

Y-Ru, Rh,
Pd, Os, Ir, Pt

VRu

Gingerich Karl A.

1974

2763

VRh

YPd

J. Chem. Soc. Far. Trans^{ns}
1974, part 2, 70,
N3, 471-76

(20)

YRh

(omitted 9644)

1980

Haque R; Gingerich K.A.

(Do)

mass-
spect

J. Chem. Thermodyn, 1980,
12, 439-46

● (Am Sc Rh) III

Y Tr(2)

[Commica 10932] 1980

Haque R, et al.

(70)

J. Chem. Phys., 1980,
73(8), 4045-49

PtY₍₂₎
(D₀^o)

[Commenc 11820] . 1981.

Gupta, Satish K., et al.

Inorg. Chem. 1981, 20(4),
966-9.

● (cu. Pt₂; III).

Pt Y

1980

Gupta S. K., et al.

20

179th ACS Nat. Meet.

Houston, Tex., 1980, Abstr.

Pap. Washington, D. C.,
S. a., 69.

(cu. Pt₂ ; III)

YPd

Om. 17902

1983

4 Б1044. Исследование методом Хартри—Фока с учетом всех электронов электронного строения и природы связи в молекуле YPd. An all-electron Hartree-Fock investigation of the electronic structure and nature of bonding in the molecule YPd. Shim Irene, Ginge-
rich Karl A. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 101, № 6, 528—534 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в двухэкспонентном базисе сгруппированных гауссовых ф-ций (4d-АО представлены трехэкспонентными ф-циями) рассчитаны потенциальные кривые и электронное строение трех низколежащих состояний $^2\Delta$, $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$ молекулы YPd. Эти состояния соответствуют общему диссоциац. пределу $Y(^2D4d^15s^2) + Pd(^1S4d^13)$. Распределение заряда для каждого состояния исследовано в рамках анализа заселенностей МО по Малликену и по картам деформационных плотностей. Установлено, что хим. связь в трех состояниях м. б. связана с переносом заряда из заполненных $d\sigma$ - и $d\pi$ -орбиталей Pd на вакантные или частично заполненные $d\sigma$ - и $d\pi$ -орбитали атома Y, а также с одновременным

М.А., До;

X. 1984, 19, № 4

обратным переносом заряда из заполненной $5s - AO_Y$ на вакантную $5s - AO$ атома Pd . Эффективный заряд атома Y в YPd имеет малую отриц. величину. Рассчитанные величины дипольных моментов для состояний $^2\Delta$, $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$ составили 0,52, 0,37 и 0,61D, соотв. Вычисления спектроскопич. постоянных исследованных состояний YPd привели к след. значениям: состояние $^2\Delta - R_e = 5,03$ ат. ед., $D_e = 1,87$ эВ, $\omega_e = 144$ cm^{-1} ; состояние $^2\Sigma^+ - R_e = 5,25$ ат. ед., $D_e = 1,69$ эВ, $\omega_e = 128$ cm^{-1} ; состояние $^2\Pi - R_e = 5,24$ ат. ед., $D_e = 1,67$ эВ, $\omega_e = 127$ cm^{-1} .

И. А. Тополь

YPd

[Um. 17902]

1983

99: 218975n An all-electron Hartree-Fock investigation of the electronic structure and nature of bonding in the molecule yttrium-palladium. Shim, Irene; Gingerich, Karl A. (Dep. Chem., Texas A and M Univ., College Station, TX 77843 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1983, 101(6), 528-34 (Eng). All-electron ab-initio Hartree-Fock calcns. were done on the 3 low-lying electronic states $^2\Delta$, Σ^+ , and $^2\Pi$ resulting from the interaction between an Y atom in the $^2D4d^15s^2$ term and a Pd atom in the $^1S4d^{10}$ term. The basis sets used were of double-zeta quality in general, but the 4d-orbitals were represented by triple-zeta functions. The chem. bond in all 3 states was attributed to donation of charge from the filled $d\sigma$ $d\pi$ orbitals of the Pd atom into the empty or partially filled $d\sigma$ and $d\pi$ orbitals of the Y atom and a back-donation of charge from the filled 5s-orbital of Y into the empty 5s-orbital of Pd. The bonding in the YPd mol. produces a small neg. charge on the Y atom. Dipole moments of 0.52, 0.37, and 0.61 D, resp., were predicted for the $^2\Delta$, $^2\Sigma^+$, and $^2\Pi$ states. Equil. distances, dissocn. energies, and vibrational frequencies were calcd. for the low-lying states of YPd.

Ze, Ve, De;

C.A. 1983, 99, n 26

YPd

Um. 17902

1983

3 Д88. Исследование электронного строения и природы связи в молекуле YPd методом Хартри—Фока с учетом всех электронов. An all-electron Hartree—Fock investigation of the electronic structure and nature of bonding in the molecule YPd. Shim Irene, Ginge-
rich Karl A. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 101, № 6, 528—534 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе сгруппированных гауссовых ф-ций $17s13p8d/10s8p5d$ исследовано электронное строение YPd (I) в состояниях $^2\Delta$, $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$, полученных из атома Y в состоянии $^2D 4d^15s^2$ и атома Pd в состоянии $^1S 4d^{10}$. Для указанных состояний длины связей найдены равными 5,08; 5,25 и 5,24 ат. ед., энергии диссоциации — 1,87; 1,69 и 1,67 эВ, колебательные частоты — 144, 128 и 127 см^{-1} , дипольные моменты — 0,51; 0,37 и 0,61 ед. Дебая. Во всех состояниях хим. связь осуществляется путем донорного переноса заряда с заполненных $d\sigma$ - и $d\pi$ -ор-

м.п.; Я₀;

ср. 1984, 18, N3

биталей Pd на вакантные или частично заполненные $d\sigma$ - и $d\pi$ -орбитали Y и дативного переноса — с заполненной 5s-орбитали Y на вакантную 5s-орбиталь Pd, что приводит к небольшому отрицат. заряду на атоме Y.

В. Л. Лебедев

YPd

(OM. 30560)

1988

Van Lee R. J., Weltner W. Jr.,
сверхм
6
дипроче Chem. Phys. Lett., 1988, 150,
N 3-4, 329-333.

Isovalent Transition Metal Dia-
tomic Molecules.

ScNi, ScPd, YNi, YPd.

YRu²⁺

(DM-32879)

1989

meopem.
pacem
chezu

Bauschlicher Ch.W., Z.,
Langhoff S.R.,

Chem. Phys. Lett.,
1989, 161, N 4/5, 383-387

Theoretical
bonding in $\text{LaFe}^{\bullet 2+}$ study of the
and YRu^{2+} LaRu^{2+}

YNi

(OM. 35800)

1991

Faegri K., Jr., Bauschlicher
Ch. W., Jr.,

empyk-
mypo
ab initio
pacrem Chem. Phys. 1991, 153, N3,
399-408.

Heteronuclear transition
metal diatomics: the bonding
and electro  nic structure of

ScNi, YNi, ScPd, and YPd.

YPd

(DM-35800)

1991

Faegri K., Jr., Bauschlicher
Ch. W., Jr.,

empy-
mupa

Chem. Phys. 1991, 153,
N3, 399-408.

ab initio
pacrem

Metronuclear transition
metal diatomic es: the bonding
and electronic structure of

ScNi, YNi, ScPd, and YPd.

1996

F: YC2Ir

P: 3

16B130. Электронная структура и термодинамические свойства YIrC и YIrC[2]. Electronic structure and thermodynamic properties of YIrC and YIrC[2] / Roszak S., Balasubramanian K. [Chemical Physics Letters] // Chem. Phys. Lett. - 1996. - 254, N 3 - 4. - С. 274-280. - Англ.

Квантово-химическими методами МП2, функционала плотности, методами ССП в полном активном пространстве и КВ с несколькими исходными конфигурациями и учетом одно- и двухкратных возбуждений исследованы молекулы YIrC и YC[2]Ir. Проведена оптимизация нескольких альтернативных структур и рассчитаны колебательные частоты. Получено хорошее согласие рассчитанных термодинамических характеристик с эксперим. данными. Проанализирована природа хим. связей в рассмотренных молекулах.

РЖХ 1997

1996

F: YIrC

P: 3

16B130. Электронная структура и термодинамические свойства YIrC и YIrC[2]. Electronic structure and thermodynamic properties of YIrC and YIrC[2] / Roszak S., Balasubramanian K. [Chemical Physics Letters] // Chem. Phys. Lett. - 1996. - 254, N 3 - 4. - С. 274-280. - Англ.

Квантово-химическими методами МП2, функционала плотности, методами ССП в полном активном пространстве и КВ с несколькими исходными конфигурациями и учетом одно- и двухкратных возбуждений исследованы молекулы YIrC и YC[2]Ir. Проведена оптимизация нескольких альтернативных структур и рассчитаны колебательные частоты. Получено хорошее согласие рассчитанных

РЖХ 1997

термодинамических характеристик с эксперим. данными. Проанализирована природа хим. связей в рассмотренных молекулах.

YFe₂

1998

Al. CMP-PR

① LuFe₂



129: 73428n Electronic structures and optical and magneto-optical properties of RFe₂ (R = Y and Lu) intermetallic compounds. Rhee, Joo Yull (Department of Physics, College of Natural Sciences, Hoseo University, Choongnam, 336-795 S. Korea). *J. Phys.: Condens. Matter* 1998, 10(19), 4307-4314 (Eng), Institute of Physics Publishing. The electronic structures of RFe₂ (R = Y and Lu) were calcd. using the linear-muffin-tin-orbitals method within the local-spin-d. approxn. For LuFe₂ the 4f electrons were treated as band electrons. The calcd. band structures and densities of states were similar to those of previous publications. The calcd. magnetic moments were also in good agreement with both previous calcns. and expts. The diagonal and off-diagonal components of the optical cond. tensor were calcd., including the dipole transition matrix elements. The self-energy corrections to the calcd. optical cond. spectra led to a reasonable agreement between expts. and the theor. calcns. for both components. The most significant contributions are from the regions near the Γ -L and Γ -X lines; in particular the regions near the Γ and L points make esp. large contributions. The bands involved in the 2 eV shoulder in the measured optical cond. spectrum are either p-d hybridized (occupied) ones or ones with mostly d character (unoccupied).

C.A. 1998, 129, N 6