

Ng 37

10

B9- V 4241

~~IX 1738~~

1955

B_2O_3 ; TeO_2 ; Mg_3N_2 (P, ΔH_S ; ΔH_V);

TeO_2 (T_m , ΔH_m); Mg_3N_2 (S); Mg_2 (D)

Soulen J.R., Sthapitanonda P.,
Margrave J.L.,

J. Phys. Chem., 1955, 59, N 2,
132-136 ()

Vaporization of inorganic
substances: B_2O_3 , TeO_2 and Mg_3N_2

PX., 1956, N 22,
71121 (M)

u, b

Mg₂

John L. Margrave

1957

947

(ΔH amou.)

"Ann. N. Y. Academy of Sci"

1957, 67, 619 - 632.

"The chem. impot of unusual
molec. observed at high Temp.

Mg₂, Ca₂ (ΔH, D₀) 9 1969
IX 817

Mellor A.M.
J. Chem. Phys., 1969, 51, N4, 1678 (corr.)

New method for estimating dimer
bond energies

PJH Year, 1970
551008

↓
M, 10 (95)

1870

 Mg_2 K_p

5 Б892. Дальнейший расчет равновесных свойств димеров. Ewing R. H., Mellor A. M. Further calculations of equilibrium dimer properties. «J. Chem. Phys.», 1970, 53, № 7, 2983—2984 (англ.)

По изложенной ранее методике (см. РЖХим, 1970, 5Б1008) рассчитаны константы равновесия р-ций образования димеров Mg_2 ; Be_2 ; Mn_2 . Полученные результаты согласуются с теплотами димеризации, определенными масс-спектрометрически. П. М. Чукуров

+2

X. 1871.

5



1970

Mg₂K_p

113465f. Calculations of equilibrium dimer properties. Ewing, R. H.; Mellor, Arthur M. (Zucrow Eng. Res. Center, Purdue Univ., Lafayette, Indiana). *J. Chem. Phys.* 1970; 53(7), 2983-4 (Eng). Equil. consts. (K_p = partial pressure of the dimer divided by the square of the monomer partial pressure) of gaseous metal dimers Mg₂, Be₂, and Mn₂ were calcd. at various temps. Dimer, low-temp. K_p , high-temp. K_p are: Mg₂, 9.81×10^{-3} at 600°K, 5.65×10^{-4} at 1600°K; Be₂, 2.70×10^{-3} at 1400°K, 2.10×10^{-4} at 3400°K; Mn₂, 2.27×10^{-3} at 1000°K, 1.54×10^{-4} at 2500°K. FBJN

C.A. 1970.73.22

41



Do (Ln Au, Ce Au, Pr Au, Nd Au, Li Au, Na Au,
K Au, Rb Au, Cs Au, Mg Au, Ca Au, ¹⁹⁷⁰
Sr Au, Ba Au, Li₂, K₂, Na₂, Rb₂, Cs₂, Mg₂,
Ca₂, Sr₂, Ba₂)

Δ Hf (Ln Au, Ce Au, Pr Au, Nd Au)
viii 3700

Singerich K. A., Finkbeiner H. C.,
J. Chem. Phys. | 1970, 52, N 6, 2956-
2964

PP 1970, 82286 10 u

(99)

~~Mr.~~ (mermog. cv-ba) 9 1971

Brett A. C., Balfour W. Y., IX 3346
J. Chem. Phys., 1971, 54, N^o 5, 3240-1
(ann.)

Further calculations of
equilibrium dimer proper-
ties. Comments.

HO (9)



7

~~Mr. Brett A. C.~~ CA, 1971, 74, N26, 1477339

12 Б852. Термодинамическое изучение реакций Mg^+ (газ) и MgH^+ (газ) с магнием. По Р. Л., Porter Richard F. A thermodynamic study of the reactions of Mg^+ (g) and MgH^+ (g) with magnesium. «J. Phys. Chem.», 1977, 81, № 24, 2233—2236 (англ.)

С помощью квадрупольного масс-спектрометра, источником ионов в к-ром служила нагреваемая камера из нерж. стали, исследованы ионно-молек. р-ции с участием Mg^+ . В камеру загружали металлч. Mg. Туда же через систему напуска подавали газ — реагент. Объем камеры пересекался пучком ионизирующих электронов. При т-рах 330—470° изучены р-ции между нейтр. молекулами и ионами, образующимися при ионизации паров магния в смеси с Xe, CH_4 , C_4H_{10} . Показано, что ионы Mg_2^+ и Mg_2H^+ образуются в результате р-ций $\text{Mg}^+ + \text{Mg}$ тв. = Mg_2^+ и $\text{MgH}^+ + \text{Mg}$ тв. = Mg_2H^+ . Получены след. термодим. характеристики: $D_0^\circ(\text{Mg}_2^+) = 23.4 \pm 2.0$; $D_0^\circ(\text{MgH}^+ - \text{Mg}) = 24 \pm 5$; $\Delta H^\circ(700, \text{обр.}, \text{Mg}_2^+) = 224.1 \pm 2.0$; $\Delta H^\circ(700, \text{обр.}, \text{Mg}_2\text{H}^+) = 215 \pm 5$ ккал/моль; потенциал ионизации Mg_2 6.7 ± 0.1 эв; сродство к протону Mg_2 9.5 ± 0.3 эв. Отмечается резкое увеличение $D_0^\circ(\text{Mg}_2^+)$ по сравнению с $D_0^\circ(\text{Mg}_2)$, составляющей 1,2 ккал/моль.

В. В. Чепик

Mg_2^+

$\text{MgH}^+ - \text{Mg}$

↑

D_0° , ΔH_f

(+1) ☒

2, 1978, № 12

1977
1595-
X1-
69-17-5651

Alg4

1982

Bauschlicher Ch. W.,
Bagus P. S., et al.

ΔH ;

J. Chem. Phys., 1982,
77, N8, 4032-4038.

(cur. Be₄ ; I)

Mg₂

1985

Furrip D. J., Syverud
et al. A. N.,

перелом. J. Nucl. Mater.
св-ва 1985, 130, 189-98.

●
(св. Li₂; I)

Mg_2

1986

14 Б1015. Исследования вандерваальсовых молекул методами многочастичной теории возмущений (МЧТВ). III. Надежность предположительно точных расчетов для димера магния. MBPT studies of van der Waals molecules. III. The reliability of apparently accurate calculations for the magnesium dimer. Diercksen Geerd H. F., Kellö Vladimir, Sadlej Andrzej J. «Chem. Phys.», 1986, 103, № 1, 55—74 (англ.)

Методами многочастичной теории возмущений с полным учетом всех членов до 4-го порядка включительно рассчитана кривая потенциальной энергии основного состояния молекулы Mg_2 , имеющая неглубокий минимум в вандерваальсовой обл. Рассмотрено несколько базисов гауссовых ф-ций, включающий ф-ции до f -типа. Найдено, что в подобных расчетах с тщательным учетом корреляц. эффектов поправки на базисную суперпозиц. ошибку более существенны, чем в хартри-фоковских расчетах. Отмечено, что для правильного описания энергии слабо взаимодействующих систем требуется

(м.п.)

х. 1986, 19, N 14

сбалансированный учет корреляц. поправок и поправок
на базисную суперпозиц. ошибку. А. В. Немухин



Mg₃

1991

) 8 E147. Рост, структура и природа связи в кластерах магния. Structure, growth, and bonding nature of Mg clusters / Kumar Vijay, Car Roberto // Phys. Rev. B.— 1991.— 44, № 15.— С. 8243—8255.— Англ.

Методом молекулярно-динамич. моделирования изучены рост, структура и природа связи малоатомных кластеров Mg_n (n=2—13). С помощью методов кратчайшего спуска и отжига показано, что равновесными структурами кластеров служат: для Mg₃ — равнобедренный треугольник, Mg₄ — тетраэдр, Mg₅ и Mg₆ — тригональная бипирамида, Mg₇ и Mg₈ — пентагональная

структура,
природа
связи



Ф. 1992, № 8

бипирамида, Mg_9 — Mg_{12} — тригональные призмы. Кластер Mg_{13} не является ни икосаэдром, ни кубооктаэдром и может быть представлен как результат соединения кластеров Mg_4 и Mg_9 , что указывает на возможность перехода к ГПУ-структуре в более крупных кластерах. В согласии с предсказаниями модели желе для металлич. кластеров обнаружено, что Mg_4 и Mg_{10} являются магич. кластерами. Расчетами зарядовой плотности и ширины щели между наивысшими занятыми и наименьшими свободными состояниями показано, что сходимость к металлич. поведению носит медленный и осциллирующий характер. Предпочтительным механизмом фрагментации кластера служит отрыв мономера, причем кластеры, непосредственно следующие за магическими, обнаруживают повышенную способность к фрагментации. Библ. 54.

1991

Kumar Vijay, Car
Roberto.

Phys. Rev. B. 1991.

44, N 15. C. 8243-8255.

(cu.  Mg₃; I)

Mg₄,

Mg₅,

Mg₆

срук-
тура,
структура
свдсч