

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

LaRh

Вар - 6002 - VIII

1973

§ Д166. Определение энергии диссоциации молекулы LaRh. Cocke D. L., Gingerich K. A., Gordis J. Determination of the high bond dissociation energy of the molecule LaRh. «High Temp. Sci.», 1973, 5, № 6, 474—481 (англ.)

(Do) С помощью ячейки Кнудсена исследованы равновесные реакции в газовой фазе: 1) $\text{LaRh} = \text{La} + \text{Rh}$; 2) $\text{LaRh} + \text{C} = \text{La} + \text{RhC}$. Определено изменение энтальпии в этих реакциях и найдена энергия D_0° диссоциации молекул LaRh: $D_0^\circ = 125,4 \pm 4$ ккал/моль. Это значение D_0° одно из самых больших для интерметаллич. соединений такого типа. Полученный результат интерпретируется в рамках различных эмпирич. моделей, описывающих связь атомов в молекулах. Б. Ф. Горднец

ф. 1974. № 8

(+) м.с.

LaRh

энергия
диссоц.

2.1974
N 17

17 Б997. Определение энергии диссоциации связи в молекуле LaRh. Cocke D. L., Gingerich K. A., Kordis J. Determination of the high bond dissociation energy of the molecule LaRh. «High Temp. Sci.», 1973, 5, № 6, 474—481 (англ.)

С использованием масс-спектрометра, снабженного эффузионной ячейкой Кнудсена, определена энергия диссоциации связи в молекуле LaRh. В интервале т-р 2150—2580° К исследованы равновесия $\text{LaRh (г.)} = \text{La (г.)} + \text{Rh (г.)}$ (1) и $\text{LaRh (г.)} + \text{C (г.)} = \text{La (г.)} + \text{RhC (г.)}$ (2). По 2-му закону для р-ции (1) ΔH°_{298} составила $126,0 \pm 3,5$ ккал. Эксперим. значения для р-ций (1) и (2) обработаны по 3-му закону термодинамики, с учетом двойной и тройной связи в молекуле LaRh. Полученные ср. значения ΔH°_{298} для р-ций составили или $129,3 \pm 0,8$ и $120 \pm 0,8$ для (1) и $-6,9 \pm 1,4$ и $-15,6 \pm 1,1$ ккал для (2). Из данных для р-ций (1) определена энергия диссоциации LaRh $D^\circ_{298} = 126,0 \pm 4,0$ $D^\circ_0 = 125,4 \pm 4,0$ ккал/моль. Это высокое значение соответствует данным для р-ции (2). Связь в молекуле LaRh является сложной с участием d-орбиталей. Станд. теплота образования ΔH° (обр. 298), для LaRh составила $109,2 \pm 4,2$ ккал/моль. По резюме

1973
VIII
B99-6002-VIII

1973

La	Ru	Масс-спектрометрическое доказатель-
La	Rh	ство высокой стабильности дихлорато-
La	Pd	ных соединений цинка с метал-
La	Os	лами платиновой группы и рас-
La	Ir	четные реакции диссоциации
La	Pt	некоторых интерметаллических
		дихлоратных соединений с
(Do)		краткими свечми. Gingrich
		Karl A. "J Chem Soc Faraday
Ф. 1974	№10	Trans" 1974, Part 2, 70, N 3, 471-476

Зак. № 6

(cu Ce Rh; III)

40530.1377

Ph, TC, Ch

Labs, Lakh, Lakh 1974
Lakh, Lakh, Lakh 29854
(50) 2163

Gingerich Karl A. - Mass spectrometric evidence for the very high stability of diatomic cerium compounds with some platinum metals and predicted dissociation energies of selected diatomic intermetallic compounds with multiple bonds.

"J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1974,
Part 2, 70, N 3, 471-476

La Rh

1978

Gingerich R.A.

Int. J. Quantum Chem.,
1978, Biol. Quantum Symp.,
n 12, 489-496

непринят
своего



(cur. Barh; 10)

Lahh(2) Gingerich R. A., 1979
Mass spectrometric determination of atomization energies of inorganic molecules and their correlation by empirical models of bonding.

No 10th Materials Research Symposium on Characterization of High temperature, Vapors and Gases.

NBS Special Publication 561

Volume 1, 1979, 289-302.
(у Търбуца).

LaIr
(газ)

(ΔH_f° ; ΔH_f)

бф. 8818 .

1979

- 7 Б806. Исследование термодинамич. стабильности LaIr (газ.) методом высокотемпературной масс-спектрометрии. Haque R., Pelino M., Gingerich K. A. Investigation of the thermodynamic stability of the molecule LaIr(g) by high temperature mass spectrometry. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 7, 2929—2933 (англ.)
В интервале т-р 2150—2830 К масс-спектрометрич. методом при изучении испарения в эффузионной ячейке идентифицировано образование LaIr в системе La—Ir—Au—C (тв.). Расчеты энтальпии газовой фазной р-ции

(71) (84/4)
⊗

х. 1980. № 4

$\text{LaIg} = \text{La} + \text{Ig}$ по 2- и 3-му законам дали след. рекомендованные значения для энергии диссоциации и теплоты образования LaIg : $D_0^\circ = 573 \pm 12$, $D_{298}^\circ = 576 \pm 12$, $\Delta H^\circ(\text{обр.}) = 524 \pm 20$ кДж/моль. По 2-му закону для 2449 K $D^\circ = 615,6 \pm 9,6$ кДж/моль. При расчетах по 3-му закону использованы термодинамич. функции газ. LaIg , рассчитанные статистич. методом. При 298, 2000 и 3000 K значения $-(G_T^\circ - H_0^\circ)/T$ составили 237,2, 305,0 и 319,7 Дж/моль·K, $H_T - H_{298}$ 10,1 73,6 и 110,9 кДж/моль. Хорошее согласие результатов полученных по 2- и 3-му законам, подтвердило справедливость проделанных расчетов и допущений. Для LaAu рекомендовано $D_0^\circ = 332,2 \pm 10$ кДж/моль. С использованием изоэлектронности пока не обнаруженной молекулы W_2 с LaIg оценена энергия диссоциации газ. W_2 $D_0^\circ = 535 \pm 40$ кДж/моль.

А. Б. Кисилевский

LaIr

оттиски 8818

1979

4 Д150. Исследование термодинамической стабильности молекулы LaIr (в газовой фазе) методом высокотемпературной масс-спектрометрии. Investigation of the thermodynamic stability of the molecule LaIr(g) by high temperature mass spectrometry. Haque R., Pelino M., Gingerich K. A. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 7, 2929—2933 (англ.)

В эффузионной струе из высокотемпературной ячейки Кнудсена, содержащей систему La—Ir—Au—C, масс-спектрометрич. способом обнаружена молекула LaIr. Измерение энтальпии реакции $\text{LaIr} = \text{La} + \text{Ir}$ (в газовой фазе) в соответствии с третьим и вторым термодинамич. законами позволило получить энергию диссоциации $D_0^0 = 573 \pm 12$, теплоту образования $\Delta H_{f, 298} = -524 \pm 20$ для LaIr, а также оценить энергию диссоциации $W_2: 535 \pm 40$, где все величины в кДж/моль. Г. А.

D_0^0 ΔH_f

ф. 1980 № 4

1979

La Rh

Gingerich K. A.

Heptene
analog.

U. S. Dep. Commer. Nat.
Bur. Stand. Spec. Publ.
1979, N561/1, 289-290

●
Cu Ti N ; ^{III}

1980

6905

— IIIAX

LaRhO_3
 Rh_2O_3

Иссл.
пост.

☒

(H)

Х 1980 № 13

13 Б182. Исследование колебательных спектров окислов LaRhO_3 и Rh_2O_3 . Кочергина Л. Л., Фомин-чев В. В., Кондратов О. И., Шаплыгин И. С., Петров К. И. «Ж. неорган. химии», 1980, 25, № 3, 646—653

Исследованы колебательные спектры крист. LaRhO_3 и Rh_2O_3 . Предложено отнесение частот колебаний исследованных соединений. Проведен теоретич. расчет колебательных спектров в полимерном приближении для двух структурно-неэквивалентных направлений. Результаты расчета, удовлетворительно согласующиеся с экспериментом, позволяют оценить силовое поле кристаллов. Анализ смещений атомов и характера частотных ветвей позволил выявить основные особенности колебаний рассматриваемых соединений. Резюме

1980

LaRhO₃PrRhO₃GdRhO₃LuRhO₃
(TB)сущ. н. в. е. т.;
н. к. сущ. н. в. е. т.
е. т. н. в. е. т.

Vi

(+3) $\boxtimes$ 

93: 140379a Vibrational spectra of characteristics of the structure of lanthanide rhodium oxide [LnRhO₃ (Ln = lanthanum, praseodymium, gadolinium, lutetium)] and rhodium(III) oxide of perovskite-like type. Kochergina, L. L.; Fomichev, V. V.; Kondratov, O. I.; Shaplygin, I. S.; Petrov, K. I. (Mosk. Inst. Tonkoi Khim. Tekhnol., Moscow, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1980, 25(8), 2082-8 (Russ). The nature of the IR spectra of LnRhO₃ (Ln = La, Pr, Gd, Lu) changes in relation to the degree of orthorhombic distortion of the crystal lattice of the perovskite-type compds. The spectra were treated theor. according to the method of polymeric chains in a valence-force field approxn. The force consts. were calcd. for LnRhO₃ (Ln = Pr, Gd, Lu). For vibrations at frequencies >450 cm⁻¹, the Ln³⁺ ion does not shift; the vibrations are caused by movement of the O ions of the RhO₆ octahedra.

C.A. 1980, 93, N14.

LaPt

15 Б876. Энергия диссоциации и стандартная теплота образования газообразного LaPt. Nappi B. M., Gingerich K. A. Dissociation energy and standard

heat of formation of gaseous LaPt. «Inorg. Chem.», 1981, 20, № 2, 522—524 (англ.)

Образование LaPt (I) в газовой фазе над системой Pt—La—графит наблюдалось при исследовании ее испарения в интервале 1959—2466 К. методом Кнудсена в сочетании с масс-спектрометром. При средн. т-рах опытов (2339 и 2130 К) для газофазной р-ции $I = La + Pt$ найдено $\Delta H^\circ_T = 514,4 \pm 15,4$ и $533,9 \pm 18,5$ кДж/моль, $\Delta S^\circ_T = 119,4 \pm 6,6$ и $124,6 \pm 8,6$ Дж/моль·К. На основании обработки полученных данных по 2- и 3-му законам для этой р-ции рекомендовано ΔH°_0 (или D°_0) = $496 \pm$

Do; (4 Hf)
(m.g. sp.)

(+2) ☒

оттиск 11396

22.1981.А/15

± 21 кДж/моль. Для станд. энтальпии образования газ. I получено $\Delta H^\circ_{298} = 497 \pm 21$ кДж/моль. Использованные для расчета термодинамич. функции газ. I рассчитаны статистич. методом из оцененных молек. параметров и табулированы в интервале 2000—2600 К с шагом 100 К. При 298,15, 2000 и 2600 К значения $-(G^\circ_T - H^\circ_0)/T$ равны 247,87, 314,91 и 324,53 Дж/моль·К; $H^\circ_T - H^\circ_0$ соотв. 9,845, 73,207 и 95,643 кДж/моль. На основании сравнения значений D°_0 платинидов РЗЭ обсуждается характер связи в I.

А. Б. Кисилевский

LaRu²⁺

(OM. 32879)

1989

muonem.
pacem
chese

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

Chem. Phys. Lett.,
1989, 161, N4/5, 383-387.

Theoretical
bonding in

● study of the
LaFe²⁺, LaRu²⁺

and γ_{Ru}^{2+} .

$\text{LaRuO}_3(k)$

1990

Malika C., Sreedharan
D.M.

(46f) 7. Less-Common Me-
tals, 1990: 162, N1. C.

57- ● 60.

(Cer. $\text{RuO}_2(k)$; $\tilde{I}$)

YIrC
YIrC₂

1996

смыкнута
и мепноу-
сб-па,
меп-пану

125: 42229m Electronic structure and thermodynamic properties of YIrC and YIrC₂. Roszak, S.; Balasubramanian, K. (Department of Chemistry and Biochemistry, Arizona State University, Tempe, Arizona 85287-1604, USA). *Chem. Phys. Lett.* 1996, 254(3,4), 274-280 (Eng). Ab-initio calcns., including Moeller-Plesset second-order perturbation (MP2), d.-functional theory (DFT), complete active space SCF (CAS-SCF) and multireference singles and doubles CI (MRSD-CI) computations, are carried out for the YIrC and YIrC₂ mols. Several alternative structures are optimized and the vibrational frequencies are computed. Thermodyn. properties such as the Gibbs energy functions and heat content functions are computed and compared with the available exptl. data. The nature of chem. bonding in these mols. is analyzed.

C.A. 1996, 125, ~4