

Mg - Ag, All,
Cu

IX 1480

1953

Mg₈ Si₄ Cu₁₆ (ze)

Nazoren G., Witte H.;

Z. anorgan. und allgem. Chemie,
1953, 271, N3-4, 144-149

the

P.X., 1953, N4, 4305

V 2814

1959

Au Mg, Au Ag, Ag₂, Au₂ (красн. и бел. мет.)

Ruamps J.

Ann. Phys. (France), 1959, 4, n° 9-10,
1111-1157

10

РМЖ, 1960, n° 23, 918-64

с. 76 ф. К.

Аи Мг

ВФ-1671-IX

1960

10Б49. Ультрафиолетовый спектр молекулы AuMg.
Schiltz Jean. Spectre de bandes ultraviolet de la molécule AuMg. «C. r. Acad. sci.», 1960, 251, № 5, 682—683 (Франц.).—Исследован УФ-спектр поглощения паров смеси Mg и Au, помещенной в печь Кинга при 2000° K. В спектре обнаружена развитая система полос в области 3100—3400 Å, члены которых (в см⁻¹) могут быть описаны ф-лой $\nu = 31058 + 242 (v' + 1/2) - 2(v' + 1/2)^2 - 0,1 (v' + 1/2)^3 - 308 (v'' + 1/2) + 1,1 (v'' + 1/2)^2$. Имеется также ряд полос в области 2900—3050 Å и система полос в области 2615—2660 Å. Принадлежность всех этих полос молекуле AuMg требует еще доказательств, хотя для первой системы это наиболее очевидно.
В. Юнгман

х.1961.10

А.И.М.

ВФ-1671-IX

1960

5В143. Полоса молекулы AuMg в ультрафиолетовой области. Schiltz Jean. Spectre de bandes ultraviolet de la molécule AuMg. «С. г. Acad. sci.», 1960, 251, № 5, 682—683 (франц.).—Воспроизведены исследования по соединениям золота и щелочно-земельных металлов при высоких т-рах (Ruamps J. «Thèse», Lille, 1957). В частности, в УФ-области наблюдались два полосатых спектра, из которых по крайней мере один должен быть приписан молекуле AuMg.

ф. 1961. 5

BQP-1671-IX

1960

AuMg

Ultraviolet spectra of the molecule AuMg. Jean Schiltz.
Compt. rend. 251, 682-3(1960).—An ultraviolet spectrum
in alk.-earth metals, obtained between 2780 and 2790°K. is
due to AuMg. The bands between 4800 and 5600 Å. are
distinct. Three sets of weak bands do not belong to any
known spectrum. Between 3152 and 3319.5 Å. there are 12
bands; 6 bands between 2920 and 3055.3 Å. are seen only at
low temps. The system between 2615 and 2660 Å., contg.
20 peaks, is of doubtful origin. Elliott Henner

C.A. 1961.55.2.1179h

3106-VI

1964

AuBe	AuAl, <u>AuMg</u> (mol.post.)
AuGa	
AuSi	(mol.post.)
AuGe	sil.post.

Barrow R.F., Gissane W.J.M., Travis D.N.

Nature /Engl/, 1964, 201, N 4919, 603-04

Electronic spectra of some gaseous diatomic compounds of gold.

PJF., 1964, 8D54
J.,

Есть оригинал.
orig.

50927.2884

Ph, Ch

IX 1824-BP

AuBe, AuMg (мол. вес.)

F34
1965

Barrow R.F., Gissane W.J.M., Travis D.N.
Rotational analysis of the A-X and B-X
systems of AuBe and AuMg. "Proc. Roy. Soc.",
1965, A287, 240-258
(N 1409,

(англ.)

10

Винити 323

Do (LnAu, CeAu, PrAu, NdAu, 1970
LiAu, NaAu, KAu, RbAu, CsAu, MgAu,
CaAu, SrAu, BaAu, Li₂, K₂, Na₂, Rb₂, Cs₂,
Mg₂, Ca₂, Sr₂, Ba₂)

DHf (LnAu, CeAu, PrAu, NdAu) VIII 3700
Gingerich K.A., Finkbeiner H.C.,
J. Chem. Phys, 1970, 52, 46, 2956-2964 (air)
Mass spectrometric determination of the
dissociation energies of LaAu, CeAu, PrAu, NdAu
and predicted stability of gaseous monoau-
rides of electropositive metals.
PuPu 3, 1970, 80286 W, M 30 (d)

Alg-Ail

err. 4824

1975

Kerr J. A., et al.

(Do) Handbook Chem. Phys,
55th Ed, 1974-75

Cu dig

оттуса у Гурбара

1979

в науке ситатис зиро сунуозурае.

сунуозу

в науке ситатис зиро сунуозурае.

Kazai P.H.; et al.

The Chem. Soc. Faraday

Division. Symposium

N 14 / 1, p 1A-7B, 1979

Electron. Spin
intermetallic

● Resonance Study
molecules.

1980
Au Mg Gingerich K.A.,

Current Topics in Materials
Science, Volume 6, edited
by Kaldes E.

Do; North-Holland Publishing
Company, 1980.

(счит оттиск в ● коробке оттисков
Gingerich).

Аулг

1983

BorISOV Yu. A.,
Raevskii N. I.

Испр
евр

Zh. Strukt. Khim.
1983, 24 (4), 97 - 101.

●
(Ces. Sc_2 ; III)

CuMgO

CuCaO

epiglype

ab initio

papers

DM 38474

1996

125: 231176c Structure and Bonding in Metal-Oxide Systems: The CuMgO and CuCaO Molecular Systems. Lopez, Nuria; Illas, Francesc. (Facultat de Química, Universitat de Barcelona, Barcelona, Spain 08028). *J. Phys. Chem.* 1996, 100(40), 16275-16281 (Eng). The mol. structure of the different isomers arising from the interaction of Cu with both MgO and CaO mols. has been detd. from all-electron ab-initio SCF and CAS-SCF wave functions. Only linear stable structures are found as characterized through the vibrational anal. The dissozn. energy with respect to the isolated mols. was obtained by explicitly considering the electronic correlation effects through MP2 or MR-CI calcns. The role of electronic correlation is very important due to the near degeneracies existing in the isolated MgO and CaO mols. where the

SCF description is not adequate enough. A set of theor. techniques has been used to analyze the chem. bond in these mol. complexes. All the results indicate that the bonding in the O- and M-bonded complexes is very different. This fact may be interpreted from the different behavior of the dipole moment curve and from simple arguments such as the importance of different valence bond resonating structures.

CA 1996 125, 18

(71) 18

CuCaO

Cu MgO

38471 1996

12Б143. Структура и связь в металлоксидных системах. Молекулярные системы CuMgO и CuCaO. Structure and bonding in metal—oxide systems: The CuMgO and CuCaO molecular systems / López Núria, Illas Francesc // J. Phys. Chem.— 1996 .— 100, № 40 .— С. 16275—16281 .— Англ. Место хранения ГПНТБ

Неэмпирическим методом ССП в полном активном пространстве исследовано электронное строение различных изомеров продуктов взаимодействия Cu с MgO и CaO. Оценены энергии их диссоциации. Стабильными найдены только линейные системы. Подчеркнута важность учета электронной корреляции для адекватного описания систем. Детально обсуждена природа хим. связи. Библ. 50. В. Л.

М.П.

(4) X

X. 1997, № 12

F: AuMg[+]

P: 3

4. 39340

1998

21B117. Прочные химические связи с золотом. Коррелированные релятивистские результаты высокого уровня для двухатомных систем AuBe{+}, AuC{+}, AuMg{+} и AuSi{+}. Strong chemical bonds to gold. High level correlated relativistic results for diatomic AuBe{+}, AuC{+}, AuMg{+}, and AuSi{+} / Barysz Maria, Pyykko Pekka // Chem. Phys. Lett. - 1998. - 285, 5-6. - С. 398-403. - Англ.

9 жлх, 1998, 121

Представлены результаты расчета четырех экспериментально неизвестных частиц $\text{AuBe}\{+\}(\text{I})$, $\text{AuC}\{+\}(\text{II})$, $\text{AuMg}\{+\}$ и $\text{AuSi}\{+\}(\text{III})$ в основных синглетных состояниях с учетом релятивистских эффектов на квазирелятивистском уровне Дугласа-Кролла. Рассчитанные в рамках теории возмущений диссоциации $D[e]$ для трех частиц получены максимальными для соединений золота и равными 3,636, 3,688 и 3,815 эВ для I, III и II соотв. По результатам расчета длина связи в катионе II является короткой и приближается к тройной связи.

F: AuMg

P: 3

134:373373 **Electronic structures of AuMg and AuZn.** Leiro, J.
A.; Kokko, K.; Laihia, R. Department of Applied Physics, University
of Turku, Turku, Finland. J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.
(2001), 113(2-3), 167-174. in English.

The electronic d. of states for AuMg and AuZn was calcd. by
the linear-muffin-tin-orbitals method. A band narrowing for the d like
states of Zn and Au as well as a shift to larger binding energies are
found on going from pure metals to the compds. The charge d. was
calcd. using the same Wigner-Seitz radius for the compd. and pure
metal when studying charge transfer between the different atoms. A
comparison was made with ZnSe and ZnS.

Mg Ar

[Om 41508]

2002

Lasper Hald et al.,

Chem. Phys. Lett., 2002,

364, 402-408

Calculation of  ground and
excited state potential

energy curves of the Hg.Hr
complex using the coupled
cluster approximate triples
model CC3.