

M-F-O

VIII 2521

1948

UCl_6 , UO_2F_2 , $Ca(UO_2)O_2$, $Sr(UO_2)O_2$
(re)

Zachariasen W.H.,
Acta crystallogr., 1948, 1, 265-268

CA, 1949, 3709 b

lin

VIII 3140

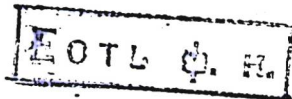
1957

UO_2F_2 , UO_2Br_2 , UO_2SO_4 ,
 $\text{UO}_2(\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2)_2$ (electrolyte)

Pant D.D., Pandey B.C.,
J. Scient. and Industr. Res.,
1957, BC 16, n7, 8280-8285

Prex, 1958, n8, 23857

10



$UO_2F_2(2)$
2661

Hobbs W.E.,

1958

Дополнение
М.П.

J. Chem. Phys., 1958, 28, p. 1220

$UO_2F_2(2)$ М.П.

144



VO_2F_2
4377

Stammreich H., Kawai K., 1959
Tavares Y.,

Допосуда

Spectrochim. Acta, 1959, 15, p. 438

и.н.

VO_2F_2 (2) и.н.

133



VO_2F_2
3456

Mc Glynn S.P., Smith J.K.,
1961

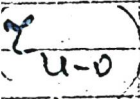
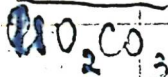
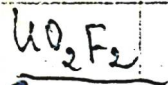
Допросеба
и.и.

J. Mol. Spectrosc., 1961, 6,
p. 164

36



VO_2F_2 и.и.



BQ - 1585 - VIII

1963

Uranium-oxygen bond lengths in uranyl salts: uranyl fluoride and uranyl carbonate. Henry R. Hoekstra (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *Inorg. Chem.* 2, 492-5(1963). Infrared absorption curves for carefully purified samples of UO_2F_2 and UO_2CO_3 were obtained. By using the new frequencies and Badger's rule; the uranyl bond lengths are calcd. to be 1.71 Å. in UO_2F_2 and 1.72 Å. in UO_2CO_3 , in very good agreement with the Zachariasen bond length-bond strength relation. The U-O bond length in different uranyl salts shows relatively little variation (1.71-1.76 Å.); the bond order in the simple anhyd. salts may approach 3.

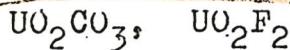
RCHH

C.A. 1963.59.1.

136 of

$V_3(UO_2^{2+}), Vi+V_{3i}$

1963



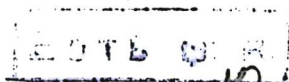
24-0, ceneobore uocem.

Hoekstra H.R.,

Inorgan . . Chem., 1963, 2, N 3, 492-495

Uranium-oxygen bond lengths in uranyl
salts: uranyl fluoride and uranyl carbonate

Росхим., 1964, 175 119



10, M11

VIII 1959

1983

UO₂F₂ (Vi)

UO₂Cl₂ (Vi)

Narasimham K.V.,

Developm. Appl. Spectrosc. Vol. 2,

Chicago, Ill, Spectrosc. Soc., 1963,

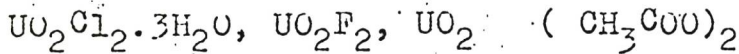
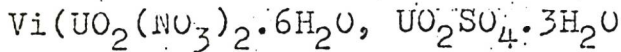
142-159.

Absorption spectra of uranyl halides

PancXun., 1965, 4 10 102

10

1964



Bist H.D., Pant D.D.,

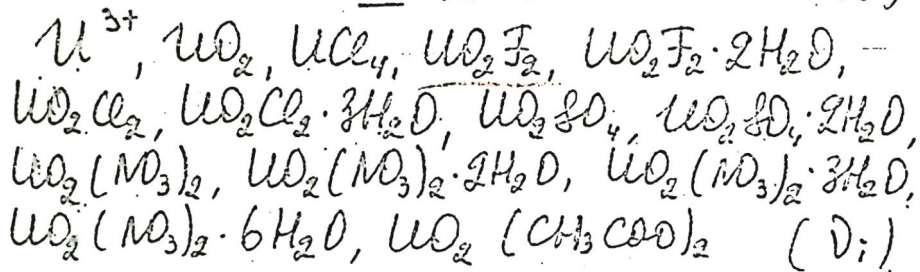
Indian J, Pure and Appl. Phys., 1964, 2, N 4,
107-120

Infrared spectra of uranyl salts.

cc76 opm

Pack. 1964, 12 D271

10



Jęzowska-Trzebiatowska B., Bartecki A.,
 Bukietynska K., Kokołowicz W., Kędzia B.,
 Proc. Sympos. Coordinat. Chem. Tihany,
 Hungary 1964, Budapest, 1965, 95-105

10

2276 qk

УФ₃
4897

1966
Романов Т.В., Спиридонов В.П.,

М.Н.
Форофиди

Ж. структуры хим., 1966, 7,
с. 882.

125 Ф

УФ₃

М.Н.



УОФ₄
4227

Seip H.M., Seip R.,

1966

Дополнения

Acta Chem. Scand., 1966, 20, p.2698

. и. н.

35 φ

УОФ₄ и. н.



NH_4^+ , $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$ (V:) 13, 2 1967
VIII 337
Brusset H., Gillier-Pandrand H.,
Nguyen Qu' y Dao. (1209-11)
C.R. Acad. Sci., Paris, Ser. C., 1967, 265(22)
Infrared spectra of potassium dioxopenta-
fluorozanate (VI) and ammonium dioxo-
pentafluorozanate (VI) salts. CA, 1968, 68, 514, 6400₂

UO_2F_5 3-

Bp-337-VIII

1967

NH_4^+

($q. u. u. f. e. r. g.$)

diagonal

Chem. Ude

64004r Infrared spectra of potassium dioxopentafluorouranate (VI) and ammonium dioxopentafluorouranate(VI) salts. Henry Brusset; Helene Gillier-Pandraud, and Nguyen Quy Dao (Ecole Norm. Super., Paris). C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. C 265(22), 1209-11(1967)(Fr). The ir bands are attributed to the NH_4^+ and $UO_2F_5^{---}$ ions. The potential energy function is given and the strength consts. are calcd. A slight deformation is shown to exist for the $UO_2F_5^{---}$ ion in $(NH_4)_2UO_2F_5$ by comparison with $K_2UO_2F_5$. Jean P. Pinson

+ lues

C.A. 1968. 68-14



1968

UOF³⁻

25

7 Д335. Физико-химическое изучение пентафтороксигуаната аммония. II. Изучение ИК-спектров $(\text{NH}_4)_3\text{UO}_2\text{F}_5$ и $\text{K}_3\text{UO}_2\text{F}_5$. Анализ нормальных колебаний для иона $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$. Nguyen - Quy - Dao. Études physico-chimiques du pentafluoxyuranate d'ammonium. II. Étude des spectres infrarouges de $(\text{NH}_4)_3\text{UO}_2\text{F}_5$ et de $\text{K}_3\text{UO}_2\text{F}_5$. Analyse en coordonnées normales de l'ion $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$. «Bull. Soc. chim. France», 1968, № 10, 3976—3981 (франц.; рез. англ.)

Vi,

ссыл. пост.

Получены спектры поглощения $(\text{NH}_4)_3\text{UO}_2\text{F}_5$ и $\text{K}_3\text{UO}_2\text{F}_5$ в области 4000—33 см^{-1} . Полосы поглощения 1700, 873, 740, 425, 380 и 230 см^{-1} отнесены к колебаниям иона $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$. Кроме того, в спектре $(\text{NH}_4)_3\text{UO}_2\text{F}_5$

ф. 1969. 72

появляется полоса 816 см^{-1} , которую авторы относят к вал. кол. группы UO_2 . Проявление этого колебания, которое запрещено в ИК-поглощении для линейных молекул, говорит о том, что группа UO_2 в $(\text{NH}_4)_3\text{UO}_2\text{F}_5$ несколько деформирована. Рассчитаны силовые постоянные иона $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$ и частоты норм. колебаний в рамках теории Вильсона — Дешнуса. Эксперим. частоты хорошо согласуются с рассчитанными. Ч. I см. Nguyen-Quy-Dao. «Bull. Soc. chim.», 1968, 3542. Библ. 18. Ю. М. Л.

UO_2F_2
3707

Ohwada K.,

1968

u. n.
Дорофеева

Spectrochim. acta, 1968,
A24, p. 595.

108



VO_2F_2 u. n.

UDF₄
2522

Gundersen G., Hedberg K., 1969

Дорогунда

J. Chem. Phys., 1969, 51, p.2500.

и.и.

UDF₄(2) и.и.

124



1969

3-

UO₂F₅

18 Б292. Исследование пентафтороуранилата калия методами ИК-спектроскопии. Харитонов Ю. Я., Князева Н. А., Буслаев Ю. А. «Ж. неорганич. химии», 1969, 14, № 4, 1034—1039

Исследованы ИК-спектры (4000—140 см⁻¹) кристаллич. K₃UO₂¹⁶F₅, а также смеси K₃UO¹⁶O¹⁸F₅ + K₃UO₂¹⁶F₅ + K₃UO₂¹⁸F₅. Табулированы данные по положению, относит. интенсивности и отнесению полос в спектрах к колебаниям аниона UO₂F₅³⁻ (симметрия D_{5h}). Проведен приближенный расчет частот и форм колебаний типа A₁' и A₂'' (в случае молекулы, содержащей O¹⁶ и O¹⁸, симметрия C_{5v}, рассчитаны частоты колебаний типа A₁), позволивший сделать следующее отнесение: в случае UO₂¹⁶F₅ преимущественно асим. вал. кол. UO₂(A₂'') 861, сим. вал. кол. UO₂(A₁') ~799, вал. кол. UF(E₁') 375.

ж. 1969. 18

асим. деф. кол. $\text{OUF}(A_2'')$ 288 или 218 см^{-1} ; для $\text{UO}_2^{18}\text{F}_5$ соотв. 822, ~758, 375, 286 или 214 см^{-1} . По значениям частот колебаний анионов вычислены комбинации констант: $K_Q - I$ (K_Q — силовая постоянная $\text{U}-\text{O}$, I — коэффициент взаимодействия двух связей $\text{U}-\text{O}$) 5,672—5,627 мдин/А , $K_\beta + 4t - x_\beta$ (K_β — силовая постоянная угла OUF , t и x_β — коэффициенты взаимодействия угла OUF с углом OUF' и угла OUF с углом $\text{O}'\text{UF}$ соответственно 2,10—1,406 мдин/А , A (коэффициент взаимодействия связи UO с углом OUF) —0,544 — —0,626 мдин . Вариации в силовых постоянных связаны с неоднозначностью отнесения деф. кол. OUF . Расчетные данные показывают, что для аниона $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$ колебания уранильной группы приблизительно характеристичны по частоте, но менее характеристичны по форме.

Ю. В. К.

Защитный, окислы, (сигнатура) 1969
окислы у(V) (vi) 86.

Selbin J.; Ortego I. D. VII 3525

Chem. Rev. 1969, 69(5), 657-71.

Chemistry of uranium (V)

16

10
~~См. также~~

EA, 1969, 71, N22, 1085207

UO_2F_2
1357

1970
Atoji M., McDermott M.J.,

u. n.
Doposruba

Acta crystallogr., 1970, B26,
p. 1540

111

UO_2F_2 u. n.

UO_2F_2
4236

1970
Sergienko V.I., Davidovich R.L.,

и.н.
Допослеба

Spectrosc. Lett., 1970, 3, p. 35.

106



UO_2F_2 и.н.

55 UO₂ - кон (сил. пост.) 8 1971

VIII 4978

Харитонов Ю. Я., Князева Н. А.,

Колебательные спектры неорг.
хим., 1971, 219-59 (русск.), изд-во
"Наука", Москва.

Колебательные спектры
комплексв уранила
и осмила. ○

10
СА, 1971, 75, №2, 82063h

UD₂F₂(?) [Omn. 22605] 1971

Ngai L.H., Stafford F.E.,

Adv. High. Temp. Chem.,

U.S. N. B. 1971, 3, 213-270.

VO_2F_2
37082

Ohwada K.,

1971

u.n.
Dopopreeva

J. Inorg. ^{and} Nucl. Chem., 1971,
33, p. 1615.

92



VO_2F_2 u.n.

IF_7 , ReF_7 , UF_7^{3-} , $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$ (even. no. cm.) 1971

Wendling E., Mahmoudi S., Cerf C.,

Spectrosc. Lett., 1971, 4, N9, 297-302

G-, F-, and Σ -matrices for
XY₅Z₂ molecules of D_{5h} symmet
(atm.)
ry.

10



CA, 1972, 76, N6, 292206

1972

 $(\text{UO}_2\text{F}_5)^{3-}$ γ_i

t) 160280p Infrared spectrum of tripotassium uranyl fluoride. Ohwada, Ken; Soga, Takesi; Iwasaki, Matae (Div. Chem., Japan At. Energy Res. Inst., Tokai, Japan). *Spectrochim. Acta, Part A* 1972, 28(5), 933-8 (Eng). The ir absorption spectrum of $\text{K}_3\text{UO}_2\text{F}_5$ was obsd. in the frequency region $4000-30\text{ cm}^{-1}$. A normal coordinate anal. of the $(\text{UO}_2\text{F}_5)^{3-}$ anion, neglecting K^+ ions, was carried out by using Wilson's FG matrix method. On the basis of the results of this treatment, 6 of the 9 bands obsd. for $\text{K}_3\text{UO}_2\text{F}_5$ were reasonably assigned either to the ir-active fundamentals or to ir-active combination tones for the inner $(\text{UO}_2\text{F}_5)^{3-}$ anion. The other 3 bands were assigned tentatively to the lattice vibration modes of outer K^+ ions with inner $(\text{UO}_2\text{F}_5)^{3-}$ anion. Brief discussions are also given on the force consts. obtained for the U—O and U—F bonds in the $(\text{UO}_2\text{F}_5)^{3-}$ anion.

C. A. 1972. 76. 26

1972

 $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$
(сим. UO_2F)

19 Б259. Инфракрасный спектр трикалийуранилфторида. Ohwada Ken, Soga Takesi, Iwasaki Matae. The infrared spectrum of tripotassium uranyl fluoride. «Spectrochim. acta», 1972, A 28, № 5, 933—938 (англ.)

Измерен ИК-спектр $\text{K}_3\text{UO}_2\text{F}_5$ (I) в области 4000—30 см^{-1} . Проведен анализ нормальных колебаний аниона $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$ (локальная симметрия D_{5h}) и вычислены силовые постоянные в валентно-силовом поле. Показано, что силовая постоянная связи U—F в I существенно ниже, чем в UF_6 , т. е. эта связь в I имеет более ковалентный характер. Значения валентной силовой постоянной свя-

X. 1972. 19

зи $U-O$ и деф. силовой постоянной $O-U-O$ близки к величинам, вычисленным в приближении простой трехатомной модели для группы UO_2 . На основании данных расчета и аналогии с др. слоями уранила предложено отнесение для 6 из 9 наблюдаемых полос: 5 полос отнесено к фундаментальным колебаниям и одна — к составному тону. Три др. полосы предварительно отнесены к колебаниям решетки.

Е. Разумова

UO₂F₂

1972

(Vi) 81646e Far-infrared spectrum of uranyl fluoride. Ohwada, Ken (Tokai Res. Establ., Japan At. Energy Res. Inst., Ibaraki, Japan). *J. Inorg. Nucl. Chem.* 1972, 34(7), 2357-8 (Eng). The ir spectrum of UO₂F₂ is given for the 50-35-cm⁻¹ region. There are absorption bands at 260, 234, and 146 cm⁻¹. Obsd. and calcd. frequencies and assignments are tabulated for frequencies < 870 cm⁻¹.

C.A. 1972. 44, 12

III-1075-dg
B9-57401-VIII

UO₂F₂

Di

23 Б249. Спектр уранилфторида в длинноволновой инфракрасной области. Ohwada Ken. Far-infrared spectrum of uranyl fluoride. «J. Inorg. and Nucl. Chem.», 1972, 34, № 7, 2357—2358 (англ.)

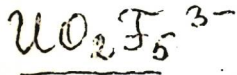
Измерен ИК-спектр двух различным образом приготовленных образцов UO₂F₂ (суспензия в вазелиновом масле) в области 500—30 см⁻¹. Найдены три полосы поглощения: 260, 234 и 1146 см⁻¹. Полоса 260 см⁻¹ отнесена к вал. кол. U—F класса E_u; полоса 234 см⁻¹ к деф. кол. O—U—O класса E_u. Эксперим. частоты находятся в хорошем согласии с расчетными данными, имеющимися в литературе.

А. П. Курбакова

1972

III-1075-69

X-1972-23



1972

81632x Calculation of the frequencies and forms of normal vibrations of a uranyl fluoride anion complex $(\text{UO}_2\text{F}_5)^{3-}$. Phan Dinh Kien; Komyak, A. I. (USSR). *Zh. Prikl. Spektrosk.* 1972, 16(6), 1052-6 (Russ). Force consts., frequencies of vibration and forms of vibrations of $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$ are given on the basis of the anal. of luminescence spectra of $\text{K}_3\text{UO}_2\text{F}_5$ Wladyslaw S. Brud

Chem.
no. 1.
(Vi)

C. A. 1972. 44. 12

1982

UO₂F₃³⁻
25V.
Chen. n.

133638e Infrared and Raman spectra of potassium dioxopentafluorouranate(VI). Normal coordinate analysis of the pentagonal bipyramidal ion $\text{UO}_2\text{F}_3^{3-}$. Wendling, Edgar; Mahmoudi, Saad (Dep. Chim., Fac. Sci. Alger, Algiers, Algeria). *Bull. Soc. Chim. Fr.* 1972, (1), 40-6 (Fr). The ir and Raman spectra ($33-4000\text{ cm}^{-1}$) of $\text{UO}_2\text{F}_3^{3-}$ (approx. pentagonal bipyramidal symmetry, K^+ salt) were recorded. A normal coordinate anal. was performed. Assignments of fundamental and combination bands are given. The valence force consts. 1.33 and 6.11 mdyne/Å, the mean amplitudes of vibration (298°K) 0.0655 and 0.0375 Å, and the bond orders 0.62 and 2.30 were detd. for the U-F and U-O bonds, resp. Bonds between coordinated F^- and the uranyl group are essentially electrostatic in nature. An empirical relation is given which allows calcn. of U-O and U-F bond lengths.

C.A. 1982. 76.22

1972

UO₂F₅³⁻

14 Б173. Изучение ИК- и КР-спектров диоксопентафторураната калия. Нормально-координатный анализ пентагонального бипирамидального иона $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$. Wendling Edgar, Mahmoudi Saâd. Étude des spectres IR et Raman du dioxopentafluorouranate (VI) de potassium. Analyse en coordonnées normales de l'ion $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$ bipyramidal pentagonal. «Bull. Soc. chim. France», 1972, № 1, 40—46, VIII (франц.; рез. англ.)

Измерены ИК- и КР-спектры ($4000\text{—}33\text{ см}^{-1}$) иона $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$, имеющего симметрию пентагональной бипирамиды ($\sim D_{5h}$). Произведен анализ нормальных колебаний иона предложено 12 вариантов отнесения полос в спектрах. Более точное отнесение невозможно из-за неопределенности нек-рых деф. силовых постоянных. Зна-

См. п.

X. 1972. 14

чения вал. силовых постоянных $U-O$ и $U-F$ равны 6,11 и 1,33 мди/А соотв. Установлены значения порядков связей $U-O$ и $U-F$ (2,3 и 0,62 соотв.) и дана оценка границ интервала средних амплитуд колебаний (0,0655—0,0375 А при 25°). Связи между лигандами F- и уранильными группами имеют существенно электростатич. характер. Выведено эмпирич. уравнение; связывающее силовую постоянную f (мди/А) и длину связи r (А):

$$r = -0,577 f^{0,371} + 2,915.$$

И. В. Кумпаненко

UDF₃
4948

Clark R.J.H., Mitchell P.D., 1972

u.n.
Дорогуба

J. Chem. Soc. Dalton Trans.,
1972, ~~21~~, p. 2429.

151

UDF₃

u.n.



UO_2F_2
2367

Garner C.D., Mather R., Dove M.F.A.,
1973

Дорофеева
и.и.

J. Chem. Soc. Chem. Commun., 1973,
p. 633

134

$UO_2F_2(2)$ и.и.



UOF₄

1973

6 Б155. Химия фторидов и оксифторидов урана. I. Получение и колебательные спектры окситетрафторида урана. Jacob E., Polligkeit W. Beiträge zur Chemie der Uranfluoride und -oxidfluoride. I. Darstellung und Schwingungsspektren des Uranoxiddtetrafluorids. «Z. Naturforsch.», 1973, 28b, № 3—4, 120—124 (нем.; рез. англ.)

UOF₄ (I) и U¹⁸O¹⁸F₄ (II) получены гидролизом UF₆ в 0,1—0,2% р-ре H₂O или H₂O¹⁸ в жидкой HF. Измерены ИК (5000—200 см⁻¹) и КР-спектры I и II. Дано отнесение колебаний на основании изотопич. сдвигов и аналогии с др. оксифторидами урана. К вал. кол. UO в I отнесена ИК-полоса 893 см⁻¹; в II это колебание сдвигается до 841 см⁻¹. Вал. кол. UF лежат в области 700—380 см⁻¹. Для I получена диаграмма Дебая—Шерера и установлено отсутствие высокосимм. структуры. Результаты сравнены с соотв-щими данными по U₃O₅F₈.

Е. Разумова

X.1974 №6

UDF₄(2) McDowell R.S., Asprey L.B., 1973
3451

Дополнение J. Mol. Spectrosc., 1973, 48, p. 254
и.п.

90

UDF₄(2) и.п.



VO_2F_2
4489

1973
Taylor J.C., Wilson P.W.,

и.н.
Дорофеева

Acta crystallogr., 1973, B29,
p. 1073.

99

● VO_2F_2 и.н.

UOFy (2)
1289

Alexander L.E., Beattie I.R.,
Bukovszky A., Jones P.J.,
Marsden C.J., Van Schalkwyk G.J., 1974

u.n.
Doposrubi

J. Chem. Soc. Dalton Trans., 1974,
p. 81

130

UOFy (2) u.n.



VO₂F₂(z) 1974
4587 Van Leirsburg D.A., De Kock C.W.,

Dopropaba J. & Phys. Chem., 1974, 78, p.134

и.и.

VO₂F₂(z) и.и.

51 P

$\text{UO}_2\text{F}_3^{3-}$

B91-XVIII-979

1974

Cu. J. No. 1
J.

147520w Infrared absorption spectra of alkaline metal dioxopentafluorouranates. Nguyen Quy Dao; Knidiri, Mohammed (Inst. Chim., Ec. Cent. Arts Manuf.; Chatenay-Malabry, Fr.). *C. R. Hebd. Seances Acad. Sci., Ser. C* 1974, 279(26), 1145-S (Fr). The ir absorption spectra ($80-1200\text{ cm}^{-1}$) were recorded for $\text{M}_3\text{UO}_2\text{F}_5$ ($\text{M} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}, \text{NH}_4$). A normal coordinate anal. of the internal vibrations of $\text{UO}_2\text{F}_3^{3-}$ was carried out. Assignments were made, and splitting of the bands due to a crystal effect was discussed.

C.A. 1975. 82. N22

UO₂F₃³⁻

1974

1639u Raman laser spectra of alkali fluorouranates(VI). Nguyen Quy Dao; Knecht (Inst. Chim., Ec. Cent. Arts Manuf., Chatenay-Malabry, Fr.). C. R. Hebd. Seances Acad. Sci., Ser. B (1974), 19(5), 197-200 (Fr). The Raman spectra of M₃UO₂F₃ (M = K, Rb, Cs, NH₄) were recorded at 100-1000 cm⁻¹. The study of the polarized Raman spectrum of Cs₃UO₂F₃ allowed an exact assignment of the fundamental lines of the UO₂F₃³⁻ group in all of the compds. In Cs₃UO₂F₃ (statistically cubic structure), the UO₂F₃³⁻ ion (pentagonal bipyramid) can be considered as having perfect D_{3h} symmetry. In K₃UO₂F₃ and RbUO₂F₃, the effect of the crystal field resulted in a splitting of the doubling degenerate $\delta(U-O-F)$ deformation vibration (ν_{10} , E₁''). In (NH₄)₃UO₂F₃ (monoclinic structure), the ion is slightly distorted, probably as a result of F...H-N H bonding.

Copyright
Chem. Abstr.

C.A. 1974. 81 N24

UO_2F_2
1372

Bagnall K.W.; Wakerley M.W., 1975

и.н.
Дорофеева

J. Inorg. Nucl. Chem., 1975,
37, p. 329

86



VO_2F_2 и.н.

$UO_2F_2(2)$ Jasinski J.P., Holt S.L., Wood J.H.
2847 1975
Asprey L.B.,

Deposition J. Chem. Phys., 1975, 63 (2), p 757
u.n.

$UO_2F_2(2)$ u.n.

143

1693
 $VO_2F_2(2)$

Brown S.D., Gard G.L., Locher T.M.,
1976

Doposeda

J. Chem. Phys., 1976, 64, p. 1219

u.n.

$VO_2F_2(2)$ u.n.

135



$[UO_2F_5]^{3-}$

44-12683

1976

(vi)

84: 187034p Study of uranyl pentafluorides $M_3UO_2F_5$ ($M = K, Rb, Cs, NH_4$) by ir absorption and Raman scattering-spectrophotometry. II. Ir spectra. Nguyen Quy Dao; Knidiri, M. (Inst. Chim., Ec. Cent. Arts Manuf., Chatenay-Malabry, Fr.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1976, 32A(3), 481-6 (Fr). The ir spectra of the 4 title compds. at 140-4000 cm^{-1} were recorded and interpreted using factor group anal. The site symmetry of $[UO_2F_5]^{3-}$ is D_{3h} in the Cs compd. and C_2 in the K and Rb compds. Site and correlation splitting of the internal modes of the anion were discussed. The results agreed with Raman scattering data and confirmed the structural data obtained from x-ray diffraction studies of the monocrystals.

C.A. 1976, 84 N26

1976

 $UO_2F_5^{3-}$

11 Д162. Изучение соединений $M_3UO_2F_5$ ($M=K, Rb, Cs, NH_4$) при помощи спектрофотометрии инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния. III. Влияние катиона на колебательные частоты иона $UO_2F_5^{3-}$. Dao Nguyen Quy, Knidiri M. Etude des composés $M_3UO_2F_5$ ($M=K, Rb, Cs, NH_4$) par spectrophotometries d'absorption i. r. et de diffusion Raman. III. Effet du cation sur les fréquences de vibration de l'ion $UO_2F_5^{3-}$. «Spectrochim. acta», 1976, A32, № 5, 1113—1118 (франц.; рез. англ.)

Си-
сил. пост

Из 27 силовых постоянных иона $UO_2F_5^{3-}$ 17 приняты равными нулю. 10 силовых постоянных иона в каждой из молекул $M_3UO_2F_5$ ($M=K, Rb, Cs, NH_4$) вычислены по опытным значениям частот колебаний. Силовая постоянная связи $U-F$ убывает в ряду K, Rb, Cs, NH_4 , тогда как силовая постоянная связи $U-O$ убывает в ряду щелочных металлов, но принимает повышенное значение в случае NH_4 . Эти закономерности обусловлены вариацией электростатич. поля катиона. Для всех 4-х соединений получено полное согласие вычисленных и опытных частот колебаний, отнесенных к типам сим-

Ф. 1976
N 11

48-13584

метрии D_{5h} . Частоты симметричных и антисимметричных колебаний ураниловой группы находятся ниже прямолинейного графика, построенного для взаимной зависимости этих частот в 26 комплексах. Убывание их непосредственно указывает на повышение стабильности исследованных комплексов. Ч. II см. РЖФиз, 1976, 8Д519.
М. А. Ковнер

UO₂F₂

XIII-7213
number 5902

1977

интп.
снвп

86: 179890r Oxygen-18 isotope effects in the electronic spectrum of difluorodioxouranium. DePoorter, G. L.; Rofer-DePoorter, C. K. (Los Alamos Sci. Lab., Los Alamos, N. Mex.). *Inorg. Nucl. Chem. Lett.* 1977, 13(2), 101-3 (Eng). The substitution of ¹⁸O for ¹⁶O in UO₂F₂ produced marked changes in both positions and intensities of peaks in the electronic spectrum. In the 26,500-cm⁻¹ region the isotope effects show that the single peak in the ¹⁶O spectrum is actually 2 peaks close together. At 21,200 cm⁻¹, a comparison of the ¹⁶O and ¹⁸O spectra also indicates an addnl. peak. Both the ¹⁶O and ¹⁸O spectra show a very weak peak at ~19,700 cm⁻¹. The intensity of the U¹⁸O₂F₂ absorption is stronger than the U¹⁶O₂F₂ spectrum below 26,500 cm⁻¹. Coincidences in the positions of bands in the 2 spectra occur at max. of 20,100 cm⁻¹, 23,000 cm⁻¹, and 27,440 cm⁻¹.

C.A. 1977. 26 N24

UO₂F₂

XVIII - 7213
оттиски 5902

1977

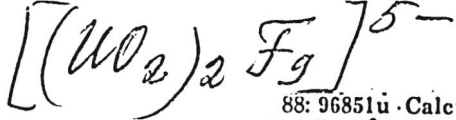
4 д333. Изотопические эффекты ¹⁸O в электронном спектре UO₂F₂. DePoorter G. L., Rofer-DePoorter C. K. Oxygen-18 isotope effects in the electronic spectrum of UO₂F₂. «Inorg. and Nucl. Chem. Lett.», 1977, 13, № 2, 101—103 (англ.)

Спектры растворов UO₂F₂ в метаноле исследованы в области 19 000—29 000 см⁻¹. Сопоставлены спектры UO₂F₂ с нормальным ¹⁶O и тяжелым ¹⁸O кислородом. Отмечены существенные различия в положении и интенсивности соответствующих электронных полос изотопич. молекул. (Интенсивности полос тяжелой молекулы больше при $\nu < 26\,500$ см⁻¹.) Рассмотрены причины неудачи с разложением спектра с перекрывающимися полосами на составляющие.

В. С. Иванов

спектры
растворов

ф. 14, 1978



1977

88: 96851u. Calculation of vibrations and study of optical spectra of a potassium uranyl fluoride $[\text{K}_3(\text{UO}_2)_2\text{F}_9]$ complex. Skutov, I. K.; Popov, V. G.; Umreiko, D. S.; Novitskii, G. G. (USSR). *Zh. Prikl. Spektrosk.* 1977, 27(6), 1033-7 (Russ). The frequencies and shapes of the normal vibrations were calcd. for $[(\text{UO}_2)_2\text{F}_9]^{5-}$ using a computer with automated calcn. of the symmetry properties. The luminescence (at 77 K), IR, and Raman spectra were recorded for the dimeric complex $\text{K}_3(\text{UO}_2)_2\text{F}_9$. A relation was established between the structural and spectral characteristics of $\text{K}_3(\text{UO}_2)_2\text{F}_9$.

суд, ноет,

Di

C.A. 1040.PP.N14

UOF₄(2)
2470 Iijima K.,

1977

Дорогуща

Bull. Chem. Soc. Japan 1977,

50, p. 373

и.н.

UOF₄(2) и.н.

136



UOF₄(2)
3245

1977

Levy J.H., Taylor J.C., Wilson P.W.,

Дополнительно

J. Inorg. Nucl. Chem., 1977, 39, p. 1989

и.н.

116

UOF₄(2) и.н.

UOF₄(2) Robiette A.G., Hedberg K., 1974
4022 Hedberg L.,

Doposiba J. Mol. Structure, 1977, 37,
p. 105
и.н.

UOF₄(2) и.н.

UOF₃
5042

Schimanouchi T.,

1977

Дополнительно
и.и.

J. Phys. ^{anal} Chem. Ref. Data, 1977,
6, 993.

87 Ф

UOF₃
и.и.



UOF_3
4916

Almenningen A., Samdal S., 1978
Christen D.,

Doposeder
u. n.

J. Mol. Structure, 1978, 48, 69.

150

UOF_3
u. n.



2

UO_2F_2

спектр
поглощ.

4 Д344. ^{18}O -изотопный эффект в электронном спектре молекулы UO_2F_2 . Ч. II. Влияние температуры. De Poorter G. L., Rofer-DePoorter C. K. Oxygen-18-isotope effects in the electronic spectrum of UO_2F_2 . II. Temperature effects. «Inorg. and Nucl. Chem. Lett.», 1978, 14, № 10, 333—335 (англ.)

В области $19\,000\text{--}20\,000\text{ см}^{-1}$ получены спектры поглощения $0,005\text{ M}$ раствора UO_2F_2 в этаноле при $t\text{-ре } 203^\circ\text{ K}$. Сравнение спектров спиртовых растворов $UO_2^{18}F_2$ и $UO_2^{16}F_2$, полученных при $t\text{-рах } 203$ и 293° K , показывает существенные различия в интенсивности и положении полос. Отмечено, что величина изотопич. эффекта оказалась неожиданно большой. Высказано предположение, что аномалия связана со значительным различием характера водородной связи между изотопами кислорода в рассматриваемой системе. См. Ч. I. De Poorter G. L., et al., «Inorg. Nucl. Chem. Letters», 1977, 13, 101.

ср. 1979, N4

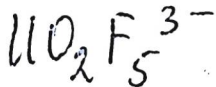
UOF₅⁻

1978

Fig. 1.1.1.1.

89: 156716m Synthesis and characterization of ammonium, potassium, rubidium, and cesium oxypentafluorouranates(VI). Joubert, Philippe; Bougon, Roland; Gaudreau, Bernard (Dep. Genie Isot., CEN Saclay, Gif-sur-Yvette, Fr.). *Can. J. Chem.* 1978, 56(14), 1874-80 (Fr). The oxopentafluorouranates(VI), MUOF₅, where M = NH₄, K, Rb, Cs, were prepd. from reaction of UOF₄ with the ammonium or the corresponding alkali metal fluoride in liq. SO₂. According to x-ray diffraction, Raman and IR spectroscopy, and from an isomorphism with the corresponding hexafluorouranates(V), MUF₆, 2 different environments around the U atom are obsd. In CsUOF₅ the 5 F atoms and the O atom around U result in a pseudo-octahedral structure, whereas for the other complexes (M = NH₄, K, Rb) each U is surrounded by 8 light atoms forming a dodecahedron. In this structure the dodecahedra are linked together by F atoms to form infinite chains. The UOF₅⁻ ion was characterized by vibrational spectroscopy in the solid state. The proposed assignment, which was made with the assumption of a C_{4v} symmetry of the UOF₅⁻ ion, was confirmed by a force const. calcn. From these data and contrary to the values reported for comparable oxopentafluoro anions, the axial F is less ionic than the equatorial ones.

C.A. 1978, 89, N18



1978

89:155031x Study of the vibrational spectra of sodium dioxopentafluorouranate(VI). Knidiri, Mohamed; Benarafa, Larbi (Dep. Chim., Fac. Sci., Rabat, Morocco). *C. R. Hebd. Seances Acad. Sci., Ser. C* 1978, 287(3), 55-8 (Fr). Vibrational spectra of $\text{Na}_3\text{UO}_2\text{F}_5$ were recorded in the region 1100-170 cm^{-1} . This compd. contains as do the other compds. of the series $\text{M}_3\text{UO}_2\text{F}_5$ ($\text{M} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}, \text{NH}_4$) the mononuclear ion $\text{UO}_2\text{F}_5^{3-}$ with the pentagonal bipyramid configuration. Calcn. of the force consts. of this ion showed that it has in the compd. $\text{Na}_3\text{UO}_2\text{F}_5$ more important cohesive forces than in the other homologous alkali compds.

Calc. not.
configuration

CA, 1978, 89N18

UO₂F₂
2047

1979
Denning R. G., Snellgrove T. R.,
Woodward D. R.,

u. n.
Dopceva

Mol. Phys., 1979, 37, p. 1109



UO₂F₂ u. n.

UDF₄(2)
3691

1979

Oberhammer H., Boggs J.E.,

Дополнение

J. Mol. Structure, 1979, 56, p. 107.

и.н.

UDF₄(2) и.н.

121



$UO_2F_2(2)$
1443

Beattie I.R., Marsden C.J., 1980
Ogden J.S.,

Dopospeba

J. Chem. Soc. Dalton Trans.,
1980, p. 535.

и.н.

129

$UO_2F_2(2)$ и.н.

UO₂F
4932

Boyd R.J., Gupta A., Langler R.F.,
Lownie S.P., Pincock J.A., 1980

Doposada
u.n.

Can. J. Chem., 1980, 58,
p. 331

148

UO₂F

u.n.



UOF₃
5008

Levason W., Ogden J.S., Rest A.J.,
1980

и.н.
Дополнительно

J. Chem. Soc. Dalton Trans.,
1980, p. 419.

149

UOF₃

и.н.



$UO_2F_5^{-3}$

ОТМЕТКА 12357 1981

4 Б226. Спектр люминесценции и электронное строение иона $UO_2F_5^{-3}$. Flint C. D., Tanner P. A. Luminescence spectra and electronic structure of the $UO_2F_5^{3-}$ ion. «Mol. Phys.», 1981, 43, № 4, 933—944 (англ.)

спектр, D_5 ,

В интервале т-р 85—4 К изучен и проанализирован спектр люминесценции (СЛ) пяти солей, содержащих ион $UO_2F_5^{-3}$ с идеализированной симметрией D_{5h} . При 85 К исследованы поляризац. спектры поглощения и СЛ $K_3UO_2F_5$. Дано отнесение четырем из шести возможных колебательным переходам, обусловленных внутренними движениями иона $UO_2F_5^{-3}$. Сделан вывод, что низшие возбужденные состояния этого иона имеют симметрию E_1'' и E_2' и возникают из конфигурации $\sigma_u \delta_u$. Конфигурация $\pi_u^3 \Phi_u$ должна была бы привести к состояниям E_1'' и E_1' и поэтому не может быть нижней возбужденной электронной конфигурацией. Отмечено, что СЛ соединений $M_3UO_2F_5$ во многих отношениях сильно отличаются от СЛ соединений $M_2UO_2Cl_4$.
Ю. Удачин

X. 1982, 19, N4.

UOF
4955

Endo Y., Saito S., Hirota E., ¹⁹⁸¹

и. н.
Допосредна

J. Chem. Phys., 1981, 74,
p. 1568.

146

UOF

и. н.:



UO_2F_2

4757

Wood J.H., Boring M., 1981
Woodruff S.B.,

u.n.

Dopospeeva

J. Chem. Phys., 1981, 74,
p. 5225.

66

● UO_2F_2 u.n.

UO₂F₂

Um. 17833

1982

Hildenbrand D. L.,

y;

1982 (расчётное сообще-
ние)

UOF

UOF₂

UO₂F

UO₂F₂

спектрон.
структура

DMMEX 15554

1982

Thibaut E., Boutique J.,
et al.

J. Amer. Chem. Soc.,

1982, 104, N20, 5266-
● - 5273.

$UO_2F_5^{3-}$

1983

18 Д164. Электронная структура галогенидных комплексов уранила с учетом внутренних орбиталей атома урана. Борковский Н. Б., Коврыков А. Б., Умрейко Д. С. «Докл. АН БССР», 1983, 27, № 3, 213—216 (рез. англ.)

В приближении Малликена — Вольфсберга — Гельмгольца рассчитана электронная структура комплексов $UO_2F_5^{3-}$, $UO_2Cl_4^{2-}$, $UO_2Br_4^{2-}$ с учетом $6p$ -орбиталей атома U. Показано, что первый электронный переход (запрещенный в электрическом дипольном приближении во всех рассмотренных случаях) представляет собой $f-f$ -переход в атоме U, сопровождающийся также переносом заряда с уранильных атомов кислорода на уран.

Резюме

Электрон.
структура

(+2) ~~17~~

90, 1983, 18, N 8

$UO_2F_5^{3-}$

1984

7 Б1031. Электронная структура комплексных соединений уранила с учетом внутренних орбиталей атома урана. Борковский Н. Б., Ковриков А. Б., Умрейко Д. С. «Координац. химия», 1984, 10, № 11, 1526—1530

Полуэмпирическим методом МО ЛКАО рассчитано электронное строение комплексных анионов $UO_2F_5^{3-}$, $UO_2Cl_4^{2-}$, $UO_2Br_4^{2-}$, $UO_2(NO_3)_3^{2-}$, $UO_2(CH_3COO)_3^-$. Параметры K_σ , K_π (в аппроксимации Вольфсберга-Гельмгольца), а также показатель степени экспоненты α_0 радиальной ф-ции атомов кислорода в группе уранила найдены из расчета электронной структуры $UO_2Cl_4^{2-}$, т. к. с этими параметрами воспроизведена эксперим. энергия 1-го оптич. перехода. Для всех комплексов рассчитаны энергии оптич. возбуждений, сопоставленные с эксперим. спектрами. На основании сопоставления теорет. и эксперим. данных для зависимости параметра α_0 от изменения межъядерного расстояния

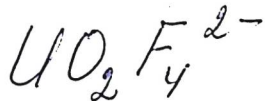
расчет
структуры

24

X. 1985, 19, № 7

$R(U-O)$ установлена линейная зависимость $\alpha_o = -2,4180R_{U-O} + 6,3697$. Анализ заселенностей МО в исследованных комплексах показал, что заселенность $6p-AO$ урана во всех случаях примерно одинакова и составляет 5,9 e. В ряду галогенидных анионов заряд атома U уменьшается при замещении экваториальных лигандов $F \rightarrow Cl \rightarrow Br$. Согласно расчетным данным электронное строение уранильной группировки UO_2^{2+} во всех рассмотренных анионах остается практически одинаковым, что и объясняет аналогию структуры спектров электронного поглощения и флуоресценции ураниловых соединений.

И. А. Тополь



1984

Dekock R.L., Baerends
Evert Jan, et al.

Электрон.
суперех.

Chem. Phys. Lett.,
1984, 105, N3, 308-

-316.

(св. UO_2^{2+} ; III)



Om. 1909A

1984

Flint C.D., Tanner P.A.,

korban.
cncmp

g. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1984, Pt 2,
80, N3, 219-226.

UOFy

1984

Gorokhov L.N., Pyatenko
A.T., et al.

Probl. Kalorim. Khim.
Ae; Termodin., Dokl. Vses. Konf.,
10th, 1984, 2, 466-8.

(cur. UO_2F_2 ; III)

1984
 $UO_2 F_2$ Gorokhov L. N., Pyatenko
A. T., et al.

Probl. Kalorim. Khim.
Ae; Termodin., Dokl. Vses. Korp.
10th, 1984, 2, 466-8.

●
(see. $UO_2 F_2$; III)

$UO_2F_5^{3-}$

[Vol. 19329]

1984

Tanner P. A.,

См. пост.
по Юри-
Брегал

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1984, Pt 2, 80,
N4, 365-373.

$[UO_2F_5]^{3-}$

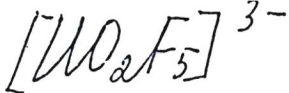
1985

7 Д98. Электронное строение иона $VO_2F_5^{3-}$ по данным ДВМ- X_α расчетов. Сергиенко В. И., Игнатьева Л. Н., Гуцев Г. Л., Болдырев А. И. «Ж. структур. химии», 1985, 26, № 1, 131—133

Проведен нерелятив. расчет электронной структуры комплексного иона $[UO_2F_5]^{3-}$ методом ДВМ- X_α в базисе численных хартри-Фоковских ф-ций основных состояний атомов U($5L$), O($3P$) и F($2P$), дополненным поляризационными слэтеровскими ф-циями 7p с экспонентой $\xi=3,0$. Определены значения заселенностей по Малликену АО отдельных атомов иона и эффективные заряды атомов.

расчет E,
электрон.
структуры

ср. 1985, 18, № 7



1985

102: 172859c Electronic structure of the pentafluorodioxo-
uranate(3-) ion according to data of DVM [discrete variational
method] X_α calculations. Sergienko, V. I.; Ignat'eva, L. N.;
Gutsev, G. L.; Boldyrev, A. I. (Inst. Khim., Vladivostok, USSR).
Zh. Strukt. Khim. 1985; 26(1), 131-3 (Russ). The electronic
structure of $[\text{UO}_2\text{F}_5]^{3-}$ was calcd. by the discrete-variational X_α
method by using a basis set of Hartree-Fock functions for ground-state
of U(^{15}L), O(^3P), and F(^2P) atoms and supplemented by polarized 7p
STO with exponent $\xi = 3.0$. The exchange parameter $\alpha = 0.730$,
 $R_{\text{U-F}} = 2.24 \text{ \AA}$, $R_{\text{U-O}} = 1.76 \text{ \AA}$, and D_{3h} symmetry group were used in
the calcn.

(meop. pacem)

C.A. 1985, 102, N 20

$UO_2F_5^{3-}$

1985

16 Б1034. Электронное строение иона $UO_2F_5^{3-}$ по данным ДВМ- X_α расчетов. Сергиенко В. И., Игнатьева Л. Н., Гуцев Г. Л., Болдырев А. И. «Ж. структур. химии», 1985, 26, № 1, 131—133

Методом ДВМ- X_α проведены расчеты электронной структуры иона $UO_2F_5^{3-}$ (I) в базисе численных хартри-фоковских функций основных состояний атомов $U(^5L)$, $O(^3P)$ и $F(^2P)$. Для улучшения описания координат. сферы базис дополняли поляризац. слейтеровскими функциями $7p$ с показателем экспоненты $\xi = 3,0$. Параметр α принимали равным 0,73. Длины связей $U-F$ и $U-O$ приняты равными стандартным значениям (2,24 и 1,76 Å). Из анализа структуры МО и анализа заселенности АО, принимающих участие в образовании валентной зоны I, сделан вывод о доминирующей роли $5f$ -орбиталей урана в связях с лигандами в экваториальной плоскости. $5f$ -АО урана акцептируют большую часть электронной плотности от атомов O и F , снижая эффективный заряд центрального атома.

Э. Герман

расчет
электронной
структуры

Х. 1985, 19, № 16

UO₂F₂

1985

Teterin Yu. A., Ryzhkov
M. V., et al.

meop.
paerim
st. locu.

Dokl. Akad. Nauk SSSR
1985, 284 (4), 915-20.

(cell. UO₂⁺²; III)

$W_2 F_4^{2-}$

DM. 23027

1986

Larsson S., Ryurkō P.,

Chem. Phys., 1986, 101,
N 3, 355-369.

орбитальн.
теор.
расчет

$UD_2F_6^{4-}$ (Om. 23027) 1986

Larsson Sven,
Pyykkö Pekka.

u.n. Chem. Phys., 1986, 101,
N3, 355-369.

(ser. XeFx (x=2, 4, 6); III)

$\text{UO}_2\text{F}_4^{2-}$

1990

Vi

113: 141338c Excitation and luminescence spectra of tetrafluorodioxouranate(2-) ($\text{UO}_2\text{F}_4^{2-}$). Tanner, Peter A. (Dep. Appl. Sci., City Polytech. Hong Kong, Kowloon Tong, Hong Kong). *Spectrochim. Acta, Part A* 1990, 46A(8), 1259-62 (Eng). The luminescence and excitation spectra of $[(\text{CH}_3)_4]_2\text{UO}_2\text{F}_4$, $\text{M}_3\text{UO}_2\text{F}_5$ (M = K and Rb) and $\text{Cs}_2\text{SnCl}_6:\text{UO}_2\text{Cl}_4^{2-}$ were recorded at temps. down to 10 K. The excitation spectrum of $[(\text{CH}_3)_4]_2\text{UO}_2\text{F}_4$ is unique because the electronic origin is located at the lowest energy reported for any uranyl compd. The anal. of the excitation spectrum is consistent with a D_{4h} , but not a D_{5h} coordinated uranyl chromophore. A detailed interpretation of the vibronic structure of the spectrum enables the lower excited states of the uranyl ion to be located, and the symmetries of these are consistent with the model of R. G. Denning, et al. (1987). A comparison with the excitation spectra of salts of the $\text{UO}_2\text{F}_3^{3-}$ anion was made.

C. A. 1990, 113, N16

$[UO_2F_4]^{2-}$

1999

Schreckenbach, Georg;
et al.,

теорет.
расчет
Vi,
состав

J. Comput. Chem. 1999,
20 (1), 70-90

(Calc. UO_2F_4 ; III)

UO₂F₂

2001

135: 324526p Structure and Spectra of UO₂F₂ and Its Hydrated Species. Wang, Qi; Pitzer, Russell M. (Department of Chemistry, The Ohio State University, Columbus, OH 43210 USA). *J. Phys. Chem. A* 2001, 105(36), 8370-8375 (Eng), American Chemical Society. The electronic spectra of UO₂F₂, both isolated and hydrated, were studied using ab initio spin-orbit CI calcns. based on relativistic effective core potentials. The structures of UO₂F₂ species were obtained by d. functional theory. The initial structure has a (nonplanar) C_{2v} geometry, while adding solvating H₂O mols. and optimizing the structure UO₂F₂·(H₂O)_n give a very stable structure for n = 4, with D₂ geometry. The ground state and some excited states were studied for UO₂F₂·(H₂O)_n using the structures obtained. Elec.-dipole transition moments were calcd. for UO₂F₂·(H₂O)₄. Spin-orbit and equatorial-ligand (F⁻, H₂O) interactions compete in detg. the splittings of the known ³Δ_g state of the uranyl ion, particularly the ³Δ_{1g} luminescent state.

meof. facit
CNEKMPA U
CMP - PR

C.A. 2001; 135, N22