

Ni-Fe

VI 1599

1958-1959

$K_3Fe(CN)_6, Cu_3/Fe(CN)_6/2, \underline{Ni_3/Fe(CN)_6/2},$
 $Co_3/Fe(CN)_6/2, Cd_3/Fe(CN)_6/2, Mn_3/Fe(CN)_6/2$ (Vi)

Bonino G.B., Fabbri G.
Atti. Accad. naz. Lincei. Rend. Cl. Sci., fis.
mat. e natur, 1958, (1959), 25, N 6, 410-16

Ультрафиолетовые спектры некоторых ферро-
цианидов.

PJX, 1959, N 24, 84889
J.

1961

Do (Ni₃Fe, Ni₃Mn, Ni₃Cr, Ni₃V)

Коршиков В.И., Матвеева Н.М.

Докл. АН СССР, 1961, 139, №4, 880-83.

Тензотермическое исследование соединений Рур-
накова Ni₃Fe, Ni₃Mn, Ni₃Cr и Ni₃V.

PJX, 1962, 95382

M.

orig.

FeNi

1948

Montano P. A.

J. Appl. Phys., 1948, 49(8),
4612-14.

сметка
в пример-
се.

(ср. FeNi; III.)

Fe Ni

1978

Montano J. A.
aj. Appl. Phys 1978, 49/3,
Pt. 2), 1561-3 (eng)

exemp b
disposal

ex. Fe Cu - III

FeNi

Материалы симпозиума
у Гурбуса А. В. 1979.

спектр

Montano P. A.

в мануск. Chem. Soc. Faraday
Division. Symposium
N 14, 1979, 14/2, p 1-9.

Matrix isolation studies of
bimetallic molecules of Fe-3d
metals.

$\text{FeF}_2(\text{NiO}_2)$

1979

Weltner W.

U.S. Dep. Commer: Nat.

Bur. Stand. Spec. Publ.,

1979, N 561/1, 587-594.

электр.
рем.
строит.

See TiF_2 III

FeNi

1980

Montano P, et al.

Faraday Symp. R. Soc.
Chem. 1980, 14, 79-86.

Do; re
осн. соед. элегр
в мангане

сш. Fe₂ III

NiFe

Отпуск 11118 1980

№ 6 Д502. Соединения Fe_2 и NiFe. Di-iron and nickeliron. Moskovits M., DiLetta Daniel P. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 10, 4917—4924 (англ.)

Получены спектры резонансного комб. рас. (200—5000 cm^{-1}) соединений Fe_2 (I) и NiFe (II), стабилизированных в аргоновой и криптоновой матрицах при $t = 11^\circ \text{K}$ и возбуждении излучениями Ar^+ -лазера и лазера на растворе родамина 6Ж. Проведен анализ частот фундаментальных колебаний I и II и их обертонов. Величины ω_e' и $\omega_e'x_e'$ в I и II составляют 299,6 и 320,0 cm^{-1} и 1,4 и 1,32 cm^{-1} соответственно. Обсуждены причины аномального увеличения интенсивности прогрессии полос колебаний I в антистоксовой области. Предположено, что наблюдаемое перераспределение интенсивности обертоновых полос I обусловлено процессами 2-фотонного поглощения в системе I с аномально большими временами колебательной релаксации для возбужденных колебательных подуровней основного электронного состояния I. Отмечено, что разложение I в матрицах N_2 и CH_4 связано с образованием комплек-

Спектры
резон. комб.
рассейя.

④ X

Ф. 1981. N 6

сов. I с молекулами N_2 и CH_4 . Сделан вывод, что мультиплетная структура обертоновых полос колебаний I обусловлена изотопич. расщеплением и ангармонизмом этих колебаний I Библ. 17.

И. В. А.



Оммерс ММ8

1980

NiFe

12 Б234. Молекулы Fe_2 и NiFe . Moskovits M., DiLella Daniel P. Di-iron and nickel. оп. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 10, 4917—4924 (англ.)

Исследованы спектры резонансного КР железа и смесей железа с никелем в тв. матрицах Ag , Kr , N_2 и метана. Образцы получали одновременным осаждением паров металлов и инертных газов на охлажденную до 11 К алюминиевую подложку. В спектрах образцов в Ag и Kr обнаружены прогрессии полос, относящиеся к вал. кол. Fe_2 (I) и NiFe (II) и их обертонам (до 16 включительно), а также полосы флуоресценции FeO . Оценены значения ω_e' и $\omega_e'X_v'$: они оказались равны 299,6 и 1,4 см^{-1} для I и 320,0 и 1,32 см^{-1} для II.

М.И.



Х.1981.№12

FeNi

1981

Guenzburger D. J. R.,

теорет. Saitovitch E. M. B.
практич.

Report 1981, CBPFNF-
-002/81, 42 pp.

(с. Fe₂; III)

FeNi

1981

Guenzburger D., et al.

Phys. Rev. B: Condens.

кв. мех.
растий

Matter 1981, 24 (5),
2368 - 2379.

●
(сер. Fe₂; III)

Ni (расплав)

1981

Fe Ni Ratanapurech Pisant
(смав) Baetista Renato G.

корректн.

стек и рабн. High Temp. Sci.,

излучающ. 1981, 14, N4, 269-

способн.

-283.

(см. Fe (расплав), III)

NiFe

[075. 11819]

1981

12 Д64. Электронные состояния NiFe. Неэмпирическое исследование методом Хартри—Фока и конфигурационного взаимодействия (ХФ—КВ). Electronic states of NiFe. An ab initio HF-CI study. Shim Igene. «Theor. chim. acta», 1981, 59, № 4, 413—421 (англ.)

Методами ХФ—КВ рассчитана кривая потенц. энергии и определены спектроскопич. постоянные для основного $^5\Pi$ -состояния молекулы NiFe. Использовался сокращенный (14s, 11p, 5d/8s, 6p, 3d) базисный набор гауссовых ф-ций с модификацией, дающей правильное описание 4p-орбитали и области валентной связи в молекуле. Определены энергии при четырех значениях межатомного расстояния. в пределах 4,34—6,00 а.е. Анализ заселенностей показывает, что химич. связь в NiFe обязана связывающему характеру 4s σ -орбитали, а взаимодействие 3d-орбиталей приводит лишь к небольшому расщеплению потенц. кривых. Отмечается,

М.П., Д₀,
D_i

Ф. 1981, 18, N/2.

что к основному $^5\Pi$ -состоянию близки по энергии вы-
шележащие $^5\Phi$ -, $^3\Pi$ - и $^3\Phi$ -состояния. Для атома Ni
3d-оболочке соответствует заселенность $(3d\delta)^3(3d\pi)^4$ -
 $(3d\sigma)^2$, а для атома Fe соответственно $(3d\delta)^{2.5}(3d\pi)^3$ -
 $(3d\sigma)^{1.5}$. Из спектроскопич. постоянных определены
равновесное расстояние, энергия диссоциации и колеба-
тельная частота. А. А. Зембеков



NiFe

O.M.M. 11819

1981

ab initio
program

Re, De, We

' 95: 103723d Electronic states of nickel-iron (NiFe). An ab initio HF-CI study. Shim, Irene (Dep. Phys., R. Dan. Sch. Pharm., Copenhagen, DK-2100 Den.). *Theor. Chim. Acta* 1981, 59(4), 413-21 (Eng). Ab-initio Hartree-Fock (HF) and CI methods were used in describing the interaction between the Ni and Fe atoms in the NiFe mol. The chem. bond between the atoms is due to a $4s\sigma$ MO. The 3d orbitals merely cause small splittings between the potential-energy curves. The equil. distance, dissocn. energy, and vibrational frequency were predicted for the ground state of the mol.

C.A. 1981, 95, N12.

NiFe

ИТ 11819

1981

23 Б28. Электронные состояния NiFe. Неэмпирическое исследование методом Хартри—Фока—КВ. Shim Igene. Electronic states of NiFe. An ab initio HF—CI study. «Theor. chim. acta», 1981, 59, № 4, 413—421 (англ.)

и-п,

Методом ССП МО ЛКАО в базисе сгруппированных гауссовых функций (14 s, 11 p, 5 d/8 s, 6 p, 3 d) рассчитаны основное и ряд возбужденных электронных состояний молекулы NiFe при значениях межъядерного расстояния 4,34; 4,60; 4,80 и 6 ат. ед. В тех же точках потенциальных кривых расчеты повторены при ограниченном учете конфигурац. взаимодействия (КВ), с использованием базиса конфигураций, отвечающих всем электронным возбуждениям в 3d-оболочках и между 3d-оболочками и связывающей МО 4sσ. Показано, что в NiFe, также как в Ni₂ и NiCu хим. связь почти пол-

Х. 1981, 196, N 23.

ностью определяется МО $4s\sigma$. $3d$ -оболочки сильно локализованы, и взаимодействие между ними приводит к малым расщеплениям между потенциальными кривыми. Основным состоянием NiFe является состояние $^5\Pi$, но в пределах 0,005 эВ над основным состоянием лежат состояния $^5\Phi$, $^3\Phi$ и $^3\Pi$, соответствующие той же электронной конфигурации, что и основное. Равновесное межъядерное расстояние и частота колебаний, рассчитанные методом ССП МО ЛКАО для основного состояния, составили 4,43 Å и 203 см^{-1} , тогда как при расчете методом КВ получены величины 4,64 Å и 467 см^{-1} соответственно.

И. А. Тополь

Кластеры

1982

NiFe

Moskovits M., Dilel-
la D. P.

Metal Bond. and Interact.
High Temp. Syst. Emphasis

ср. кмп., Alkali Metals. Symp. 181st
и. п., Meet. Amer. Chem. Soc., Atlan-
ta, Ga, March 31-Apr. 3, 1981.

Do; Washington, D.C., 1982, 153-
175. (см. Кластеры Fe_2 ; III)

Fe-Ni-O

1983

99: 129141v Phase diagram of the iron-nickel-oxygen system at 800-1200°. Kuznetsov, Yu. S. (USSR). *Nauch. Tr. Mosk. In-t Stali i Splavov* 1983, (149), 68-77 (Russ). From *Ref. Zh., Metall.* 1983, Abstr. No. 7A62. Title only translated.

фазовая
диаграмма

C.A. 1983, 99, N 16

Fe Ni

1984

Baumann C.A., Van

Lee R.J., et al.

Обсуждение
возможных
результатов
электроф.
состояний

J. Phys. Chem., 1984,
88, 19, 1815-1820.

● (ср. MnAg; III)

FeNi

DM. 22615

1985

Goldstein E, Flores C.,
Msia Y.P.,

электрон.
структ.,
гемма
связи,
До,
расчет.

J. Mol. Struct., 1985, 124,
N3-4, 191-200,

Fe-Ni

1985

Hertzman Staffan,
Sundman Bo.

перуог.
архивиз.

Scand. J. Metall. 1985,
14(2), 94-102.

(см. Fe-Cr-Ni система; I)

Fe/Ni

[om. 25597]

1986

Morse M.D.,

Chem. Rev., 1986, 86, N6,
1049-1109.

(ob3op)

Clusters of Transition-
Metal ● Atoms.

Ni Fe⁺(2) (om. 26919) 1987

Mettich R. L., Freiser B. S.,

crkmp,
Do

J. Amer. Chem. Soc., 1987,
109, N 12, 3537-3542.

$Ni_{\overline{n}} - Fe_{\overline{m}}$

$n=2-4$

1991

Cheng M.-P., Ellis A. E.

Электрон.

состояние,

энергии

связи,

потенциалов

взаимог.

J. Chem. Phys. 1991.

94, N5. C. 3735-

-3747.

(см. $\bullet Fe_{\overline{n}}$; III)

NiFe, Ni₃Fe, NiFe₃ (члелак)

1993

120:86807z Electronic and magnetic structure of ordered iron-nickel alloys. Bohland Filho, J.; Kuhnén, C. A. (Dep. Fis., Univ. Fed. Santa Catarina, Florianópolis, Brazil). *Braz. J. Phys.* 1993, 23(3), 288-98 (Eng). Self-consistent band-structure calculations were performed for ordered ferromagnetic Fe-Ni alloys, using the Linear Muffin-tin Orbital Method. In particular, three compounds are analyzed, namely Ni₃Fe, NiFe and NiFe₃. In order to obtain magnetic and cohesive properties the authors' calculations were carried out at several lattice constants for each compound. The results for the internal excess energy show the stability of these alloys, with respect to the pure elemental solids. The dependence of the magnetic moments with the lattice parameter is investigated and calculated for NiFe₃. The results show a collapse of its magnetic moment (Invar effect) as a function of the sample volume.

Магнетизм
и

Металл. об-ба
мат. параметр

C.A. 1994, 120, N8

FeNi

1995

Choi Ho Jin, Lemos
A. M. et al.

Железо.
Супер-ра
обзор

J. Korean Phys. Soc.
1995, 28(6), 796-798.

● (all. Fe₂; III)