

YC

omni 840

1969

NC

Gingerich K. A.

D₀

J. Chem. Phys., 50 (5),
2255.

(see: NC) III

III

YC(2)

Fingerich K. A.,

1979

YC₂(2)

Mass spectrometric determination of atomization energies

YC₃(2)

of inorganic molecules and their correlation by empirical models of bonding.

Do, Damenny. 10th Materials Research Symposium on characterization of High temperature, Vapors and Gases.

NBS Special Publication 561

Volume 1, 1979, 289-302.
(y Tyrbura).

YC

1992

118: 67137y Electronic states and nature of bonding in the yttrium carbide molecule (YC) by all-electron *ab initio* multiconfiguration self-consistent-field calculations and mass spectrometric equilibrium experiments. Shim, Irene; Pelino, Mario; Gingerich, Karl A. (Dep. Chem. Chem. Eng., Eng. Acad. Denmark, Lyngby, DK2800 Den.). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(12), 9240-8 (Eng). Results are presented of an all-electron *ab initio* MC-SCF calcs. of 8 electronic states of YC. Also reported are the calcd. spectroscopic consts. The predicted electronic ground state is $^4\Pi$, but this state is found to be sepd. from a $^2\Pi$ state by only 225 cm^{-1} , and by 1393 cm^{-1} from a $^2\Sigma^+$ state. The chem. bond in the $^4\Pi$ ground state is mainly due to the formation of a bonding MO composed of the $4d\pi$ of Y and the $2p\pi$ on C. The $5s$ electrons of Y are partly transferred to the $2p\sigma$ orbital on C, and they hardly contribute to the bonding. The chem. bond in the YC mol. is polar with charge transfer from Y to C giving rise to a dipole moment of 3.90 D at 3.9 a.u. in the $^4\Pi$ ground state. Mass spectrometric equil. investigations in the temp. range 2365-2792 K have resulted in the dissocn. energy $D^{\circ}_0 = 414.2 \pm 14 \text{ kJ mol}^{-1}$ for YC(g), and a std. heat of formation $\Delta H^{\circ}_f(298.15 \text{ K}) = 708.1 \pm 16 \text{ kJ mol}^{-1}$.

X^{4/7} и другие
М. Соколов,
парен
масс-спектр.

$D^{\circ}_0 = 414.2 \pm 14$
 $\Delta_f H^{\circ}(298)$

с. А. 1993, 118,  8

(4)

YC ($\Delta_f H^{\circ}_{298}$)

1992

УС

10Д140. Исследование электронных состояний и природы связи в молекуле УС с помощью неэмпирического метода многоконфигурационного взаимодействия и равновесных масс-спектрометрических экспериментов. Electronic states and nature of bonding in the molecule УС by all electron ab initio multiconfiguration self-consistent-field calculations and mass spectrometric equilibrium experiments / Shim Irene, Pelino Mario, Gingerich Karl A. // J. Chem. Phys.. — 1992. — 97, № 12. — С. 9240—9248. — Англ.

М.Л.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом корреляции электронов в модели полного активного пространства в базе гауссовых ф-ций $17s13p8d/10s6p1d$, сгруппированном в $10s8p5d/4s3p1d$, исследовано электронное строение УС (I) в 8 низколежащих состояниях. Приведены потенциальные кривые, распределения электронной плотности, спектроскопич. постоянные. Обнаружено, что основным является состояние ${}^4\Pi$, однако ${}^2\Pi$ и ${}^2\Sigma^+$ расположены выше лишь на 225 и 1393 см^{-1} . Обсуждена природа химич. связи, которая полярна

ф. 1993, N 10

(перенос заряда с Y на C), что приводит к дипольному моменту 3,90 ед. Дебая. Проведены масс-спектрометрич. исследования I. Энергия диссоциации оценена в $414,2 \pm 14$ кДж/моль (теоретич. значение занижено примерно на треть, видимо, вследствие недостаточного учета корреляционных эффектов), стандартная теплота образования составляет $703,1 \pm 6$ кДж/моль.



YC

DM 38259

1994

122: 41428b Jet-cooled optical spectroscopy of yttrium monocarbide. Evidence for a $^4\Pi_1$ ground state. Simard, Benoit; Hackett, Peter A.; Balfour, Walter J. (Inorganic Chemical Dynamics Group, Steacie Institute for Molecular Sciences, National Research Council of Canada, 100 Sussex Drive, Ottawa, Ontario, Can.). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 230(1-2), 103-9 (Eng). The 1st observation of Y monocarbide, YC, is reported. A no. of vibronic bands were obsd. in the 635-650 nm region. Four of these bands were studied at a resolu. of 120 MHz, and rotational consts. were derived. The bands originate from a common lower $\omega = 5/2$ state which, from recent ab initio calcns. [Shim, Pelino and Gingerich, *J. Chem. Phys.* 97(1992) 9240], is the lowest lying spin-orbit component of the ground $^4\Pi_1$ state. This state arises from a $-10\sigma^2 11\sigma^1 12\sigma^1 5\pi^3$ electron configuration. The nature of the excited states is also discussed.

(X $^4\Pi_1$, camp)C.A. 1995, 122, NY

Yl82

1996

Lebedkin S; et al.,

(uk, csp) Anwendungspotential. Fullerenes,
Statussemin 1996, 123-126

(all. Yal82; III)

1996

F: YC3

P: 3

97. 13B151. Небольшие кластеры иттрий-углерод и лантан-углерод. Наиболее стабильными являются циклические структуры. Small yttrium-carbon and lanthanum-carbon clusters: Rings are most stable / Strout Douglas L., Hall Michael B. // J. Phys. Chem. - 1996. - 100, N 46. - С. 18007-18009. - Англ.

Место хранения ГПНТБ Методом функционала плотности (B3LYP), а также методом связанных кластеров исследовано электронное строение различных структур нейтральных и катионных кластеров $MC[x]$, $M=Y, La$; $x=3-6$. Обнаружено, что во всех случаях наиболее стабильны циклич. структуры.

PMX 1997