молекул алюмогидридов магния $Mg(AlH_4)_2$, $HMgAlH_4$, $MgAlH_2^+$, $HMgAlH_2$, $MgAlH_2^+$. Относит. энергии конфигураций и энергии различных каналов их мономолек. распада уточняли с учетом электронной корреляции в рамках метода Меллера—Плессета 3-го порядка с базисом ДЭХД+ПП. Результаты сравниваются с аналогичными данными, рассчитанными в том же приближении для однотипных алюмогидридов бериллия. Резюме

Х. 1989, № 5

$MgAlH_4$

1990

$Mg(AlH_4)_2$ и др. Зюбин А. С.,
Царкин О. П.

Тез. докл. 17 Всес. Чугаев. со-
вещ. по химии комплексов.

М. П. Соед., Минск, 29-31 мая, 1990.
Ч. 3. Минск, 1990. С. 413.

(ср. $\bullet LiBH_4$ и др.; III)

Мд АРН₂ и др. Знобин А. С., 1990

Горбик А. А. и др.

Химия неорган. соединений:
Докл. 4 Всес. совещ., Душанбе,
с. п. 1987: Сб. науч. тр. АН СССР.
ЦН-т общ. и неорган. химии.
М., 1990. С. 182-193.
(См. LiBH₂; III)

Al Mg

(om. 37773)

1994

Boldyrev A.I., Gonzalez N.,
Simons G.,

D,

Журнал
теорет.
химии

G. Phys. Chem., 1994,
98, N 40, 9931-44.

1997

 $Mg_2Al_4O_8$

127:40201p Polyhedral Ionic Molecules. Boldyrev, Alexander I.; Simons, Jack (Department of Chemistry, University of Utah, Salt Lake City, UT 84112 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1997, 119(20), 4618-4621 (Eng), American Chemical Society. Small isolated clusters of alkali halides and analogous divalent species composed of closed-shell at. ions are known to prefer densely packed structures similar but not identical to the repeat units found in the solid state. Beyond the simple cube structure that occurs, for example, in alkali halide tetramers, no other ionic polyhedral structures contg. only at. ions are known. In this article, we explore the possibility of other three-dimensional structures, and we show computationally that two mols., $Mg_2Al_4O_8$ and $Na_4Mg_4O_6$, have very stable distorted rhombic dodecahedron structures. We therefore suggest that a wide variety of stable polyhedral structures could be constructed from ions, and we offer a simple electrostatic model for predicting which polyhedral ionic structures should be stable and which should not. We point out that several recently obsd. inorg. solid state materials contain core structures that fit our predictions.

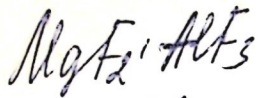
моном.
димер
комплекс.

супер-ион

(H)

 $Na_4Mg_4O_6$

C. A. 1997, 127, N 3



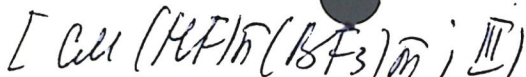
1997

$n, A = 1, 2$

Scholz B. et al.,

сп-ра,
стабильн.,
теорет.
раств

J. Fluorine Chem. 1997,
86(2), 131-42



Mg AlO₃⁻

1998

Charkin D.O. et al.,

по темиз.
поверхн.
структур.
разам.
Vi

Zh. Neorg. Khim.
1998, 43 (10), 1694-
1709

(all. Liz[•] CDs, III)

Mg Al⁻Li

1998

Chauvin D.O., et al.,

поверх.
поверхн.
структур.
парам;
и, теор.
панет

Zh. Neorg. Khim. 1998,
43 (12), 2033-2049

(Cu·LiCS₅; III)