

C-F

1962

Vi-3806.

LiH, NaH, KH, ZnH, CdH, HgH,

CuF, AgH(D_o)

TiO, VO, BaO, CeO, CeF(D_o)

Laud B.B.

Indian J. Phys., 1962, 36, N12, 639-49

On the relation between dissociation
energy and molecular constants.

RF., 1963, 12D90 J

Est/orig.

1966

VI-4530

$\text{MgF}_2, \text{CaF}_2, \text{SrF}_2, \text{BaF}_2, \text{SeF}_3, \text{VF}_2,$

$\text{VF}_3, \text{CrF}_2, \text{MnF}_2, \text{FeF}_2, \text{CoF}_2, \text{NiF}_2,$

$\text{CuF}_2, \text{YF}_3, \text{CdF}_2, \text{LaF}_3, \text{CeF}_3, \text{DyF}_3, \text{HoF}_3,$

ErF_3 (p, Δ Hs, Δ H_{atomis.}, *средн измеренные*)

Kent R.A., Zmbov K., McDonald J.D.,

Besenbruch G., Ehlart T.C., Bantsista R.G.,

Kanaan A.S., Margrave J.L.

Proc. Conf. Nucl. Appl. Nonfissionable Ceram,

Washington, D.C., 1966, 249-55. Sublimation

pressures of refractory fluorides..

M,

F. CA, 1967, 66, N20, 88859h

LaF_3 , CeF_3 , PrF_3 , NdF_3 (rare earth fluorides) 1964

Bauman R.P. Porto S.P.S., VIII-21

Phys. Rev., 1964, 161 (3), 842-7

Lattice vibrations and structure of
rare-earth fluorides.

10. (P) 8

CA 1964, 64, 524, 112548

CeF

1968

see number 1601

J. W. Hastie J. L. Margrave.

"Dep. of Chem., Rice

University Houston, Texas 77001.

p I-50.

Y/D.

1968

Se OF

Кустова Т. Н.,
Обиерина К. Ф.,
Байсанова Л. Р.

Vi
степер

ж. Приш. степерск.,
9(3), 431.

(см. La OF) III

$\text{LaF}_3, \text{CeF}_3, \text{NdF}_3, \text{SmF}_3, \text{EuF}_3, \text{GdF}_3, \text{DyF}_3, \text{1969}$
 $\text{ErF}_3, \text{YF}_3$, оксифториды⁸ и окислы (элементы)
Бацанов С.С., Дерbeneва С.С.,
Бацанова П.Р. VIII 2085

Ж. Прикл. Спектроскоп. 1969, 10(2), 332-6.
Амфотерные элементы фторидов, оксифторидов и окислов редкозем. металлов.
10 СД, 1969, 30, 122, 101332к

Li (aq.) (PrF_3 , NdF_3 , CeF_3 , LaF_3) 1969

Hodni A., Strimer P., Vermillard F.

C. r. Acad. Sci., 1969, 269, 42, B1113-B1114/77

Sur les raies de basse fréquence du
fluorure de praseodyme et d'autres
fluorures de terres rares observés par
absorption dans l'infrarouge lointain

Pukhov, 1970, 105253

8-10

VIII 3575



~~Oxidation of~~ $\alpha(\gamma_i)$
lanthanides

86. VIII 4434 1974.

Basile L.J., Ferraro J.R., Grover D.,
J. Inorg. Nucl. Chem., 1974, 33(4), 1047-53
(англ.)

Infrared spectra of several lanthanide
wide oxyhalides.

8

10 (9)

CA 1974:75(2) 12815d.

DM 111. 3906

Vi , c.p.o.u.u., cur.n. (ScF_3 , YF_3 , LaF_3 , CeF_3 , NdF_3 , EuF_3 , TbF_3 , HoF_3 , YbF_3 , LuF_3)

Hauge R.H., Hastie J.W., Margrave J.L.,
VIII 4448

J. Less-Common Metals, 1971, 23, 24,
359-365 (aural).

Force constants and geometries of matrix isolated rare-earth trifluorides.

PuX4.4, 1971, 195189

10

9

LaF₃, CeF₃, PrF₃, NdF₃, SmF₃, EuF₃ / (Vi, cu.h.n.) 1971
Wesley R.D., DeKock C.W., VIII 5169 8

J. Chem. Phys., 1971, 55, N8, 3866-
- 77 (ann.)

Geometry and infrared spectra
of matrix-isolated rare earth
halides. I Lanthanum trifluoride,
cerium trifluoride, praseodymium
trifluoride, neodymium trifluoride,
samarium trifluoride and euro-
pium trifluoride.

EA, 1971, 75, N24, 145635U

CeF₅

1973

12 Д215. Расчет электронной структуры молекулы CeF₅ методом МО ЛКАО ССП в приближении ПДДП. Багатурьянц А. А., Клименко Н. М., Дяткина М. Е. «Ж. структур. химии», 1973, 14, № 4, 757—761

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ПДДП проведены расчеты электронного строения молекулы ClF₅, как с включением в базис 3d-АО атомов Cl, так и без включения 3d-АО Cl. Принята идеализированная геометрия правильной четырехугольной пирамиды C_{4v}, с длинами аксиальной и экваториальных связей C—F 3,06 и 3,25 ат. ед. соответственно. Проанализирован характер химич. связи и роль 3d-АО в ClF₅. Найдено, что степень участия 3d-АО довольно велика, однако, основной вклад они вносят в σ-связи, тогда как вклад 3d-АО в π-связи незначителен. Качественное связывание в ClF₅ может быть описано одной аксиальной двухцентровой связью Cl—F и двумя экваториальными трехцентровыми связями F—Cl—F.

А. Багатурьянц

Электр
структ.

Ф. 1973 № 12

1974
 $\text{LaF}_3, \text{CeF}_3, \text{NdF}_3, \text{EuF}_3$
 $\text{GdF}_3, \text{HoF}_3, \text{YbF}_3, \text{LuF}_3$ XVIII-647
(средн. квадр. амплит. колеб.).

Sanyal N.K., Dixit L.,
Indian J. Pure Appl. Phys., 1974
12 (7), 495-7.

Mean amplitudes of vibration
of some lanthanide trifluorides.
C.A. 1975. 32 n 4. 23825e. 10 ⊕

50704, 8453

Ch, Ph, TC

Cef₄ 31603

1975

* 4-9390

Goldstein M., Hughes R.J., Unsworth W.D.

Vibrational spectra of some heavy metal
tetrafluorides in the solid state.

"Spectrochim. acta", 1975, A 31, N 5-6, 621-
624

(англ.)

0404 пик

375 378

3 5 5

ВИНИТИ

1975

ScF_3 , YF_3 , LaF_3 , CeF_3 , NdF_3 ,

EuF_3 , GdF_3 (vi, copyright, u.k. copyright)

XVIII 258

Hastie J.W., Hauge R.H., omm. 3900

Margrave J.L., not taken & lost

J. Less-Common. Met., 1975, 39 (2),
309-34.

Geometries and entropies of metal
trifluorides from infrared spectra.

* C.A. 1975, 83 12. 17973f.

10



70204.3601
TC, Ph, Ch, MGU

96201
CeF₃ (примеси) * 96201

1977

8-16548

Weber J., Berthou H., Jørgensen C.
K. Application of the MS X α method to the
understanding of satellite excitations in
inner shell photoelectron spectra of
lanthanide trifluorides. "Chem. Phys.
Lett.", 1977, 45, N 1, 1-5 (англ.)

0803-7711

790 790 '7 95

ВИНИТИ

CeF_3

1977

Weber J; et al.

γ. спект.
снелр

Chem. Phys., 1977,
26 (1), 69-78

●
(ср. LaF_3 ; III)

CF₃

1977

Goel R.K., et al

Indian J. Phys. 1977,
51 B (4), 289-92

coll.
Hocin.

coll. La F₃-III

[всуща 6768]

1978

Slivers C. E., et al

Inorg. Chem., 1978, 17,
N6, 1581-4

CeF₃

CeCl₃

CeBr₃

CeI₃

эл. строен.



(CeLaF; III)

CeF4

Ломовск 104131

1978.

Темров. В. М., "97".

молск.

Струн.

сид. крст

Di

5 вы лесовозн. см. 11113
по лесовозн. репорт. ^{fit fur} ~~Хитов~~

Фенропеловск, 1978,
с 230.

СФ4

1978

Петров В.М.,

геометр,
структура

Электрографическое исследова-
ние строение молекулы
тетраэдрического берилла, урана
и элементной нагрузки ми-
тана.

Диссертация на соискание
ученой степени К-Х.Н.,
Иваново, 1978.

CeF₄

1978

Гейров В. М. и др.

Соврем. пробл. неорганич. химии.

геометрия
молекул.

Ч. 1. НММ химии ТГУ
Л, 1978, 192-б, (Духовни ден.

6'ОНЦИТЭХИМ 2. Заркасс 17
каб. 1978, N2215/78 Ден.)

см. TiF₄ - III

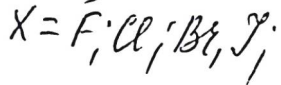
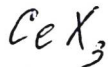
CeF_3

1979

Saroja R., et al

u.r. Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1979, 17, n 11,
772-773.

● see YF_3 ; III



соединения
д.л. состав.

XVIII - 7294
номер 9718 / 1980

Bender C. F.; et al.

J. Inorg. Nucl. Chem

1980, 42, 721-25

CeF₄

DM 31257 1979
Spiridonov V.P., Lasorin E.Z.,

Modern high-temperature
electron diffraction.

структур-
параметр.

10th Materials Research Sympo-
sium on Characterization of
High Temperature, Vapors and
Gases.

NBS Special Publication 561.
Volume 1, ● 1979, 711-756.

(У Трбура)

Letz

Gingerich R. H.,

1980

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

Do;

North-Holland Publishing
Company, 1980.

(серб отмучк в коробке
отмучков ● Gingerich).

6F3

1980

Gingerich K. A.,
Current Topics Materials
Science, Volume 6, edited by
Kaldos E.

Do;
North-Holland Publishing
Company, 1980.

(содержит 6 материалов
от Kaldos E. и K. A. Gingerich).

Се Фз

/от. 183/3/

1981

Рудный Е.Б., Борцевский
А.А.,

и.п.

т.ср.

Депомиров. рук. ВИНТИ,
N 1809-81. Дел., 1981.

CeF_4^-

(Am. 18313)

1981

CeF_4

Рудольф Е. Б. и др.

CeF_3^-

Звездин. М. Т. Г. Хмелев.

л. н.

М., 1980, 40 с.

Рук. ден. ВИНЕТУ.

ден. 1809-81. л. 1981

● (сн ScF_3^-) III

1982

LnF₃Ln = Ce, Nd,
Sm, Gd, Tb,
Tm, Yb;

строение

22 Б55. Исследования методом ЧПДП электронного строения соединений лантаноидов. INDO studies on the electronic structure of lanthanoid compounds. Le-Min Li, Jing-Qing Ren, Guang-Xian (K. H. Hsu) Xu., Xiu-Zhen Wang. «Int. J. Quantum Chem.», 1983, 23, № 4: Proc. 4th Int. Congr. Quantum Chem., Uppsala, 13—20 June, 1982. Contrib. Pap. Pt 4, 1305—1316 (англ.)

Формализм метода ЧПДП обобщен для систем, содержащих 4f-АО. С использованием известных спектроскопич. данных вычислены вертикальные орбитальные потенциалы ионизации для атомов и ионов с электронными конфигурациями $4f^{\alpha}5d^{\beta}6s^{\gamma}$. Для атомов и ионов лантаноидов (Ln) построены зависимость параметров Слейтера и Рака от 4 параметров α, β, γ, q . С использованием модифицированной программы метода ЧПДП рассчитано электронное строение соединений LnF₃ (Ln = Ce, Nd, Sm, Gd, Tb, Tm, Yb). Исследование ~~зарядового распределения в рамках малликовенского~~

IX (76)

X. 1983, 19, N 22

анализа заселенностей показало, что эффективный заряд атома Ln в соединениях составляет в среднем +1,3, что соответствует 43% ионной и 57% ковалентной составляющим хим. связи. Установлено, что 4f-АО не принимают участие в образовании хим. связи в LnF_3 . Частичная ковалентность связи в соединениях лантаноидов обусловлена перекрыванием 5d-АО Ln с АО лигандов. С целью анализа механизма парамагнитного сдвига спектров ЯМР кластеров LnF_8^{5-} в матрице CaF_2 рассчитано электронное строение соответствующих кластеров. Анализ распределения заряда и спиновых плотностей в кластерах показал, что парамагнитный сдвиг в соединениях редких земель скорее может быть описан в рамках поляризац. модели, нежели в модели ковалентной связи.

И. А. Тополь

CeF₄

(Ummuck 15685)

1982

Badtiev E.B., Chilingarov
N.S., Korobov N.M.V., et al.,

Ae;

High Temp. Sci., 1982, 15,
N 2-3, 93-104.

let₃

[Ommeck 13625]

1982

Olson C.G., Lynch D.W.

check J. Opt. Soc. Amer., 1982,
normal- 72, N1, 88-94.
red.



CeF

1984

Om. 20 224

M. Cremp,

M.N.

101: 160463k Rotational analysis of a vibronic band of gaseous cerium fluoride. Clements, R. M.; Barrow, R. F. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, UK OX1 3QZ). *J. Mol. Spectrosc.* 1984, 107(1), 119-23. (Eng). Rotational anal. of an absorption band at 5679.4 Å leads to the following ests. of consts. for the lower state, which is probably the ground state: $B_0 = 0.240182(90)$ cm⁻¹, $\omega = 589(13)$ cm⁻¹, and $r_0 = 2.0484(4)$ Å, where the values in parentheses are of 2σ .

C.A. 1984, 101, N18

CeF

(Dm. 20224) 1984

2 Л246. Анализ вращательной структуры колебательной полосы CeF в газовой фазе. Rotational analysis of a vibronic band of gaseous CeF. Clements R. M., Barrow R. F. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 107, № 1, 119—123 (англ.)

Получен с высоким разрешением спектр поглощения CeF вблизи 567,94 нм. Радикалы CeF получали в высокотемпературной печи реакцией паров Ce с AlF_3 . Из анализа вращательной структуры вычислены молекулярные постоянные в нижнем, по предположению авторов, основном состоянии $\text{CeF } ^2\Phi_{5/2}: B_0 = 0,240182$ (90) см^{-1} , $\omega = 589$ (13) см^{-1} и $r_0 = 2,0484$ (4) Å, где в скобках указаны удвоенные среднеквадратичные ошибки измерений. Е. Н. Т.,

М.А.

ср. 1985, 18, № 2

CeF

От. 20 224 1984

4 Б1185. Вращательный анализ вибронной полосы газообразного CeF. Rotational analysis of a vibronic band of gaseous CeF. Clements R. M., Barrow R. F. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 107, № 1, 119—123 (англ.)

С высоким разрешением измерены электронные спектры поглощения молекул CeF в газ. фазе в области полосы 5679 Å. В полосе выделены 3 ветви, в к-рых обнаружены возмущения вращательных линий. Выполнен анализ вращательной структуры полосы и рассчитаны след. спектроскопич. постоянные (см^{-1}): нижнее состояние — $B_0 = 0,240182$ (90), $D_0 = 1,6015$ (700) $\times 10^{-7}$, $\omega = 589$ (13), $r_0(\text{Å}) = 2,0484$ (4), верхнее состояние — $\nu_0 = 17592,708$ (0,012), $B_0 = 0,234402$ (168), $D_0 = 2,30$ (20) $\times 10^{-7}$, $\omega = 474$ (20), $r_0(\text{Å}) = 2,0735$ (7) (значения ω оценены по соотношению Кратцера). Приведены волновые числа наблюдаемых линий и их отнесение. На основании сравнения с данными для LaF предположено, что нижнее состояние является основным. С. Б. Осин

М. А.

X. 1985, 19, № 4

CeF₃

[Om. 26550]

1987

Culberson J.C., Knappe P.,
et al.,

Ze, <, 9
nuop.
pacnem

Theor. Chim. Acta,
1987, 71, 21-39.

LiXn
 $n=2-4$
 $X=\text{F, Cl, Br, I}$
расчет
длины связей,
углов, энергий
связи и сим.
пост.

1987
Patil S.H.,
J. Chem. Phys., 1987,
87, n 10, 5949-5956.
(all. LiXn (X-hal)
III)

CeF

Om 35297

1991

114: 111133n Doppler-free laser spectroscopy of cerium fluoride (CeF) and observation of hyperfine structure. Azuma, Y.; Childs, W. J.; Menningen, K. L. (Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 145(2), 413-19 (Eng). The only known band in CeF (i.e., that at 5679.4 Å) was examd. with a Doppler-free mol.-beam laser-fluorescence arrangement. Several upper state perturbations were found, and upper state hyperfine structure is measured for low J values. Wavenumber values are assigned relative to the std. Gerstenkorn-Luc iodine ref. atlas, and the spectroscopic consts. are (in cm^{-1}): $T_e = 17592.6894(15)$, $B' = 0.234640(11)$, $D' = 2.79(55) \times 10^{-7}$, $B'' = 0.240322(17)$, $D'' = 1.811(27) \times 10^{-7} \text{ cm}^{-1}$. The result $\Omega'' = 3.5$ was confined and $\Omega' = 4.5$.

M.N.

C.A. 1991, 114, N12

CeF

Am. 35297 1991

✓ 16 B1254. Свободная от доплеровского уширения лазерная спектроскопия CeF и наблюдение сверхтонкой структуры. Doppler-free laser spectroscopy of CeF and observation of hyperfine structure / Azuma Y., Childs W. J., Menningen K. L. // J. Mol. Spectrosc.— 1991.— 145, № 2.— С. 413—419.— Англ.

Измерен свободный от доплеровского уширения спектр лазерного возбуждения флуоресценции монофторида церия в области полосы 567,9 нм. На расстоянии 47 см от источника молек. пучок CeF (нагревалась смесь порошка CaF_2 и металла) пересекался под прямым углом с лазерным пучком (кольцевой лазер на красителе). Наблюдаемая ширина линий составляла около 15 МГц. Во вращат. структуре полосы наблюдались три ветви. Приведено положение и отнесение линий. Значения рассчитанных молек. постоянных CeF (в см^{-1}): $T_e = 17592,6894$, $B' = 0,234640$, $B'' = 0,240322$, $D' = 2,79 \cdot 10^{-7}$, $D'' = 1,811 \cdot 10^{-7}$. Для нижнего электронного состояния $\Omega'' = 3,5$. На основании того, что первы-

M. A.

X. 1991, N 16

ми линиями с наиболее низкими значениями J являются R (3,5), Q (4,5) и P (5,5) для верхнего электронного состояния найдено $\Omega' = 4,5$. Из анализа СТ расщеплений линий P , Q и R ветвей с низкими значениями J определены параметры СТС, $d = 4,8 \pm 1,5$ МГц и $d_J = 0,033 \pm 0,016$ МГц.

В. М. Ковба

аимс

рк.

CeF₃

1991

115: 192883c Electronic coherent anti-Stokes Raman spectroscopy in cerium fluoride (CeF₃). Piehler, David (Dep. Phys., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys.* 1991, 8(9), 1889-98 (Eng). The coherent anti-Stokes Raman spectroscopy (CARS) of electronic states of the Ce³⁺ ion in a CeF₃ crystal at 3.8 K is reported. CARS resonances involving the ground state of the ²F_{5/2} manifold and the Stark components of the ²F_{7/2} manifold at 2161 and 2239 cm⁻¹ were detected. Measurements were made with both visible ($\lambda_1 \approx 476$ nm, $\lambda_2 = 532$ nm) and near-UV ($\lambda_1 = 355$ nm, $\lambda_2 \approx 385$ nm) lasers. The enhancement of the third order susceptibility owing to the electronic transitions, $|\chi^{(3)R}/\chi^{(3)NR}|_{\text{calc}}$, is as great as 4.8. This represents an order-of-magnitude increase over that in singly resonant electronic CARS expts. in other rare-earth crystals. The CARS data also yielded accurate measurements of the Ce³⁺ electronic Raman cross sections. In the visible region, $\sigma_R(2161 \text{ cm}^{-1}) = (5.0 \pm 1.1) \times 10^{-30} \text{ cm}^2$ and $\sigma_R(2239 \text{ cm}^{-1}) = (1.9 \pm 0.7) \times 10^{-30} \text{ cm}^2$. One could calc. both the abs. magnitude and the dispersion of $|\chi^{(3)R}|_{\text{calc}}$ by modeling the virtual intermediate states as a single degenerate 5d state at 45,000 cm⁻¹.

all A.

C.A. 1991, 115, N18

CeF₄

On 36 557

1992

UK, CKP, Vi
Empyknypa

117:78954t Vibrational spectra of cerium tetrafluoride and thorium tetrafluoride molecules isolated in low-temperature matrixes. Bukharina, V. N.; Gerasimov, A. Yu.; Predtechenskii, Yu. B.; Shklyarik, V. G. (NPO, Gos. Inst. Prikl. Khim., St. Petersburg, Russia). *Opt. Spektrosk.* 1992, 72(1), 69-74 (Russ). The IR and Raman spectra for mols. of CeF₄ and IR spectra for ThF₄ were obtained, as isolated in matrixes of Ne, Ar, and Kr at 4 K. To det. the symmetry of the mols., a search was made of ν_2 in the absorption and annealing of samples and polarization measurements in the absorption band region ν_3 . A tetrahedral symmetry was established for both mols.

④₂₁ ThF₄

C.A. 1992, 117, 148

CeF

1992

Kaledin L. A., McCarthy
M. C. et al.

47th Ohio State Univ.
a.n. Int. Symp. Mol. Spectrosc.
Columbus, Ohio, June 15-
19, 1992. ● Columbus (Ohio)
1992. C; 188. (Ce, TBF; III)

let

1992

McCarthy, Michael C; Field, R.W;

J. Chem. Phys. 1992, 96(10), 7237-44
($\Omega' = 4.5 \leq \Omega'' = 3.5$)

The use of magnetic rotation
spectroscopy to simplify and presort
spectra: an application to nickel
monohydride and cerium mono-
(all. NiH,  III) chloride.

LiF₄

Wang Yi,

1992

Chem. J. Chin. Univ., 1992,
13, N 4, C. 506-508.

и.п.

Свойства селени в запечатках
верши



Р.М.Х. N 8, 1993, 85-1023

CeF₃

1992

118: 11956x Bond properties of cerium halide. Wang, Yi (Dep. Chem., Peking Univ., Beijing, Peop. Rep. China 100871). *Guodeng Xuexiao Huaxue Xuebao* 1992, 13(4), 506-8 (Ch). With the aid of Ziegler's transition state method and the improved X α -SW method, the bond properties of cerium halides were analyzed. The covalent bond Ce-X (X represents halogen) is mainly formed by 5d and 4f orbitals of Ce. The spin-unpaired occupied MO's are primarily formed by the 4f orbital of Ce. Some of the spin-paired occupied MO's contain considerable mixt. of 4f orbitals of Ce and halogen orbitals. The ionic bond is principal for CeF₃, however it is not evidently different from the covalent for the other halides.

Характер
Ce-F связи

C. A. 1993, 118, N 2

CeF

1993

Dolg M., Stoll H., et al.

Theor. Chim. Acta 1993,

85(6), 441-50.

Se, We, De,
neop.
pacrim

● (cer. CeO; III).

СФУ

(М. 37882)

1994

Краснова О. Т.,
Автореферат диссертации
на соискание учёной
степени канд. хим.
наук, Иваново, 1994.

М.П.

LiFy

1995

- 17 Б1162. Строение и частоты колебаний молекул CeF_4 и UF_4 / Краснова О. Г., Гиричева Н. И., Гиричев Г. В. // Тез. докл. Науч.-техн. конф. преподавателей и сотр. Иван. гос. хим.-технол. акад., Иваново, 30 янв., — 3 февр., 1995 .— Иваново, 1995 .— С. 53—54 .— Рус.
- ✓ Проведена повторная интерпретация первичного электронографич. материала для молекул UF_4 и CeF_4 , начиная со стадии выделения молекулярной составляющей интенсивности рассеяния. Полученные данные не противоречат тетраэдрической модели строения молекулы UF_4 .

М.П.



(4)

X. 1996, N 17

CeF_3

(om. 37 846)

1995

Molnar J., Kargittai M.,
J. Phys. Chem., 1995, 99,
10 780 - 10 784.

Prediction of the Molecular
Shape of Lanthanide Trihalides.

CeF

DM 38443

1996

125: 180055c Laser spectroscopy of cerium monofluoride: ligand field assignments of some $4f5d6p - 4f5d6s$ transitions. Bloch, Jonathan C.; McCarthy, Michael C.; Field, Robert W.; Kaledin, Leonid A. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1996, 177(2), 251-262 (Eng). The techniques of selectively detected fluorescence excitation, dispersed fluorescence, and magnetic rotation spectroscopy were applied to the CeF mol. and used to characterize one $[17.6]4.5$ electronic state in the -2 eV region and three electronic states with $T_0 < 2000 \text{ cm}^{-1}$: $X(1)3.5$ and $(2)3.5$ with $\Omega = 3.5$ and $(1)4.5$ with $\Omega = 4.5$. Two of these states, the $[17.6]4.5$ and $X(1)3.5$ states, had been obsd. previously [R. M. Clements and R. F. Barrow, *J. Mol. Spectrosc.* 107, 119(1984); Y. Azuma, W. J. Childs, and K. L. Menningen, *J. Mol. Spectrosc.* 145, 413(1991)]. Based on the pattern of Ω -values and the value of $\Delta G_{1/2} = 550 \text{ cm}^{-1}$, the three low-lying states are assigned to the $\text{Ce}^+(4f5d(^3H)6s)\text{F}^-$ superconfiguration.

The upper state is assigned to the $\text{Ce}^+(4f5d(^3H)6p)\text{F}^-$ superconfiguration from computed ligand field monopole $B_0^{\circ}(\text{nl}, \text{nl})$ orbital destabilization energies and 1-electron transition propensity rules.

(CALKMY)

C.A. 1996, 125, N 14

LiX

(Om. 38442)

1996

X = F, Cl, Br, I

Kaledin A.h., Heaven M.C.
et al.,

J. Mol. Spectrosc., 1996, 179,
310 - 319.

The Electronic Structure
of the Liast  molecule

Monohalides: A Ligand
Field Approach.

F: CeF₄

P: 3

DT. 39618

1998

21B123. Структура и силовое поле молекулы тетрафторида церия / Гиричева Н. И., Краснова О. Г., Гиричев Г. В. // Ж. структур. химии. - 1998. 39, 2. - С. 239-246. - Рус.

Выполнена совместная интерпретация электронографических и спектроскопических данных для молекулы CeF(I). Показано, что дифракционная картина соответствует тетраэдрическому строению молекулы со следующими параметрами эффективной конфигурации (T=1180(50) K): $r[g](\text{Ce-F})=2,036(5)$ А, $r[g](\text{F-F})=3,312(25)$ А, $l(\text{Ce-F})=0,074(3)$ А, $l(\text{F-F})=0,261(17)$ А. Найдено полное силовое поле молекулы I в гармоническом приближении. Обсужден вопрос о возможном участии f-электронов атома Ce в образовании хим. связи.

РЖХ, 1998, №21

CeF₄

| 07. 39618 |

1998

структур-
параметры,
D₂, сим. точ.
электронография
и ИК-спектр.

130: 7590d Molecular structure and force field of cerium tetrafluoride. Giricheva, N. I.; Krasnova, O. G.; Girichev, G. V. (State Chemical Technological Academy, Ivanovo. Ivanovo State University, Russia). *J. Struct. Chem.* 1998, 39(2), 192-198 (Eng), Consultants Bureau. Combined interpretation of electron diffraction and spectroscopic data for the CeF₄ mol. is reported. The diffraction pattern corresponds to a tetrahedral structure of the mol. with the following effective configuration parameters (T = 1180(50) K): $r_g(\text{Ce-F}) = 2.036(5) \text{ \AA}$, $r_g(\text{F-F}) = 3.312(25) \text{ \AA}$, $l(\text{Ce-F}) = 0.074(3) \text{ \AA}$, $l(\text{F-F}) = 0.261(17) \text{ \AA}$. The total force field of the CeF₄ mol. is found in a harmonic approxn. Possible participation of the Ce f-electrons in chem. bonding is discussed.

С. А. 1999, 130, № 1

let

1998

Dai, Dadi, et al.

срок,
расчет,
метод

J. Chem. Phys. 1998,
108 (9), 3479-3488

(all. let, ● III)

CeF₃, CeF₄

1998

129: 281255f Theoretical Study of the Molecular Properties of Cerium Trihalides and Tetrahalides CeX_n (n = 3, 4; X = F, Cl). Lanza, Giuseppe; Fragala, Ignazio L. (Dipartimento di Chimica, Università della Basilicata, 85100 Potenza, Italy). *J. Phys. Chem. A* 1998, 102(41), 7990-7995 (Eng), American Chemical Society. Relativistic effective core potential quantum chem. investigations of mol. geometries, vibrational frequencies, and bond dissociation energies of cerium tri- and tetrahalides CeX₃ and CeX₄ (X = F, Cl) are presented. At RHF, MP2, and CASSCF levels of theory, CeF₄ and CeCl₄ possess stable tetrahedral (T_d) geometries, and the calcd. bond distances and vibrational frequencies lie very close to available electron diffraction and vibrational spectroscopy data. There is evidence of different stabilities of present tetrahalides toward the reductive elimination to CeX₃. Thus, the very strong CeF₃-F bond can be contrasted with the easier chlorine elimination to CeCl₃. Five possible lower-lying electronic states are associated with open-shell CeX₃ halides, depending on the 4f orbital occupancy.

молекул
тетра
комплексы,
до, в

⊕Δ



CeCl₃, CeCl₄

C. A. 1998, 129, N 21

The $(4f_z^3)^1$ configuration represents the ground state, mostly due to the nonbonding nature of the corresponding AO whose electron d., perpendicular to the mol. plane, minimizes the electrostatic repulsion between the unpaired 4f metal electron and the halogen pairs. In agreement with exptl. results, pyramidal structures (C_{3v}) are found for CeF_3 for any of $4f^1$ state at all levels of theory. By contrast, the relative stability of the planar and pyramidal structures of $CeCl_3$ strongly depends on the adopted basis set, as well as on the effects of correlation terms.

