

Infrared Spectra and Quantum Chemical Calculations of the Uranium Carbide Molecules UC and CUC with Triple Bonds

Xuefeng Wang and Lester Andrews*

Department of Chemistry, University of Virginia, Charlottesville, Virginia, 22904-4319

Per-Åke Malmqvist and Björn O. Roos

Department of Theoretical Chemistry, Chemical Center, University of Lund, P.O.B. 124,
2-221 00 Lund, Sweden ⁱ

António P. Gonçalves, Cláudia C. L. Pereira, and Joaquim Marçalo

Unidade de Ciências Químicas e Radiofarmacêuticas, Instituto Tecnológico e
Nuclear/CFMCUL, 2686-953 Sacavém, Portugal

Claude Godart and Benjamin Villeroy

Chimie Métallurgique des Terres Rares, ICMPE, CNRS, 2/8 rue Henri Dunant, 94320
Thiais, France.....

Reference (32) Gaussian 09, Revision **A.1**, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, Jr., J. A.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, N. J.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas, Ö.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.