

Y_2O_3

1963

278407 INFRARED ABSORPTION SPECTRA OF RARE-EARTH OXIDES IN THE REGION 800 to 240 cm^{-1} . William L. Baun and Neil T. McDevitt. (Air Force Materials Lab., Wright Patterson AFB, Ohio). J. Am. Ceram. Soc., 46: 294 (June 1963).

Rare earth oxides give individualistic infrared spectra in the intermediate region 800 to 240 cm^{-1} . Spectra of all type C (cubic) are similar with each other, with a band occurring at 535 to 570 cm^{-1} , while type A (hexagonal) and type B (monoclinic) give spectra much different from those of type C. Characteristic frequencies are tabulated for the spectra of type C and for other rare earth oxides. (D.L.C.)

 44-1117-1184
 89-1117-1184

NSH-1963-14.16

1963

ВР-VIII-1114

Оксиды

редкоземельных эл-тов.

Спектры
кристаллов

9 Б135. Инфракрасные спектры поглощения оксидов редкоземельных элементов в области $800-240 \text{ см}^{-1}$. Baun William L., McDevitt Neil T. Infrared absorption spectra of rare-earth oxides in the region 800 to 240 cm^{-1} . «J. Amer. Ceram. Soc.», 1963, 46, № 6, 294 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ряда оксидов редкоземельных элементов в области $800-240 \text{ см}^{-1}$. Обнаружено большое сходство спектров кристаллов, принадлежащих к куб. сингонии, напр. оксидов Lu_2O_3 , Yb_2O_3 , Tm_2O_3 , Er_2O_3 , Y_2O_3 , Ho_2O_3 , Dy_2O_3 , Gd_2O_3 их отличие от спектров оксидов Nd_2O_3 , Pr_6O_{11} , La_2O_3 , Sm_2O_3 , Eu_2O_3 , Sc_2O_3 и CeO_2 , кристаллы которых принадлежат к другим сингониям. Приведены характеристич. частоты для 15 соединений.

Т. Игнатович

X. 1964. 9

VIII 1991

Sc_2O_3 , Y_2O_3 , La_2O_3 (vi)

1966

Petru F., Muck A.,

Z. Chem., 1966, 6 N 10 7, 386

Chemistry of rare earth elements.

XXIX. Infrared absorption spectra of

Sc_2O_3 , Y_2O_3 and La_2O_3

E. C. T. L. H.

CA, 1967, 66, N 20, 898Ba

10

Bp - 5974-V | 1967

Y_2O_3

Kammari O; Yamaguchi N
Sato K.

(v; c.n.)

"Japan Analyst"
1967, 16, N 10, 1050-55

Y_2O_3 (x)

1984

101: 80847y Calculation of the theoretical vibrational spectrum of yttrium oxide (Y_2O_3). Porotnikov, N. V.; Kondratov, O. I.; Kochergina, L. L.; Petrov, K. I. (Inst. Tonkoi Khim. Tekhnol. im. Lomonosova, Moscow, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1984, 29(7), 1664-9 (Russ). The vibrational spectrum of Y_2O_3 was calcd. using the valence force field method and the polymer chain approxn. Based on the results, the bands assignment in the exptl. spectra was carried out, the frequency branches of periodical chain vibrations were constructed, and the force field of the crystal was estd. The force const. of Y-O bonds lie within the range $(1.3-3.6) \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$.

Алг. ноем.,

Y-O chezu

C.A. 1984, 101, N 10

Y_2O_3 (к)

1984

У

20 Б1215. Расчет теоретического колебательного спектра Y_2O_3 . Поротников Н. В., Кондра-
тов О. И., Кочергина Л. Л., Петров К. И. «Ж.
неорганич. химии», 1984, 29, № 7, 1664—1669

В приближении полимерных цепей метода валентно-силового поля проведен расчет теор. колебательного спектра полуторного оксида иттрия с кубич. структурой С-типа. На основании расчета предложено отнесение эксперим. спектра, построены частотные ветви колебаний периодич. цепи, оценено силовое поле кристалла. Анализ значений силовых постоянных связей $Y-O$ показывает, что они лежат в пределах $1,3-3,6 \cdot 10^6$ см⁻². Столь существенные различия обусловлены структурной неэквивалентностью атомов иттрия. Резюме

ν_i , спектр;
сил. пост.

Х. 1984, 19, № 20

$Y_2O_3(K)$

1985

3 Б1231. Оптические спектры, энергетические уровни и анализ в рамках теории кристаллического поля трехзарядных положительных ионов редкоземельных элементов в Y_2O_3 . IV. C_{3i} -положения. Optical spectra, energy levels, and crystal-field analysis of tripositive rare-earth ions in Y_2O_3 . IV. C_{3i} sites. Gruber J. B., Leavitt R. P., Morrison Clyde A., Chang N. C. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 12, 5373—5378 (англ.)

М.П. Проведен анализ новых и известных ранее данных по спектрам поглощения, флуоресценции, ИК-спектрам и данным электронного КР для ионов Eu^{3+} , Dy^{3+} и Er^{3+} в C_{3i} -положениях крист. решеток Y_2O_3 и R_2O_3 , где $R=PЗЭ$. Идентифицированы и отнесены все энергетич. уровни, связанные с C_{3i} -позициями и принадлежащие основному и первым двум возбужденным множествам для Eu^{3+} : Y_2O_3 и основному и первому возбужденному множествам Dy_2O_3 и Er_2O_3 . На основании этих данных

X. 1987, 19, №3

рассчитаны параметры крист. поля B_{km} для ионов Eu^{3+} , Dy^{3+} и Er^{3+} . Из полученных значений B_{km} выведены феноменологич. компоненты крист. поля A_{km} и сопоставлены со значениями, предсказанными ранее на основе модели эффективного точечного заряда. На основании полученных значений A_{km} предсказаны B_{km} и энергетич. уровни для ионов Tb^{3+} , Ho^{3+} , Tm^{3+} и Yb^{3+} , для к-рых пока отсутствуют необходимые эксперим. данные. Сообщ. III см. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, 4758. И. Ф. Голованева



1990

Y₂O₃

17 B1047. Электронная структура оксида иттрия.
Electronic structure of yttrium oxide / Jollet F., Noguera C., Thromat N., Gautier M., Duraud J. P. // Phys. Rev. B.— 1990.— 42, № 12.— С. 7587—7595.— Англ.

Методами рентгеновской и фотоэмиссионной спектроскопии и спектроскопии тонкой структуры края рентгеновского поглощения (ТСКРП) изучены симметрия пустых состояний различных орбиталей в зоне проводимости и форма валентной зоны в стехиометрич. оксиде Y₂O₃ (I). Полуэмпирич. методом сильной связи в рамках кластерного приближения с использованием кластеров разного размера изучено электронное строение I и оценена ионность связи Y—O в I. Показано, что квази-октаэдрич. локальное окружение атомов Y является ответственным за расщепление *d*-уровней. Приближения поля лигандов недостаточно для описания симметрии атомов Y и O и формы валентной зоны, для к-рых подчеркивается важность зонных эффектов. Показана возможность существования прямого вз-вия

M. A.

X. 1991, N 17

между соседними атомами кислорода и именно этим объяснено наличие низкоэнергетич. пиков в валентной зоне. Двухгорбая структура полосы кислорода в спектрах ТСКРП является следствием гибридизации Or -орбиталей и e_g и t_{1u} -состояний атомов Y .

И. Н. Сенченя



Y_2O_3 (K)

1994



sum. chg

(+2)

121: 308645g Electron density distribution and chemical bonding of Ln_2O_3 ($Ln = Y, Tm, Yb$) from powder x-ray diffraction data by the maximum-entropy method. Ishibashi, H.; Shimomoto, K.; Nakahigashi, K. (College Integrated Arts and Sciences, Univ. Osaka Prefecture, Osaka, Japan 593). *J. Phys. Chem. Solids* 1994, 55(9), 809-14 (Eng). The electron d. distribution maps and the effective charges on Ln atoms of Ln_2O_3 ($Ln = Y, Tm, Yb$), which have a C-type rare-earth sesquioxide structure, have been detd. by a combination of pattern decompn. of x-ray powder diffraction data and the max.-entropy method (MEM). The majority of 4f-electrons, which belong to Tm and Yb atoms, is localized in the compds. and this may be due to a strong screening by the outer 5s and 5p electrons. The overlapping of electron clouds of Ln and O atoms on Tm_2O_3 and Yb_2O_3 decreased with increasing bond length. The results indicated that there was a definite difference in the chem. bonding between 4d-atoms (Y) and 4f-atoms (Tm Yb). The mean effective charges on 8b- and 24d-site metal ions were +2.83, +2.13 and +2.03 for Y, Tm and Yb , resp., and therefore Y_2O_3 has a more ionic bonding character than Tm_2O_3 and Yb_2O_3 .



C.A. 1994, 121, N26

Tm_2O_3, Yb_2O_3 (K)