

U-C

UO₂CO₃ (r_{xy})

1955

Christ C.L., Clark J.R., Evans H.T.,
Science, 1955, 121, N. 3144, 472-473

Crystal structure of rutherfordine UO₂CO₃.

Есть ф. н.

РЖХ, 1956, N 1, 188

Или.

VIII 3140

1987

$UO_2 F_2$, $UO_2 Br_2$, $UO_2 SO_4$,

$UO_2 (C_2 H_3 O_2)_2$ (energetic)

Pant D.D., Pandey B.C.,

J. Scient. and Industr. Res.,

1957, BC 16, N7, 8280-8285

Prak., 1958, N8, 23857

10

ГОТЪ В. Н.

VIII 1876

1959

LaC_2 , La_2C_3 , UC_2 , CaC_2 (re)

Atoji M., Medrud R.C.,

J. Chem. Phys., 1959, 31, 332-337

Me

Purex, 1960, 33829



VIII 1674

1959

UO_2CO_3 , CsUO_2Cl_4 , $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$
(44-0)

Jones L.H.,

Spectrochim. acta, 1959, n 6, 409-411

Prék; 1960, n 6, 46268

10

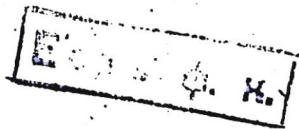
VIII 1957
1960

We \int $(\text{UO}_2(\text{C}_2\text{O}_4), (\text{UO}_2)_3(\text{PO}_4)_2$

Narasimham K.V.,

Indian J. Phys., 1960, 34, N 7, 321-330

Infrared spectra of uranyl phosphate
oxalate and salicylate in the solid state



РосХим, 1962, 13695

10

VIII 1875

1961

TaC₂, CeC₂, TbC₂, ZrC₂, UC₂, YC₂, YbC₂, CaC₂
(2c)

Ataji M.,
J. Chem. Phys., 1961; 35, v6, 1950-1960

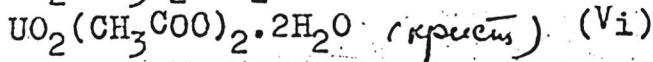
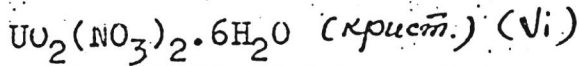
Mu

РЖХ, 1962, 185184

есть опра

VIII 1958

1962



Narasimham K.V.,

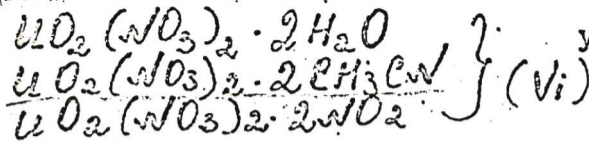
J. Scient. and Industr. Res., 1962, B21, N 10,
468-473.

Absorption spectra of uranyl acetate and
nitrate

леть опра

PM Paz 1963, 11D407

10



УШ2713

1962

Вдовенко А.М., Суглобов Д.И., Красильников
В.А.,

В сб. " Физ. Пробл. спектроскопии "
т. I, АН СССР, 1962, 420-422

И-к.-спектры комплексных соединений
нитрата уранила

1962

UC₂

срyчyрa

Neutron diffraction studies of higher carbides of heavy metals. Masao Atoji (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Phys. Soc. Japan* 17. Suppl. B-II, 395-7(1962). The neutron diffraction and paramagnetic scattering analyses of the CaC₂-type carbides (CaC₂, YC₂, LaC₂, CeC₂, TbC₂, YbC₂, LuC₂.UC₂) and the Pu₂C₃-type carbides (La₂C₃, Ce₂C₃, Pr₂C₃, Tb₂C₃) show strong correlations between the interat. distances and the metal valency. These correlations and the vanishing Knight shift of YC₂ are reasonably consistent with the following postulates: The conduction band wave functions of MC₂ are composed only of the metal *d*-orbitals and the C₂-π_g2*p* antibonding orbitals. The C₂-π_g2*p* contribution to the conduction band is smaller in M₂C₃ than in MC₂. The conduction band of M₂C₃ is also assocd. with the metal *s*-orbital.

CA

(+3)

C.A. 1963-58-3

1978 gh



B9 - VIII - 2320

1963

UC

U₂C₃

UC₂

Interatomic distances in U carbides. Brahama D. Sharma (Univ. of Southern California, Los Angeles). *Acta Cryst.* 16, Pt. 4, 322-3(1963)(in English); cf. Austin, CA 53, 7711f. Alternative calcd. values of bond nos. assocd. with observed interat. distances and of valences of U and C in UC, U₂C₃, and UC₂ are reported.

Chelsey L. Brock

C.A. 1963. 59. 13

14674 f

UCx.
Zuc

B9-VIII-2320

1963

19996 INTERATOMIC DISTANCES IN URANIUM CARBIDES. Brahma and D. Sharma (Univ. of Southern California, Los Angeles). Acta Cryst., 16: 322-3(Apr. 10, 1963).

The calculation of bond numbers associated with each interatomic distance observed, and the valences of both uranium and carbon in UC, U₂C₃, and UC₂, is presented. The calculations were made using two values of R₁(U), namely, 1.421 and 1.45 Å. The valence of U found was well below the expected value of 6.0 in all three carbides. The valence of U in UC and U₂C₃ was 3 and that for UC₂ was nearly 4. Data are tabulated. (P.C.H.)

NSA-1963-17-19

$\text{UO}_2(\text{NCS})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, $\text{NH}_4\text{UO}_2(\text{NCS})_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$,
 $(\text{NH}_4)_4\text{UO}_2(\text{NCS})_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $(\text{NH}_4)_3\text{UO}_2(\text{NCS})_5 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$,
 $\text{Rb}_4\text{U}(\text{NCS})_8$, $\text{Cs}_4\text{U}(\text{NCS})_8 \cdot \text{H}_2\text{O}$; $\text{KUO}_2(\text{NCS})_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$,
 $\text{RbUO}_2(\text{NCS})_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $(\text{NH}_4)_3\text{Cs}_3(\text{UO}_2)_2(\text{NCS})_{10}$,
 $\text{Cs}_3\text{UO}_2(\text{NCS})_5$, $\text{K}_3\text{UO}_2(\text{NCS})_5 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$,
 $\text{BaUO}_2(\text{NCS})_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ крист. (Di)

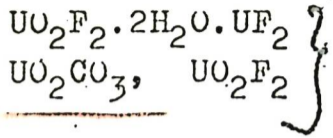
Харитонов Ю.Я., Шульгина И.М.,
 Трапезни Е.Н., Бабаева А.В.,
 Ж. неорган. химии, 1963, 8, 767-768

РЖХ, 1964, 15109

Б есть оригинал

VIII 1585 / 1963

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



24-0, амаловое вещество,

Hoekstra H.R.,

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

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

NOTY

Росхим., 1964; 17Б 119

Ю, М/А

VIII 1956

1963

$\text{UO}_2\text{HPO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (Wi)

$\text{UO}_2 \cdot \text{C}_2\text{O}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (Wi)

Narasimham K.V.,

J. Molec. Spectrosc., 1963, 11, N 2, 128-138

Electronic absorption spectra of uranyl
phosphate and oxalate

Pac Paz,

1964, 4D200

10

УС_x

2 Б184. Межатомные расстояния в карбидах урана. Sharma Braham D. Interatomic distances in uranium carbides. «Acta crystallogr.», 1963, 16, № 4, 322—323 (англ.)

На основе эксперим. данных, полученных ранее (РЖХим, I 1959, № 15, 52475), проведен расчет межатомных расстояний и валентностей (Σn) обоих компонентов в карбидах урана: UC (I), U_2C_3 (II) и UC_2 (III). Найдено, что Σn урана для всех трех карбидов существенно ниже шести, а валентность С в I равна 2. Межатомные расстояния (в Å) и сила связи (в единицах валентности n) для I равны: C—12C 3,51; 0,0005; C—6U 2,48; 0,33; U—12U 3,51; 0,08; U—6C 2,48; 0,33; $\Sigma n(C) = 1,99$; $\Sigma n(U) = 2,94$. Для II C—C 1,294; 2,59; C—2U 2,46; 0,36; C—2U 2,59; 0,22; C—2U 2,76; 0,11; U—3U 3,34; 0,15; U—3C 2,46; 0,36; U—3C 2,59; 0,22; U—3C 2,76; 0,11; U—6U 3,68; 0,04; U—2U 3,50; 0,08; $\Sigma n(C) 3,97$; $\Sigma n(U) 2,92$. Для III C—C 1,34; 2,17; C—U 2,320; 0,61; C—4U 2,57; 0,24; U—4U 3,51; 0,08; U—2C 2,320; 0,61; U—8C 2,57; 0,24; U—8U 3,89; 0,018; $\Sigma n(C) 3,74$; $\Sigma n(U) 3,50$. Необычно значение $\Sigma n(C) \approx 2$ в I объяснено

Структура

1963

МФХ - 2220
ВФ - VIII - III - 169

Сел.

МФХ.

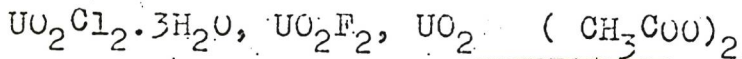
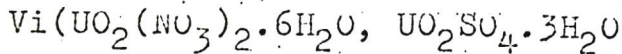
X. 1964-2

распределением двух $2p$ -электронов атома С по 6 подуровням с образованием 6 связей С—U с величиной $1/3$. Предполагается, что третий электрон, соответствующий валентности $\Sigma n(U)=3$, находится в свободном состоянии и определяет электропроводность I. Валентность U в II и III и электрич. свойства этих карбидов объясняются с точки зрения гипотезы, высказанной ранее для LaC_2 и La_2C_3 (РЖХим, 1959, № 21, 69855).

А. Воронков

дста
ния

1964



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

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

Infrared spectra of uranyl salts

1964 opus.

Pack. 1964. 12D271

HO

1964

U (OC₂H₅)₆

Bp-5288-V

Bradley P.C.

Westlake A.H.

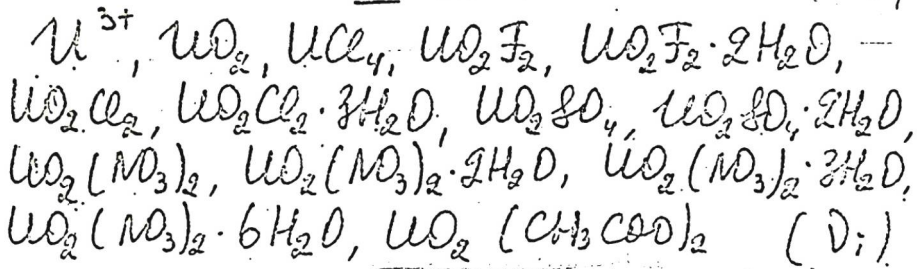
Ji; cip-pa

Proc. Sympos Koordinat
Chem., Tihany Hungary
1964, Budapest

1965, 309-315

VIII 2107

1964



Jeżowska-Trzebiatowska B., Barteci A.,
Buxietyńska K., Karkołowicz W., Kedzia B.,
Proc. Sympos. Coordinat. Chem. Tihany,
Hungary 1964, Budapest, 1965, 95-105

10

лет 92 K

V 5288

1965

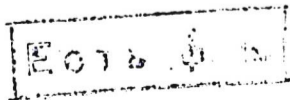
Vi, stryktyra $(Al(OC_2H_5)_3; M(OC_2H_5)_4;$
 $(M=Ti, Zr, Hf); Nb(OC_2H_5)_5; Ta(OC_2H_5)_5;$
 ~~$U(OC_2H_5)_5;$~~ $U(OC_2H_5)_6.$

Bradley D.C., Westlake A.H.

Proc. Sympos. Coordinat. Chem., Tihany, Hungary
"1964" Budapest, 1965, 309-15. Discuss, 315.
Infrared studies on polymeric metal ethoxides.

PJX., 1966, 165155

10



J

UC

1965

12. Hydrolysis of U monocarbide at high temps. (Besson)

C.A. - 1965: 63-6
6346a

$\text{UO}_2(\text{CH}_3\text{COO})_2$ BP-2107-VIII 1965

Jezowska - Trzebiatowska
B, et al,

(Vi)

Proc. Symp. Coordinat.
Chem. Tihany, Hungary
1964, Budapest, 1965, 95-105

Di: $(KWO_2(NO_3)_3)$; $(RbWO_2(NO_3)_3)$, 39- VIII 36
 $(CsWO_2(NO_3)_3)$; $(NH_4WO_2(NO_3)_3)$; 1967
 $(C_2H_5)_4WO_2(NO_3)_3$

Bullock J.J.,

J. Inorg. and Nucl. Chem., 1967, 29

19, 2257-64

Infrared spectra of some vanadyl
nitrate complexes.

PX 1968

45219

20

set
open.

$W_2O_3 \cdot 3(CH_3)_2SO$
 $W_2O_3 \cdot 4.5(CH_3)_2SO$ (Di, cw. VIII-124¹⁹⁶⁶
wet)

Raufmann G., Leroy M. J. F.,
Bull. Soc. Chim. France, 1966,
N 12, 3770-74

PX 1968

20.

UC

I967

Pattoret A., et. al.

Bull. Soc. Fr. Ceram., No. 77, 75

A mass-spectrometric study of the
evaporation of the ceramics UO_2
and UC.



VIII 754

1967

Сом урана (Vi); $C_3H_7B_2O_6$, $C_3H_7Cl_6$,
 $[(C_2H_5)_4N]_2HCl_6$.

Staßsudd O. M.,
dissert. Abstr., 1967, B28 (3), 1127.

CA, 1968, 68, n 10, 44419b.

Ю.

4

1967

$Cs_2U_2O_7$; Cs_2UCl_6 , } vi
 $[(CH_3)_4N]_2 UCl_6$ Summary. VIII 226
 v

Staff Sudd O. H.,

U.S. At. Energy Comm. 1967,

UCLA - 34P103-3, Avail Dep.,

CFSTS, 85 pp

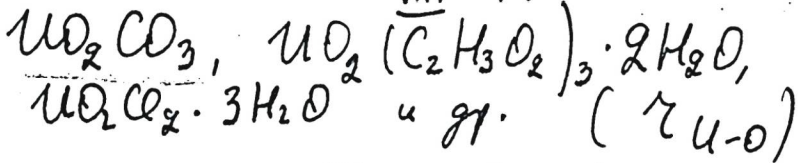
Hen b b-re

ca 1968

10

1968

VIII-740



Ohwada K.,

Spectrochim. acta, 1968, A24, N5, 595-599



HO

E. I. O. P. K.

UC

VIII - 346

1968

(76)

Vozzella P.A.;

Miller A.D.;

De Crescente M.A.;

J. Chem. Phys; 1968, 49,

N2, 876

1969

9 Д176. Масс-спектрометрическая идентификация молекул UC и CeC и предсказание стабильности двух атомных карбидов электроположительных переходных металлов. Gingerich Karl A. Mass-spectrometric evidence for the molecules UC and CeC and predicted stability of diatomic carbides of electropositive transition metals. «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 5, 2255—2256 (англ.)

С помощью эффузионной ячейки Кнудсена исследовано равновесие паров $MC_2 + M = 2MC$ ($M=U, Ce$) (1). Для U при T -рах $2500-2800^\circ K$ и энергии электронов $E=25$ эв отношение ионных токов равнялось $UC_2^+/UC^+ = 5 \div 30$, $U^+/UC_2^+ = (2 \div 10) \cdot 10^3$, причем вклада в ток UC^+ осколочных ионов из UC_2 не обнаружено. Потенциалы ионизации (ПИ) UC₂ $5,7 \pm 0,5$ эв, UC $6,1 \pm 0,5$ эв. Молекулярные ионы CeC^+ обнаружены при T -ре $> 2200^\circ K$ (ПИ = $7,5 \pm 1,0$ эв); при $2280^\circ K$ и $E=12,5$ эв отношение

UC

91-090-250-16

Р.

91-11-117-169

940

См. т. 11

+12

ф. 1969. 92

☒

токов $C^+ : CeC_2^+ : CeC^+ = 1 \cdot 10^5 : 3 \cdot 10^2 : 1$. Найдены теплоты реакции (1) для U $\Delta H_{298}^\circ = 83 \pm 0,5$ ккал/моль, для Ce $\Delta H_0^\circ = 89,7 \pm 1,5$ ккал/моль и энергии диссоциации молекул MC $D_0^\circ (UC) = 110 \pm 7$ ккал/моль, $D_0^\circ (CeC) = 108 \pm 7$ ккал/моль. Вычислены значения D_{298}° для двухатомных карбидов ряда электроположительных переходных металлов: 116 (ThC), 89 (PuC), 98 (CeC), 113 (TiC), 126 (ZrC), 130 (HfC), 111 (Vc). В. Ю. Орлов

ВФ - VIII - 2016

1969

UC (D₂)

UC₂

Kp, 5

III

ж. 1969

2.1

21 Б79. Масс-спектрометрическое доказательство существования молекул UC и CeC и оценка устойчивости двухатомных карбидов электроположительных переходных металлов. Gingerich Karl A. Mass-spectrometric evidence for the molecules UC and CeC and predicted stability of diatomic carbides of electropositive transition metals. «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 5, 2255—2256 (англ.)

Изучено независящее от давления хим. равновесие MC_2 (газ) + M (газ) = $2MC$ (газ) (1), где M=U, Ce. При т-рах 2500—2800° К наблюдалось образование иона UC⁺.

+1969



Оттиск 840

Определены потенциалы появления ионов UC^+ и UC_2^+ ($6,1 \pm 0,5$, $5,7 \pm 0,5$ эв соотв.). Образование иона CeC^+ наблюдалось ниже $2200^\circ K$. Оно приписано исключительно фрагментации молекулы CeO_2 (потенциал появления $CeC^+ \sim 14$ эв). При более высоких т-рах наблюдалось образование CeC^+ при потенциале появления $7,5 \pm 1,0$ эв. Определены изменение энтальпии р-ции $1 \Delta H_{298}^0 = 83,5 \pm \pm 0,5$ ккал/моль ($M=U$) и $\Delta H_0^0 = 89,7 \pm 1,5$ ккал/моль ($M=Ce$) и энергии диссоциации двухатомных молекул $D_{298}^0(UC) = 111 \pm 7$ ккал/моль, $D_0^0(UC) = 110 \pm 7$ ккал/моль, $D_0^0(CeC) = 108 \pm 7$ ккал/моль. Оценены величины энергии диссоциации D_{298}^0 ряда электроположит. переходных металлов: ThC, 116; PuC, 89; CeC, 98; TiC 113; ZrC, 126; NiC, 130; VC, 111 (в ккал/моль). Удовлетворительные теоретич. значения энергии диссоциации D_0^0 для молекул UC и CeC определены методом Полинга ($D_0^0(CeC) = 110$ ккал/моль, $D_0^0(UC) = 101$ ккал/моль). Оценены энергии диссоциации двухатомных карбидов подгруппы скандия: ScC, 93; YC, 99; LaC, 120 (в ккал/моль).

А. Александров

UC₂

Sasaki Noriaki
et al.

1971.

"J. Nucl. Sci and Technol."
1971, 8 №11, 614-21.

новейших
исслед.

"Направлений и новейших исследований."

(см. LaC₂; III)

U - карбонилы

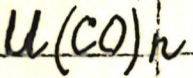
8 Б350. Синтез карбонилы урана с использованием метода матричной изоляции. Slater J. L., Shelton R. K., Lin K. C., Weltner W., Jr. Synthesis of uranium carbonyls using matrix isolation. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 10, 5129—5130 (англ.)

Измерены спектры ИК-поглощения урана, изолированного в матрице CO+Ar в соотношении 1:300. В спектре обнаружено появление ряда новых полос, к-рые отнесены к различным карбонилам урана: 1961 — к $U(CO)_6$, 1938 — к $U(CO)_5$, 1919 — к $U(CO)_4$, 1893 — к $U(CO)_3$, 1846 и 1855 — к $U(CO)_2$, 1832 и 1817 cm^{-1} — к UO . Отмечена стабильность образующихся карбонилы до 30° К

Г. Кузьянц

X. 1972. 8

1949



$n = 1-6$

образов
в матриц.

(8444n) Synthesis of uranium carbonyls using matrix isolation. Slater, J. L.; Sheline, R. K.; Lin, K. C.; Weltner, W., Jr. (Dep. Chem., Florida State Univ., Tallahassee, Fla.). *J. Chem. Phys.* 1971, 55(10), 5129-30 (Eng). The $U(CO)_n$ ($n = 1-6$) were prepd. in CO-Ar matrixes and were identified by ir spectroscopy. The metal was vaporized into dil. (1:300) CO-Ar matrixes at 4°K. The matrixes were allowed to warm a few degrees, then were quenched to 4°K. The ir spectra of the quenched systems indicate that a series of $U(CO)_n$ were successively formed and were stable at $\leq 30^\circ K$.

C. A. 1948 46.2

1973

$[UO_2(OCH_3CO)]^-$ 25097f Evaluation of force constants and calculation of normal vibrations of the complex ion uranyl acetate. $[UO_2(OAc)_3]^-$. Phan Dinh Kien; Kovrikov, A. B.; Komyak, A. I. (Beloruss. Gos. Univ. im. Lenina, Minsk, USSR). *Vesti Akad. Navuk Belarus. SSR, Ser. Fiz.-Mat. Navuk* 1973, (2), 88-93 (Russ). Force consts. and normal vibrations of $[UO_2(OAc)_3]^-$ with D_{3h} symmetry were calcd. The structural parameters necessary for the calcn. were obtained from x-ray diffraction anal. The external interactions between anion and cation were neglected. The matrix of symmetry transformation was calcd. by the method of symmetry vectors. The matrix of the force consts. and the interaction among the U-O bonds were calcd. from the equations obtained for the isolated UO_2^{2+} ion with $D_{\infty h}$ symmetry. An

(vi)

(cur. man) interaction among the OAc groups was almost negligible
 Vaclav Rejchleec.

C.A. 1973. 79 N4

40204.7690

STIS

TE, Ch

1973

EX-0

34637 GR

is-3276

(CH₃NH₂)₂UF₆

Satpathy K.C., Sahoo B. Fluoro complexes
of uranium.(IV). Part IV. The far infrared
spectra of fluoro complexes of uranium
(IV). "J. Indian Chem. Soc.", 1973, 50, N7, 452-
454 (англ.)

0037

024 024

ВИНИТИ

40204.7690

STIS TE, Ch

1973

EX-0 [redacted], [redacted], 34637 GR

3276

(C-11 11 11) UTS

Satpathy K.C., Sahoo B. Fluoro complexes of uranium.(IV). Part IV. The far infrared spectra of fluoro complexes of uranium (IV). "J. Indian Chem. Soc.", 1973, 50, N7, 452-454 (англ.)

0037

024 024 0 0

ВИНИТИ

1974

УС₄

11 Д117. Потенциал ионизации UC_4 . Асао Мицуру, Кубо Кэндзи, Сасаки Токуаки. «Кёто дайгаку гэнси энэруги кэнкюсё ихо, Bull. Inst. Atom. Energy Kyoto Univ.», 1974, 46, 34 (япон.)

Определен потенциал ионизации молекулы UC_4 $I = 4,8 \pm 0,9$ эв.

(у)

(41) м.с.

☒

Ф. 1975 1411

1974

UC₄Y₂C₄LaC₄

(Y)

22 Б816. Потенциалы ионизации UC₄, Y₂C₄ и LaC₄.
 Асано Мицуру, Кубо Кэндзи, Сасаки То-
 куаки. «Кёто дайгаку гэнси энэруги кэнкюсё ихо,
 Bull. Inst. Atom. Energy Kyoto Univ.», 1974, 46, 34
 (япон.)

Масс-спектрометрическим методом исследованы равнове-
 сия $M^+ \text{ (газ.)} + 2 \text{ C (тв.)} = MC_2^+ \text{ (газ.)}$ (1) и $M^+ \text{ (газ.)} +$
 $+ 4 \text{ C (тв.)} = MC_4^+ \text{ (тв.)}$ (2), где $M = Y, La$ и U . Зна-
 чения ΔH (эВ) процессов (1) и (2) составили соотв.:
 Y $1,68 \pm 0,06$ и $2,77 \pm 0,24$; La $1,18 \pm 0,24$ и $2,77 \pm 0,42$; U
 $2,00 \pm 0,07$ и $2,96 \pm 0,41$. Рассчитаны ионизац. потенциалы
 исследованных карбидов. А. Гузей

2. 1975 №22

②

☒

1974

UC₄
YC₄
LaC₄
3
(y)

48615v Ionization potential of uranium tetracarbide. Asano, Mitsuru; Kubo, Kenji; Sasaki, Noriaki (Inst. At. Energy, Kyoto Univ., Kyoto, Japan). *Kyoto Daigaku Genshi Enerugi Kenkyusho Iho* 1974, 46, 34 (Japan). The value of ionization potential, *IP*, for UC₄ was calcd. as 4.8 ± 0.9 eV by the following method: $IP(MC_4) = \Delta H_2 - 2\Delta H_1 + D_0^0(MC_4) - 2D_0^0(MC_2) + 2IP(MC_2) - IP(M)$, where D_0^0 is dissoen. energy and M stands for metallic element. ΔH_1 and ΔH_2 are the enthalpies for the following reactions: $M^+(g) + 2C(s) = MC_2^+(g)$ and $M^+(g) + 4C(s) = MC_4^+(g)$, resp. The method was checked by calcg. *IP* values for YC₄ and LaC₄. The calcd. values agreed with those detd. by other methods. T. Tokuhiro

 (+2)

C.A. 1975. 83 n 6

UC4

1945

Асаки Музуро и др.

(J)

Bull. Inst. Atom. Energy
Kyoto Univ., 1945, 48,
серии. 4B.

(coll. UC4; III)

C-U

coll. 4824

1975.

Kerr, J. A., et al

Handbook Chem. Phys.,
55th Ed., 1974-75.

(Do)

1975

50513, 1322

Ph, Ch, TC, DB

29932
[(CH₃)₄N]UCl₆ *ч 8836

Shamir Jacob, Silberstein Atara.

Laser Raman spectra of the uranium
hexachloride molecule and anions (UCl₆,
UCl₆⁻¹ and UCl₆⁻²).

"J. Inorg. and Nucl. Chem.", 1975, 37, N5,
1173-1175. (англ.)

0358 пик

341

342

0350

ВИНИТИ

1285-11111-584

50625.1257

Ch, Ph, DB, TC

$(\text{CH}_3)_4\text{UCl}_6$
(Vi; енд. поет)

1975

X-4-9306

Shamir Jacob, Silberstein Atara, Ferraro John R., Choca Monica. Vibrational analysis of the uranium hexachloride species in oxidation states of IV, V and VI.

"J. Inorg. and Nucl. Chem.", 1975, 37, N6,
1429-1432 (англ.) 0387 пик

372 373 0 3 7 9

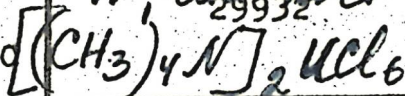
ВИНИТИ

50625.1257

Vi; ²⁹⁹³²уае

1975

Ch, Ph, DB, ■ TO



*4-9306

Shamir Jacob, Silberstein Atara, Ferraro John R., Choca Monica. Vibrational analysis of the uranium hexachloride species in oxidation states of IV, V and VI.

"J. Inorg. and Nucl. Chem.", 1975, 37, N6, 1429-1432 (англ.) 0387 пик

372 373 0 379

ВИНИТИ

ИЗВЧ

И - С (соедин.)

1976

20 Б88. He-I фотоэлектронные спектры ураноцена и тороцена. Clark John P., Green Jennifer C. The He-I photoelectron spectra of uranocene and thorocene. «J. Organometal. Chem.», 1976, 112, № 1, C14—C16 (англ.)

фото-
спектр.
спектр.

Сняты и интерпретированы He-I фотоэлектронные спектры (ФЭС) ураноцена (I) и тороцена (II). Для обоих соединений обнаружена практически одинаковая форма линий ФЭС, при этом значения вертикальных потенциалов, ионизации совпадают с точностью до $\sim 0,05$ эв. Интерпретация спектров проведена на основе полуэмпирич. расчета МО. Найденная для обеих систем конфигурация основного состояния $a^2_{1g}a^2_{2u}e^4_{1u}e^4_{1g}e^4_{2u}e^4_{2g}f^n$, (где $n=2$ для I и 0 для II) качественно правильно описывает наблюдаемые спектры. Последний максимум в спектре I с энергией связи 6,2 эв отнесен к ионизации с f -состояний, поскольку он отсутствует в спектре II. Данная интерпретация подтверждается результатами расчета по теории поля лигандов и данными магнитной восприимчивости.

С. Долин

X, 1976, N 20.

U₄

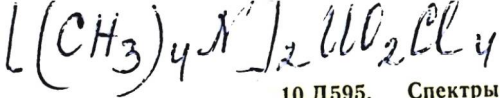
1977

Asano Mitsuru et al.

Kyoto Daigaku Genshi
Enerugi Kenkyusho, Iho
1977, 51, 39 (Japan).

y

(coll. YC₄; III)

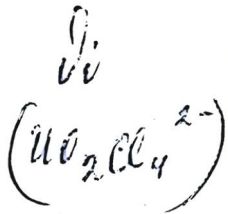


1974

10 Д595. Спектры поглощения тетрагалодиоксокомплексов урана (VI) при 4,2° К. Ч. I. Ди(тетраметиламмоний) уранилтетрахлорид. Di Sipio L., Tondello E., Pelizzi G., Ingletto G., Montenegro A. Absorption spectra of tetrahalodioxouranium (VI) complexes at 4.2° K. I. Di(tetramethylammonium)uranilytetrachloride. «Inorg. chim. acta», 1977, 22, № 1, 23—27 (англ.)

В области 345—500 нм измерены поляризационные спектры поглощения монокристалла $(\text{Me}_4\text{N})_2\text{UO}_2\text{Cl}_4$ при 4,2° К. Интерпретирована колебательная структура этих спектров. Найдено, что в области 20 000—28 000 cm^{-1} имеется несколько групп колебательных повторений причем самые интенсивные полосы поглощения дают колебательные повторения с частотой $\Delta\nu=700 \text{ cm}^{-1}$. Проведено отнесение указанной частоты колебания к симметричному колебанию ураниловой группы комплекса (U VI). Предположено, что $\Delta\nu=259 \text{ cm}^{-1}$ связана с колебаниями группы U—Cl.

Т. А. Ш.



ф. 1974 № 10

$U(HCOO)_4$

1977

Greis O., et al.

u.k. спектр

"Z. anorg. und allg. Chem."
1977, 433, №6, 111-118 (нем.;
ref. англ.)

см. $Th(HCOO)_4 - III$

Оттиск 8820

1979

УС_x

7 Б804. Обнаружение методом высокотемпературной масс-спектрометрии газообразных карбидов урана UC , UC_2 , UC_3 , UC_4 , UC_5 и UC_6 , и их энергии атомизации. Gupta Satish K., Gtingerich Karl A. Observation and atomization energies of the gaseous uranium carbides, UC , UC_2 , UC_3 , UC_4 , UC_5 and UC_6 by high temperature mass spectrometry. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 7, 3072—3080 (англ.)

В интервале t -р 2300—2700 К при испарении в ячейке Кнудсена смеси ThC_2 , UC_2 , Rh и графита в газовой фазе масс-спектрометрич. методом установлено наличие карбидов UC_n ($n=1-6$) и измерены t -рные зависимости их парц. давлений. По 2-му и 3-му законам рассчитаны энтальпии р-ции $U(\text{газ.}) + nC(\text{графит}) = UC_n(\text{газ.})$ и дополнит. р-ций, включающих два газ. карбида и графит или газ. C_2 . При расчетах по 3-му закону по оцененным молек. константам рассчитаны и табулированы термодинамич. функции газ. UC_n . Значения

~~Т.И. Т.И.~~

В III

Δ Натомиз

М.И.; Т.И.

IX (+) Т.И.

х:1980. №7

$-(G_T^\circ - H^\circ_{298})/T$ Дж/моль·град при 298, 2100 и 2700 К составили соотв.: UC 253,37, 291,28 и 299,23; UC₂ 268,65, 328,10 и 342,29; UC₃ 274,51, 347,58 и 365,63; UC₄ 297,86, 398,23 и 420,77; UC₅ 322,16, 441,46 и 468,66; UC₆ 334,94, 473,13 и 505,02. В кач-ве рекомендованных приняты след. значения ΔH°_0 (атомиз.), ΔH°_{298} (атомиз.) и ΔH°_{298} (обр.) кДж/моль: UC 451±15, 455±15 и 785±26; UC₂ 1265±16, 1274±15 и 682±26; UC₃ 1866±20, 1881±20 и 792±31; UC₄ 2547±25, 2564±25 и 826±34; UC₅ 3123±30, 3114±30 и 962±38; UC₆ 3796±30, 3822±30 и 1001±39. Подробно обсуждены источники погрешностей и надежность использованных значений. Анализируется относит. стабильность карбидов, обсуждены их вероятные структуры и влияние U на связи между атомами С.

А. Б. Кисилевский

ровъ

а

017719

1980

UC

21 Б31. Электронное строение UC и UN и его сопоставление с фотоэмиссионными спектрами. Joukov

UN

Vladlen P., Gubanov Vladimir A. Electronic structure of UC and UN and its comparison with photoemission spectra. «J. Inorg. and Nucl. Chem.», 1980, 42, № 5, 727—730 (англ.)

Электронное строение

В рамках дискретного вариационного X_α -метода в нерелятивистском приближении с использованием базиса численных атомных орбиталей рассчитано электронное строение кластеров UC_6^{20-} и UN_6^{15-} , моделирующих кристаллы UC и UN соотв. Спектр собственных значений кластеров сопоставлен и хорошо согласуется с основными структурами эксперим. спектров фотоэмиссии в кристаллах. Анализ распределения заряда в кластерах проведен в рамках расчетов заселенностей МО.

(+1) ☒

X. 1980 N 21

по Малликену. Основные уровни U в кластере имеют такие же заселенности, что и в свободном атоме. Наиболее существенным эффектом является значительная заселенность $6d$ -состояний U ввиду их участия в хим. связи. Заселенность $5f$ -уровней U в кластере имеет большее значение, чем в нейтр. атоме, причем эти уровни имеют тенденцию оттягивания на себя электронной плотности с $2p$ -уровней соседних атомов C или N . Разность в заселенностях $6d$ -АО и в UC и UN соответствует разности эффективных зарядов атома U в кластерах. Участие $5f$ -состояний U в UN и UC в хим. связи отличает соли урана от соотв-щих соединений редкоземельных металлов, где $4f$ -электроны более локализованы.

И. А. Тополь

Оттиски 9719

1980

UC

UN

10 Д147. Электронное строение UC и UN сопоставление с фотоэмиссионными спектрами. Electronic structure of UC and UN and its comparison with photoemission spectra. Joukov Vladlen P., Gubanov Vladimir A. «J. Inorg. and Nucl. Chem.», 1980, 42, № 5, 727—730 (англ.)

электр.
строение

Методом МО ЛКАО ССП X α дискретного варьирования исследовано электронное строение октаэдрич. кластеров UC₆²⁰⁻ (I) и UN₆¹⁵⁻ (II). Для I высшей занятой является МО 2a₂, основной вклад в которую вносят 5f-AOU; в случае II дополнительный электрон находится на более высокой МО 3t_{2u} с таким же составом. 10 более глубоких МО построены в основном из АО атомов C и N с существенной примесью 5f-, 6s- и 6d-AO U. Получены результаты хорошо согласуются с данными фотоэмиссионных спектров UC и UN. Подчеркнуто, что 5f-AO принимают существенное участие в связи и что в валентной зоне 5f- и 6d-электроны гибридизированы с 2p-электронами в отличие от локализованных и не участвующих в химич. связи 4-электронов лантанидов. В. Л. Лебедев

(+1) 

Ф 1980 N 10

1980

UC
UN

11 Д118. Исследование электронного строения и химической связи в карбиде и нитриде урана методами X_α РВ и ДВ. Жуков В. П., Губанов В. А., Вебер Ж. «Ж. неорган. химии», 1980, 25, № 8, 2043—2049

Электр.
структура

Методами X_α рассеянных волн (X_α РВ) и дискретного варьирования (X_α ДВ) выполнены расчеты электронного строения кластера UC_6^{20-} для структуры UC; методом X_α ДВ рассчитан кластер UN_6^{15-} для UN.

☐ (+1)

Ф-1980/11

Построены контурные карты молекулярных орбиталей для валентных уровней. Корректность расчетов подтверждена сопоставлением с фотоэлектронными спектрами UC, UN. Выявлены заметное участие 5f-орбиталей урана в химич. связи и значительная ковалентность; степень ковалентности понижается от UC к UN. Показано, что для стехиометрич. UC, близкого к идеальной структуре NaCl, следует ожидать заметно большей т-ры плавления и микротвердости, чем зафиксировано на эксперименте.

Резюме

1980

UC

UN

22 Б32. Исследование электронного строения и химической связи в карбиде и нитриде урана методами X_α РВ и ДВ: Жуков В. Н., Губанов В. А., Вебер Ж. «Ж. неорганич. химии», 1980, 25, № 8, 2043—2049

Методом X_α рассеянных волн (X_α РВ) и дискретного варьирования (X_α ДВ) выполнены расчеты электронного строения кластера UC_6^{20-} для структуры UC; методом X_α ДВ рассчитан кластер UN_6^{15-} для UN. Построены контурные карты МО для валентных уровней. Корректность расчетов подтверждена сопоставлением с фотоэлектронными спектрами UC, UN. Выявлены заметное участие 5f-орбиталей урана в хим. связи и значит. ковалентность; степень ковалентности понижается от UC к UN. Показано, что для стехиометрич. UC, близкого к идеальной структуре NaCl, следует ожидать заметно большей т-ры плавления и микротвердости, чем зафиксировано экспериментально.

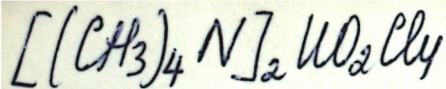
Резюме

Электрон.
строение
химич.
связь,

(41)

Х. 1980

№ 22



оттиск | 1981
13125

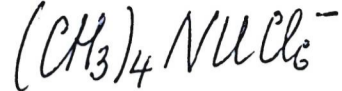
8 Б138. Электронные и колебательные спектры $[\text{Me}_4\text{N}]_2\text{UO}_2\text{Cl}_4$. Flint C. D., Tanner P. A. Electronic and vibrational spectra of $[\text{Me}_4\text{N}]_2\text{UO}_2\text{Cl}_4$. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1981, Part 2, 77, № 10, 1865—1878 (англ.)

электрон-
и
колебательн-
спектры

Изучены спектры КР, ИК-спектры в поляризованном свете, электронные спектры поглощения и спектр люминесценции при разных T -рах вплоть до 4 К комплекса $(\text{Me}_4\text{N})_2\text{UO}_2\text{Cl}_4$. Анализ данных показал, что четыре низших возбужденных состояния иона $\text{UO}_2\text{Cl}_4^{2-}$ относятся к классам B_{2g} , B_{3g} , A_g и B_{1g} группы симметрии D_{2h} , принимая оси x и y направленными вдоль связей

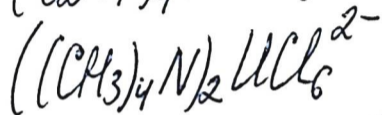
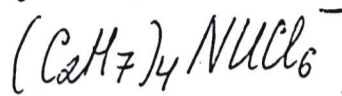
X. 1982, 19, 28

U—Cl. Первые два состояния образованы из $E_g(D_{4h})$. Отнесение полос электронно-колебательного спектра и типы наблюдаемых прогрессий согласуются с ранее полученными данными по спектрам $Cs_2UO_2Cl_4$ и $(Et_4)_2UO_2Cl_4$. Кристаллы легко поглощают влагу из воздуха, что проявляется в спектрах. Хотя крист. структура существенно не меняется, в ней появляются неэквивалентные уранильные ионы, а также изменения в спектрах, связанные с изменениями в правилах отбора по сравнению с безводн. веществом. С. С. Букалов



[Dmmux 14478]

1981



Mohan S., Rajaraman S.,

суд. номер.,

вращат. номер.,

Амтсигур

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1981, 19,

№ 7, ● 620-625.

Коллекция.

U(Acac)₄

1982

UO₂(Acac)₂ Casarin M., Ciliberto
E., et al.

Inorg. chim. acta,
1982, 64, N6, 247-249.

(см. $Zr(Acac)_4$; III)

U(OCH₃)₆

1982

19 Б1386. Лазерная фотохимия урановых соединений, поглощающих при 10 мкм. U(OCH₃)₆. Laser photochemistry of a uranium compound tailored for 10 μ absorption: U(OCH₃)₆. Cuellar Edward A., Miller Steven S., Teitelbaum Robert C., Marks Tobin J., Weitz Eric. «Rare Earths Mod. Sci. and Technol. Proc. 15th Rare Earths Res. Conf., Rolla, 15—18 June. 1981». New York; London, 1982, 71—76 (англ.)

Изучена фотохимия U(OMe)₆ в условиях фотолиза (Фт) излучением лазера на CO₂ (около 10 мкм) с целью изотопного обогащения (ИО) на основе многофотонных хим. процессов. Использовался CO₂-лазер оригинальной конструкции с энергией в импульсе от 0,9 до 1,7 Дж и CO₂-лазер промышленного изготовления с энергией до 15 Дж. Изотопный анализ осуществлялся масс-спектрометрически. Описан ИК-спектр и молек. структура U(OMe)₆, имеющая октаэдрич. геометрию. ИК-спектр U(OMe)₆ содержит полосы при 495,5; 464,8; 400,6 (вал. кол. U—O) и 1051,1 см⁻¹ (вал. кол. C—O), а ИК-спектр U(¹⁸OMe)₆ — при 481,0; 450,4; 386,0 и 1021,4 см⁻¹. При Фт газ. U(OMe)₆ определены условия

Лазерная
фотохимия

X. 1983, 19,
N 19

для получения максим. выхода и установлены природа протекающих фотохим. процессов, а также изотопная селективность. Перв. фотохим. процессов является фотодиссоциация $U(O\text{Me})_6$ с образованием $U(O\text{Me})_5$ и $O\text{Me}$, вследствие чего регистрируется MeOH и формальдегид. Достигнуто ИО 2,3% при излучении с плотностью энергии 4 Дж/см². ИО существенно зависит от плотности энергии: наблюдаются верхний и нижний пороги ИО при энергиях 3 и 5,6 Дж/см² соотв. Обсуждаются возможности практич. применений изученной системы.

П. П. Левин

1982

U(OCH₃)₆

11 Д643. Лазерная фотохимия соединения урана, простирающаяся в область поглощения около 10 мкм: U(OCH₃)₆. Laser photochemistry of a uranium compound tailored for 10 μ absorption: U(OCH₃)₆. Cuellar Edward A., Miller Steven S., Teitelmaum Robert C., Marks Tobin J., Weitz Eric. «Rare Earths Mod. Sci. and Technol. Proc. 15 Rare Earths Res. Conf., Rolla, 15—18 June, 1981». New York; London, 1982, 71—76 (англ.)

Vi;

С целью развития методов изотопного обогащения урансодержащих соединений изучены спектральные и фотохимич. свойства комплексов U(¹⁶OCH₃)₆ и U(¹⁸OCH₃)₆ в газовой фазе при т-рах 292—306 К. Многофотонное импульсное возбуждение комплексов осуществлялось с помощью излучения двух различных лазеров на СО₂ с энергией в импульсе до 15 Дж при λ=9,6 мкм. На основании данных по ИК-спектрам поглощения сделан вывод об октаэдрич. окружении атома U в указанных комплексах. Определены различия в

Ф. 1983, 18, N 11

частотах колебаний связей U—O (симметрии A_{1g} , T_1 и E_g) и C—O обоих комплексов. Показано, что ИК-фотолиз комплексов излучением, резонансным с частотой валентных колебаний связи U—O, приводит к почти полной их диссоциации с образованием $U(OCH_3)_5$ и метокси-радикала $CH_3O\cdot$. Обсуждены возможности использования этой фотохимич. реакции для изотопного обогащения U. Проведенные предварительные исследования с образцами комплексов различного происхождения показали, что коэф. такого обогащения обнаруживает значительную зависимость от энергии возбуждения.

Т. А. Ш.

алы

в 1

$[(\text{CH}_3)_4\text{N}]_2\text{UO}_2\text{Br}_4$

О.М.Мисек 1982
13499

14 Б191. Электронный и колебательный спектры $[\text{Me}_4\text{N}]_2\text{UO}_2\text{Br}_4$. Flint C. D., Tanner P. A. Electronic and vibrational spectra of $[\text{Me}_4\text{N}]_2\text{UO}_2\text{Br}_4$. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1982, Part 2, 78, № 1, 103—112 (англ.)

Измерены спектр КР, поляризац. ИК- и электронные спектры и спектр люминесценции $[\text{Me}_4\text{N}]_2\text{UO}_2\text{Br}_4$. Получены след. значения частот внутренних колебаний аннона (в cm^{-1}): $\nu_2=914$, $\nu_1=833$, $\nu_3=250$, $\nu_{11}=194$, $\nu_4=162$, $\nu_5=142$, $\nu_7=80$. Выделено 8 электронных переходов в видимой области спектра поглощения (19 968, 19 993, 20 283, 21 038, 21 584, 22 150, 22 150, 22 431 cm^{-1}), дано их отнесение с учетом преобразования по симметрии при переходе от группы D_{4h} и D_{2h} . Полученные результаты сопоставлены с данными по $\text{Cs}_2\text{UO}_2\text{Cl}_4$.

В. М. Ковба

2i;

х. 1982, 19, N14.

UC(k)

1982

Mallett C.P.

теорема
равенств
электрон.
структ.

J. Phys. C 1982, 15
(31), 6361-78.

(see Th C(k); III)

U (C_8H_8)

1982

спектру

12 Д638. Исследование возможности использования бис(π -циклооктатетраен)урана для получения свободных атомов урана в газовой фазе при температурах ниже 1000 К. Untersuchung zur Eignung von Bis(π -cyclooctatetraen)uran als Ausgangsmaterial für die Erzeugung freier Uranatome in der Gasphase bei Temperaturen unter 1000 K. Rothballe W. «GKSS-Reports», 1982, № E18, 79 pp., ill. (нем.; рез. англ.)

Установлено, что $U(C_8H_8)$ при т-рах выше 770 К разлагается. В области 5800—6200 Å получен спектр его поглощения (при т-ре 623 К). Все попытки обнаружения при помощи лазерной флуоресценции атомов урана, освобождающихся при термич. деструкции $U(C_8H_8)$, оказались безрезультатными. Ю. В. Чижев

ср. 1982, 18, № 12

Отанш. коллекте

И.

1983

6 Б1025. Валентное электронное строение комплексов урана с органическими лигандами $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{UX}_2$ ($\text{X}=\text{Cl}, \text{CH}_3$). Valence electronic structures of the organouranium complexes $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{UX}_2$ ($\text{X}=\text{Cl}, \text{CH}_3$). Bursten Bruce E., Fang Anne. «J. Amer. Chem. Soc.», 1983, 105, 21, 6495—6496 (англ.)

Квазирелятивистским методом ССП-Ха рассеянных волн (Хз-РВ), с явным учетом в процессе самосогласования зависимости массы электрона от скорости и дарвиновского взаимодействия, рассчитано электронное строение комплексов $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{U}(\text{CH}_3)_2$ (I) и $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{UCl}_2$ (II). Сопоставление электронного строения I и II показало, что анион CH_3^- является более сильным σ -донором, чем Cl^- , а связывающие орбитали $\text{U}-\text{C}(\text{Me})$ лежат по энергии значительно выше, чем связывающие орбитали $\text{U}-\text{Cl}$. Результаты расчетов не обнаруживают проявлений π -донорных св-в аниона Cl^- в II. Несмотря на то, что все расчеты были проведены в спин-гра-

Электронное строение

Х. 1984, 19, № 6

ниченном приближении метода Х α -РВ, на основании анализа энергетич. положения МО с доминирующим вкладом 5f-АО урана сделан вывод о том, что основному состоянию I и II должны соответствовать высокоспиновые электронные конфигурации. В приближении переходного состояния вычислены энергии ионизации валентных МО в I и II, с использованием к-рых интерпретированы эксперим. фотоэлектронные спектры исследованных комплексов урана.

И. А. Тополь



$U(OCH_3)_6$

Dm. 17387 | 1983

спектр,
мол.
структура

Cuellar E-A., Miller S.S.
et al.,

J. Amer. Chem. Soc.,
1983, 105, N14, 4580-

4589. ●

Om. 17285

1983

U-omaru-
ka
(ypauu)

Harsanyi L., Császár P.,

чректр,
ам-нод.

Acta chim. hung.,
1983, 113, N 3, 257-278.



$UO_2(HCOO)_2 \cdot H_2O$

от 16689 1983

18 Б151. Наблюдение асимметричного растяжения связи O—U—O в вибронном спектре поглощения моногидрата формиата уранила. Observation of the asymmetric O—U—O stretch in the vibronic absorption spectrum of uranyl formate monohydrate. West W. P., Muller C. H., Porter J. T., Malley M. M. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 6, Pt 1, 3338—3339 (англ.)

ν_i

Обнаружено проявление в спектре флуоресценции изотопически обогащенного $UO_2(HCOO)_2 \cdot H_2O$ при 4,2 К частот асимм. кол. O—U—O. Доказательством отнесения частоты $707,2 \text{ см}^{-1}$ к асим. вал. кол. UO_2 служит ее сдвиг на $0,5 \text{ см}^{-1}$ при замещении ^{235}U — ^{238}U . К сим. вал. кол. UO_2 отнесена частота $726,8 \text{ см}^{-1}$. Более высокое значение частоты сим. вал. кол. UO_2 впервые обнаружено для соединений уранила.

Е. Разумова

Х. 1983, 19, N 18

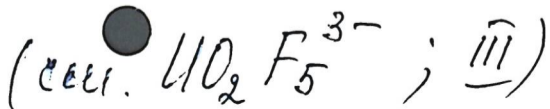


1984

Борковский Н. Б., Ков-
риков А. Б. и др.

расши-
структ.

Координат. химия,
1984, 10, N 11, 1526-1530.



$[(CH_3)_4N]_2UO_2F_4$ (ДМ. 19091) 1984

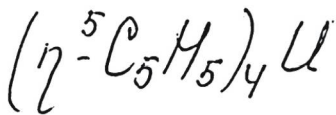
18 Б1127. Спектр люминесценции и колебательный спектры уранильного соединения $[(CH_3)_4N]_2UO_2F_4$. Luminescence and vibrational spectra of the uranyl compound $[(CH_3)_4N]_2UO_2F_4$. Flint C. D., Tanner P. A. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1984, Pt 2, 80, № 3, 219—226 (англ.)

Измерены спектр люминесценции, ИК- и КР-спектры уранильного соединения $[(CH_3)_4N]_2UO_2F_4$ при 85 К и предложена их интерпретация в рамках внутренних мод аниона $UO_2F_4^- (D_{4h})$. Время жизни τ возбужденного состояния $UO_2F_4^-$ при 85 К составляет 5 мкс, что значительно превышает известные значения τ для его аналогов $UO_2X_4^-$. Обсуждены также спектры нек-рых продуктов распада исследованного комплекса.

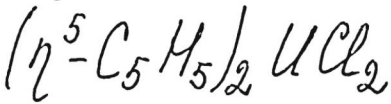
Б. В. Рассадин

ИК, КР-
спектры,
Vi;

X. 1984, 19, N 18



1985

Bevster B. E.,
Fang A.раствор
электрол.
сепролецияInorg. Chim. Acta,
1985, 110, N2, 153-160(ср. UCl_4 ; III)

UC(2)

1986

16: 108900q Evaluation of thermodynamic functions of gaseous uranium and thorium carbide species. Joseph, M. (Radiochem. Programme, Indira Gandhi Cent. At. Res., Kalpakkam, India). Indira Gandhi Cent. At. Res., Kalpakkam, [Rep.] IGCAR 1986, 84, 40 pp. (Eng). The thermodyn. functions of gaseous UC, UC₂, UC₃, UC₄, UC₅, UC₆, ThC, ThC₂, ThC₃, ThC₄, ThC₅, and ThC₆ were calcd. by assuming different possible structures and mol. parameters and making use of the principles of statistical thermodyn. The values obtained for different structures are compared.

термод. ф-ции,
структур., и.п.

- 1) UC₂, 2) UC₃, UC₄, UC₅,
- 3) ThC, 4) ThC₂, 5) ThC₃, ThC₄,
ThC₅, ThC₆

(45) ☒

C.A. 1987, 106, N14

UL3

1986

UL4

Joseph M.

UL5

Indira Gandhi. Cent.

мер. л. 00. At. Res., Kalapakkam,
 ф-м, [Rep.] IGCAR 1986,
 ст. р. 100, 84, 40 pp.
 л. н.

" (сер. UL(2); III)

UC₂

1986

Joseph M.

Indira Gandhi Cent.

перуог

р-уи,

српукмур,

л. п.

St. Res., Kalapakkam,

[Rep.] IGCAR 1986,

100, 84, 40 pp.

(сел. UC(2); III)

$\text{Cl}_3\text{U-CH}_3$

1989

$\text{A}(\text{U-CH}_3)$,
paerim

Ziegler Tom,
Baerends Evert Jan,
et al.

J. Phys. Chem. 1989, 93(8),
3050-6.

(Cler. U-F_4 ; III)

$U(C_8H_8)_2$

1990

12 Б1157. Электронографическое исследование ураноцена (бис(циклооктатетраен)уран-IV) / Комаров С. А., Севастьянов В. Г., Кузнецов Н. Т., Ежов Ю. С. // Высокочист. вещества.— 1990.— № 1.— С. 106—108.— Рус.

Методом высокоточной газовой электронографии исследована структура свободной молекулы $U(C_8H_8)_2$.
Найдены основные молек. константы. Резюме

М.А.

Х. 1990, N 12

$C_{60}U$

1991.

$C_{60}U^+$ Chang Agnes H. H.,
Emler W. C. et al.

раєрїм J. Chem. Phys. 1991,
сїпрукїї. 94(7), 5004-10.

(сїр. $C_{60}O$; III)

U(CH₃)₃

1992

16 Б1050. Роль *d*- и *f*-орбиталей в геометриях соединений низковалентных актинидов. Неэмпирическое исследование U(CH₃)₃, Np(CH₃)₃ и Pu(CH₃)₃. Role of *d* and *f* orbitals in the geometries of low-valent actinide compounds. Ab initio studies of U(CH₃)₃, Np(CH₃)₃ and Pu(CH₃)₃ / Ortiz J. V., Hay P. J., Martin R. L. //

J. Amer. Chem. Soc.— 1992.— 114, № 7.— С. 2736—2737.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП ППАО (в полном пространстве активных орбиталей) с использованием релятивистских эффективных потенциалов остова для атомов актинидов рассчитана геометрич. структура молекул U(CH₃)₃ (I), Np(CH₃)₃ (II) и Pu(CH₃)₃ (III). Согласно расчетам, оптимальной является пирамидальная структура с углом C—An—C 105,6°, 107,2° и 108,7° для I—III соотв., что хорошо согласуется с эксперим. определенной структурой U[CH(SiMe₃)₂]₃; плоская структура представляет собой переходное состояние и

U. A.

⊗ (42)

X. 1992, N 16

лежит выше соотв. на 3,7, 3,3 и 2,4 ккал/моль. Вычисленная длина связи $\text{Ap}-\text{C}$ увеличивается на 0,07 и 0,12 Å при переходе от I к III. Показано, что основным фактором, стабилизирующим пирамидальную структуру, является большой вклад $6d\text{-AO}$ Ap в π -связь $\text{Ap}-\text{C}$ для этой геометрии.

В. К. Михалко



U(CH₃)₃

1992

№8 Д48. Влияние *d*- и *f*-орбиталей на геометрию

низковалентных соединений актинидов. Неэмпирические исследования U(CH₃)₃, Np(CH₃)₃ и Pu(CH₃)₃. Role of *d* and *f* orbitals in the geometries of low-valent actinide compounds. Ab initio studies of U(CH₃)₃, Np(CH₃)₃, and Pu(CH₃)₃ / Ortiz J. V., Hay P. Jeffrey, Martin Richard L. // J. Amer. Chem. Soc.— 1992.— 114, № 7.— С. 2736—2737.— Англ.

М.А.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом корреляции электронов в модели полного активного пространства с использованием релятивистского эффективного основного потенциала и двухэкспонентного базиса для валентной оболочки исследовано электронное строение M(CH₃)₃, M=U, Np, Pu. Рассчитаны равновесная геометрия для плоских и пирамидальных (менее плоские выгодны на 3,7—2,4 ккал/моль) структур, согласующаяся с имеющимися эксперим. данными. Расчеты,

(42)

Ф. 1992, N 8

Np(CH₃)₃, Pu(CH₃)₃

для конфигураций f^4 и f^5 соединений Np и Pu показали, что занятость f -орбиталей не влияет на относит. выгодность пирамидальных структур, а зависит от $6d$ -характера связывающих орбиталей $M-C$. При исключении из базиса $6d$ -АО более выгодной становится плоская форма.



CUN⁻

1994

Рыуккое Рекка, Ли
Ган, et al.

структура
и V_i , теор-
расчет

J. Phys. Chem. 1994,
98(18), 4809-13.

(● NUN; III)

U C₂₈

1996

Zhao K., Pitzer R.M.,

J. Phys. Chem. — 1996,

(Ae, VII) 100, No 12, C. 4798-4802

(all. ● C₂₈; III)

$U(CO)_x$

Dr. 39932

1999

p:3

132:27895 Reaction of Laser-Ablated Uranium Atoms with CO: Infrared Spect of the CUO, CUO-, OUCCO, (.eta.2-C2)UO2, and $U(CO)_x$ ($x = 1-6$) Molecules i Solid Neon. Zhou, Mingfei; Andrews, Lester; Li, Jun; Bursten, Bruce E. Departments of Chemistry, University of Virginia

Charlottesville, VA 22901, USA

J. Am.

Chem. Soc., 121(41), 9712-9721 (English) 1999 Laser-ablated U atoms were reacted with CO mols. during condensation with Ne at 4 K. Absorptions at 1047.3 and 872.2 cm^{-1} are assigned to the mol. formed from the insertion reaction that requires activation energy. Isotopic substitution shows that the upper band is largely U-C and the lo band mostly U-O in

C.A. 2000, 132

vibrational character. Absorptions at 2051.5, 1361.8, 841.0 cm^{-1} are assigned to the OUCCO mol., which is formed by the CO addn reaction to CUO and UV-visible photon-induced rearrangement of the $\text{U}(\text{CO})_2$ mol. The OUCCO mol. undergoes further photochem. rearrangement to the $(\text{C}_2)\text{UO}_2$ mol., which was characterized by sym. and antisym. OUO stretching vibrations at 843.2 and 922.1 cm^{-1} . The U carbonyls $\text{U}(\text{CO})_x$ ($x = 1-6$) are produced on deposition or on annealing. Evidence is also presented for the CUO-anion and $\text{U}(\text{CO})_x^-$ ($x = 1-5$) anions, which are formed by electron capture. Relativistic d. functional theor. calcns. were performed for the aforementioned species, which lend strong support to the exptl. assignment of the IR spectra. It is predicted that CUO is a linear singlet mol. with the shortest U-C bond yet characterized, and it has a U-C triple bond with substantial U 5f character. The theor. anal. also finds that a distorted tetrahedral geometry of $(\text{C}_2)\text{UO}_2$ lies much lower in energy than either the bent/linear OUCCO structures or the $\text{U}(\text{CO})_2$ U dicarbonyl.

DUCD

(Am. 40 524)

2000

Lester Andrews^v et al.,

J. Am. Chem. Soc. 2000,
122, 11440-11449.

Reactions of Laser - Ablated U and
Th with CO₂: ● Neon Matrix

Infrared Spectra and Density
Functional Calculations of OUCO,
OTHCO, and Other Products.

CUO

(DM. 40648)

2000

Laura Bagliardi,
Björn O. Ross,

Chem. Phys. Lett.,
2000, 331, 229-234.

Uranium triatomic compounds XUY ● $(X, Y = C, N, O)$:

a combined multiconfigura-
tional second-order
perturbation and density
functional study.

F: UC

P: 3

135:10215 Potential energy functions and thermodynamic properties of uranium diatomic compounds. Wang, Hong-yan; Zhu, Zheng-he; Fu, Yi-bei; Wang, Xiao-ling; Sun, Ying. Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu, Peop. Rep. China. He Huaxue Yu Fangshe Huaxue (2000), 22(4), 193-199. in Chinese

The electronic states and the disocn. limits for the ground states of diat. mols. UO, UC, UN and UH were calcd., using the at. and mol. reaction statics (AMRS) and the HF-MP2 methods with relativistic effective core potential. The equil. geometry, disocn. energy, spectroscopic data, and the anal. potential energy functions of UO, UC, UN and UH were obtained. The calcd. thermodyn. formation functions at 0.1 kPa and 298 K (ΔH_f^0 , ΔS_f^0 , ΔG_f^0) are in agreement with the exptl. data.

2000

UC₂

1986

105: 197490a Molecular form of gaseous uranium carbide (UC₂). Imoto, S.; Fukuya, K. (Fac. Eng., Osaka Univ., Suita, Japan). *J. Less-Common Met.* 1986, 121, 55-60 (Eng). The results of MO calens., using the discrete variational X α method are presented for UC₂(g) of various mol. forms: the linear sym. form C-U-C, asym. forms U-C-C, and sym. triangular forms with various C-U-U angles. Among the mol. forms under consideration the linear sym. form is the lowest both in HOMO energy and total energy, and it shows the highest value for the overlap population between U and C, this being 1.08 for each bond. However, the overlap population for U-C-C is only 0.28, showing that the U-C bonding in the U-C-C mol. is not as strong as ests. from vaporization data suggest. The electronic calen. suggests that the linear sym. form is the most stable chem. form, followed by the asym. form, the triangular form being the least stable.

теор. расчет
структуры и
стабильности

С. А. 1986, 105, N 2:2