

Nic

NiC

Р.М. 16709

1982

9 Д102. Электронная структура карбида никеля.
The electronic structure of nickel carbide. Kitauga
Kazuo, Morokuma Keiji, Csizmadia I. G. «J.
Mol. Struct.», 1982, 88, № 1—2, Suppl.: «Theochem», 5,
№ 1—2, 119—125 (англ.)

Проведено исследование строения молекулы NiC в
рамках метода обобщенных валентных связей (ОВС).
Проводились также ССП-расчеты, с использованием
матрицы плотности, полученной в рамках ОВС-метода
в качестве начального приближения. Найдено, что мо-
лекула обладает замкнутой электронной оболочкой, Ni

расчет
М.П., До

оп. 1983, 18, № 9

и С соединены тройной связью ($r_e = 1,805 \text{ \AA}$). Связь $\text{Ni} \equiv \text{C}$ сильно поляризована, заряд на Ni +0,56. Энергия диссоциации D_0 , полученная в рамках ОВС-метода, составляет 23 ккал/моль. Фундаментальная колебательная частота $\omega_e = 1219,3 \text{ см}^{-1}$, что хорошо согласуется с оценкой этой величины (1123 см^{-1}) на основе $\omega_e(\text{P}+\text{C})$.

В. А. Куликов

NiC

Отм. 16709

1982

16 Б26. Электронное строение карбида никеля. The electronic structure of nickel carbide. Kitaura Kazuo, Morokuma Keiji, Csizmadia I. G. «J. Mol. Struct.», 1982, 88, № 1—2, Suppl.: «Theochem», 5, № 1—2, 119—125 (англ.)

Методами ССП МО ЛКАО и обобщенных валентных схем (ОВС) рассчитаны электронное строение и потенциальные кривые основного состояния молекулы NiC. В расчетах использовался базис сгруппированных гауссовых ф-ций, двухэкспонентный для основных и трехэкспонентный для валентных АО. Установлено, что NiC в основном состоянии характеризуется полностью заполненной электронной оболочкой с формально тройной связью и 2 неподеленными парами ($:Ni \equiv C:$). Вычисленные методом ОВС спектроскопич. постоянные NiC составили: равновесное межъядерное расстояние $R_e = 1,805$ А, полная энергия $E = -1544,093$ ат. ед., энергия диссоциации $D_e = 23$ ккал/моль и частота коле-

расчет М.П.,
Д.О.

Х. 1983, 19, №16

баний $\omega_e = 1219 \text{ см}^{-1}$. Соотв. спектроскопич. постоянные, рассчитанные методом ССП МО ЛКАО, составили: $R_e = 1,673 \text{ \AA}$, $E = -1543,919 \text{ ат. ед.}$, $\omega_e = 1512,2 \text{ см}^{-1}$. Связь в NiC является существенно полярной. Сделан вывод, что NiC может вступать в р-ции, типичные для карбенов. И. А. Тополь

NiC

1987

Shim Irene.

Understanding Mol.

re, De,
ab-initio
pacem.

Prop., Symp. 1986 (Pub.
1987), 555-83.

(cer. PdC; III)

1988
NiC Gingerich Kare A.,
Kingcade J. E., Jr.

ab initio High Temp. - High Pres-
sure, Surf 1988, 20(1),
XCV. 35-45.

CV 236.

(Cu. NiFe_2 ; III)

NiC

[Om. 29979]

1988

meopem.
pacrem
Do, 2e
Panas I., Schiile J.,
et al.,
J. Phys. Chem., 1988,
92, N 11, 3079-3086

NiC

1989

/111: 201964b The nickel-Group IVA molecules nickel carbide, nickel silicide, and nickel-germanium (NiC, NiSi, and NiGe). Shim, I.; Gingerich, K. A. (Chem. Dep. B, Tech. Univ. Denmark, Lyngby, DK-2800 Den.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1989, 12(1-4), 373-6 (Eng). All-electron ab initio calcs. have been applied to elucidate the electronic states and the nature of the chem. bonds in the mols. NiC, NiSi, and NiGe. The ground states of all three mols. are $^1\Sigma^+$, but due to the open 3d shell of the Ni atom the mols. have many low-lying electronic states. The NiC mol. is strongly polar, and the low-lying electronic states are those arising when the angular momenta of the 3F_g Ni⁺ ion are coupled to the angular momenta of the 4S_u C-anion. The chem. bond in the NiC mol. has triple bond character due to the valence bond couplings between the Ni 4s and 3d π electrons and the C 2p electrons. The chem. bonds in the mols. NiSi and NiGe are very much alike; they are double bonds composed of one σ and one π bond. The σ bond is due to the doubly occupied delocalized MO composed of the Ni 4s orbital and the Si 3p σ or the Ge 4p σ orbital. The π bond originates from the valence bond coupling between the localized hole in the Ni 3d π orbital and the valence p π electron of Si or Ge.

расчет спектров,
спектр, теория
составление



(+2)

C.A. 1989, 111, N 22

NiC

1989

✓ 6 Б1033. Молекулы никеля с атомами элементов IV-й группы: NiC, NiSi и NiGe. The nickel-group IV molecules NiC, NiSi, and NiGe: [Pap.] 4th Int. Meet. Small Particles and Inorg. Clusters, Aix-en-Provence, 5—9 July, 1988 / Shim I., Gingerich K. A. // Z. Phys. D.— 1989.— 12, № 1—4.— С. 373—376.— Англ.

Неэмпирич. методами Хартри—Фока и конфигурац. взаимодействия рассчитана электронная структура молекул NiC, NiSi и NiGe. Прослежена корреляция между электронными состояниями атома Ni и состояниями двухатомных систем и определены вертикальные энергии возбуждения двухатомных молекул. Результаты большей частью сформулированы на качеств. уровне и касаются участия 4s- и 3d-электронов Ni в образовании связи.

А. В. Немухин

электрон.
структура

(42) ☒

X.1990, № 6

NiC

[Om. 32295]

1989

неизучен.
Электрон-
состояние,
ab initio
расчет

Shim I., Gingerich L.A.,

Z- Phys. D. Atoms. Mo-
lecules and Clusters,
1989, 1224-1 — 1224-4.

The nickel- ● group II mole-

cules Nil, Nili and Nibe

NiC

Abstract

1999

130: 357337c All-electron ab initio investigations of the electronic states of the NiC molecule. Shim, Irene; Gingerich, Karl A. (Department of Applied Chemistry, The Technical University of Denmark, Lyngby, DK 2800 Den.). *Chem. Phys. Lett.* 1999, 303(1,2), 87-95 (Eng), Elsevier Science B.V.. The low-lying electronic states of NiC are investigated by all-electron ab initio multi-configuration self-consistent-field (CASSCF) calcns. including relativistic corrections. The electronic structure of NiC is interpreted as perturbed antiferromagnetic couplings of the localized angular momenta of 4F_g Ni $^+$ and 4S_u C $^-$. The predicted ground state, $^1\Sigma^+$, is well sepd. from the dense manifold of excited states by an energy gap of 6465 cm^{-1} . Multi-ref. configuration-interaction (MRCI) calcns. result in $r_e=1.621\text{ \AA}$ and $\omega_e=874\text{ cm}^{-1}$ agreeing well with new exptl. data by Brugh and Morse. D_e is detd. as 2.76 eV, and D_0 as 2.70 eV.

mechem.
pchem
K. A. Shim
K. A. Shim
M. C. C. M. A. L. Y.
 X^{15+}

C. A., 1999, 130, N26

NiC

[Am. 41590]

2002

Dale G. Brueh et al.,

U.N. J. Chem. Phys., 2002, 117,
N23, 10703 - 10714.

Resonant two-photon
ionization • spectroscopy of NiC

NiC

[Om. 41288]

2001

Antonio Carlos Borin,

u.h.

Chem. Phys. 2001,

274, 99-108.

The $A^{17-}X^{12+}$ transition
in NiC.