

PF₂

3701 - III

1964

BF_2 ; CF_2 ; NF_2 ; AlF_2 ; PF_2 ; ZrF_2

()

Nagarajan G.

Indiana J. Pure Appl. Phys., 1964,
2(II), 341-3

Mean amplitudes of vibration ...

J

PF₂

Wade G.

1965

b-5

(7)

Mass spectrometric
investigations of some
inorganic and organic
phosphorus compounds.
(dissertation).

PF₂

Wan Y.K.S.,
Morton Y.R.,
Bernstein H.Y.

1966

Can. J. Chem., 44, N16, 1957 (1966)

Crystalline N₂H₄⁺ u PF₂

(^{III}Cryst. N₂H₄⁺)

$PF, PF_2, PF_3, P_2F_4, P_3F_5, P_6P_4(Vi)$ - 1969
Solan. D., ¹³ XII 1247
U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Tech.
Inform., PB Rep., 1969, PB-184819, 247pp
(asul)

Production, reactions, and spectra
of low-valent highly reactive chemi-
cal species - with special emphasis
on the phosphorus - fluorine system

10 U (B)

CA 1970:12, N18, 96190x

1970

PF₂

8 Б1047. Исследование ИК-спектров продуктов фотоллиза PF_2H и P_2F_4 и продуктов термического разложения P_2F_4 . Burdett Jeremy K., Hodges Leslie, Dunning Virginia, Current Jerry H. Infrared studies of the matrix isolated photolysis products of PF_2H and P_2F_4 and the thermal decomposition products of P_2F_4 . «J. Phys. Chem.», 1970, 74, № 23, 4053—4059 (англ.)

2. Продукты фотоллиза PF_2H в Ag-матрице при 4° K поглощают при 831,4 и 852,1 см^{-1} . Эти полосы поглощения приписываются валентным колебаниям, радикала $\text{PF}_2\cdot$. Продукты термич. разложения P_2F_4 в Ag-матрице поглощают при более низких частотах. При фотоллизе

+1

X. 1971. 8



P_2F_4 наблюдаются широкие полосы поглощения ($5-10\text{ см}^{-1}$) при $834,0$ и $843,5\text{ см}^{-1}$, приписываемые возбужденным PF_3 -радикалам, к-рые не смогли продиффундировать далеко от молекулы P_2F_4 . Семь сильных полос поглощения при $967, 924, 898, 811, 751, 580, 399\text{ см}^{-1}$ и слабая полоса при 408 см^{-1} связываются с молекулами $PF_3=PF$, образующимися при фотоллизе P_2F_4 . Из резюме

1970

$$\text{PF}_2$$

$$\text{PF}_3 : \text{PF}_3$$

$$[V_i]$$

unrec.

09070111

C.A. 1971.74.2

8039t' Infrared studies of the matrix isolated photolysis

products of PF_2H and P_2F_4 and the thermal decomposition products of P_2F_4 . Current, Jerry H.; Burdett, Jeremy K.; Hodges, Leslie; Dunning, Virginia (Gulf Res. and Dev. Co., Pittsburgh, Pa.). *J. Phys. Chem.* 1970, 74(23), 4053-9 (Eng). The photolysis of PF_2H in Ar matrices at 4°K produced absorptions at 831.4 and 852.1 cm^{-1} which are assigned to the stretching modes of the PF_2 free radical. An absorption at the lower frequency is also obsd. when the products of the thermal decompn. of P_2F_4 are isolated in Ar matrices. Photolysis of P_2F_4 results in broader absorptions (5-10 cm^{-1}) at 834.0 and 843.5 cm^{-1} which are ascribed to perturbed PF_2 radicals which are not able to diffuse far from the site of the original P_2F_4 mol. Seven strong ir absorptions at 967, 924, 898, 811, 751, 580, 399, and a weaker absorption at 408 cm^{-1} , are assigned to the species PF_3 :- PF_2 formed by the photolysis of P_2F_4 . RCKG

+1



PF₂

спектр
ЭПР

У. 1970. 15

1970

У) 15 Б257. Анизотропный спектр ЭПР, PF₂ в замороженных матрицах. Wei Michael S., Current Jergy H., Gendell Julien. Anisotropic electron spin resonance spectrum of PF₂ in low-temperature matrices. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 3, 1592—1602 (англ.)

Наблюден анизотропный спектр ЭПР радикала PF₂, полученного термич. разложением газа P₂F₂ или при фотоллизе PF₂H в аргонной матрице. Проявление в спектре ЭПР 12 линий интерпретировано, как доказательство наличия произвольно ориентированных радикалов с аксиально симметричными тензорами g и сверхтонкого взаимодействия. Определены параметры этих тензоров. Сопоставление с данными для NF₂, показывает, что неспаренный электрон в PF₂ в большей степени локализован на центральном атоме, чем в NF₂. Этот результат подтверждается также расчетами расширенным методом Хюккеля.

Резюме

XIII - 2051

1972

PM_2 , PF_2 , PCl_2 , PF^+ , PCl^- , PF_4 (kb. cell.)
 PCl_4 , PO_2 , PO_3^{2-} , PO_3 , HPO_2 , FPO_2 (vacuum)

Kilcoist D., Thomson C.,

J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2,
 1972, 68 (Pt. 3), 435-43 (Ouzi)

Complete neglect of differential
 overlap (CNDO) calculations on small
 radicals containing  phosphorus
 C.A., 1972, 76, v16, 902-975

hD

40305.6654

PF₂

1973

Ph, Ch, TE, Ex-C

96201

1850

Cobb J.C., Hinchliffe A. An AB initio
molecular orbital study of the PF₂
radical. "Chem. Phys. Lett.", 1974,
24, N 1, 75-76

(англ.)

0058

041 042 0.51

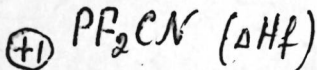
ВИНИТИ

PF₂

1973

(3)

165907z Dissociation and ionization of difluorocyanophosphine. Harland, P. W.; Rankin, D. W. H.; Thynne, J. C. J. (Chem. Dep., Edinburgh Univ., Edinburgh, Scot.). *Inorg. Chem.* 1973, 12(6), 1442-3 (Eng). The principal ions (relative intensities given in parentheses) obsd. at 70 eV in the mass spectrum of PF₂CN were: PF₂CN⁺ (22), PFCN⁺ (9.1), PF₂⁺ (100), PF⁺ (9.2), CN⁺ (3.3); PF₂CN⁻ (6.4), PF₂⁻ (10), FCN⁻ (1), F₂⁻ (1), CN⁻ (1000), F⁻ (47). Possible reactions for the formation of some of these ions were discussed. Some of the estd. energies were: PF₂-CN bond dissocn. energy <3.4-3.8 eV, ionization potential of PF₂ <10.0 ± 0.3 eV, and heat of formation of PF₂CN ~ -4.1 ± 0.6 eV.



C. A. 1973. N26. 78

1974

XIII - 2584

PF₂

(M.N.)

кв. мех.
рацем.

138754g Ab initio molecular orbital study of the phosphorus difluoride radical. Cobb, J. C.; Hinchliffe, A. (Chem. Dep., Univ. Manchester Inst. Sci. Technol., Manchester, Engl.). *Chem. Phys. Lett.* 1974, 24(1), 75-6 (Eng). Excellent agreement with expt. (W. Nelson, et al., 1970) was obtained with the ESR coupling consts. of the PF₂ radical that were calcd. by using Gaussian-type orbitals (H., 1971).

C.A. 1974. 80. N24.

PF₂

XIII - 2581

1974

7 Д121. Исследование неэмпирическим методом молекулярных орбиталей радикала PF₂: Cobb J. C., Hinchliffe A. An AB initio molecular orbital study of the PF₂ radical. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 24, № 1, 75—76 (англ.)

Электр-
состав

Неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО проведен расчет электронного строения радикала PF₂. Использован расширенный базис АО слэтеровского типа с экспонентами Клемента—Раймонди, дополненный 3s- и 3p-АО атома F и 3d-, 4s- и 4p-АО атома P, аппроксимированных гауссовскими ф-циями, от 5 гауссовских ф-ций для 1s-АО до 1 для дополнительных АО. Длина связи P—F принята равной 1,52 Å, валентный угол 100°. Расчеты выполнены неограниченным методом Хартри—Фока с аннигиляцией квартетной спиновой компоненты. Рассчитанные значения констант СТС находятся в хорошем согласии с эксперим. данными.

А. А. Б.

ф. 1974 N 7

PF₂

XIII - 2581

1974

13 Б30. Неэмпирическое исследование радикала PF₂ методом молекулярных орбиталей. Cobb J. C., Hinchcliffe A. An ab-initio molecular orbital study of the PF₂ radical. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 24, № 1, 75—76 (англ.)

расчет

Представлены результаты неэмпирич. расчета констант изотропного сверхтонкого взаимодействия (ИСТВ) с ядрами F¹⁹ и P³¹ в σ -электронном радикале PF₂. Для длины связи P—F было выбрано значение 1,52 Å, а угол между связями принят равным 100°. Расчеты выполнены с использованием расширенного базиса, в котором наряду с миним. набором орбиталей слейтеровского типа были учтены ближайшие вакантные s- и p-АО, а для атома P еще и 3d-АО. Слейтеровские АО были аппроксимированы гауссовскими. Константы ИСТВ вычислены как до ($a_{\text{вЛ}}$), так и после ($a_{\text{ЛЛ}}$) удаления примесной квартетной компоненты из волновой функции неограниченного метода Хартри—Фока. Оцененные по соотношению Амоса $a = (1/4)(a_{\text{вЛ}} + 3a_{\text{ЛЛ}})$ теор. величины хорошо согласуются с эксперим. данными.

Н. Д. Чувылкин

X. 1974. № 13

111-1582
*4-6841

1974

PF₂

SF₃

спектры
ЭПР

4 Б320. Спектры ЭПР радикалов PF₂ и SF₃. Co-
lussi A. J., Morton J. R., Preston K. F., Fes-
senden Richard W. ESR spectra of PF₂ and SF₃
radicals. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 3, 1247—1248
(англ.)

В интервале т-р от —100 до —140° исследованы
спектры ЭПР радикалов PF₂ и SF₃, полученных двумя
методами: при облучении электронами PF₃ (5 мол.%)
в C₂F₆, и SF₆; при УФ-фотолизе замороженных р-ров
PF₂Cl и H₂S+CF₃OF во фреоне-13. Определены пара-
метры спектров ЭПР PF₂: $g=1,9994-1,9997$; $a_F=81,3-82,0$;
 $a_F=33,1-32,4$ гс и SF₃ $g=2,0054-2,0050$; a_F (одно
ядро)=40,4—41,0; a_F (два ядра)=54,3—48,7 гс. В свете
полученных данных пересмотрена идентификация ра-
дикалов, наблюдавшихся разными авторами, как PF₂
и SF₃.

В. В. Жуков

ж. 1975. №4

(+1) ☒

50105.7329
Ch, Ph, TC

PF₂ + 29862 02
(AP)

1974
*4-8018

Dean Christopher R.S., Finch Arthur,
Gardner Peter J., Payling David W.
Appearance and ionization potentials
of ions produced by electron-impact on
some phosphorus-fluorine compounds: the
phosphorus-phosphorus bond dissociation
energy in diphosphorus tetrafluoride.
"J.Chem.Soc.Faraday Trans.", 1974, Part I,
70, N. 11, 1921-1925 (англ.)

Рис. Р₂ F₄ III

254 255 0 2 6 7 0 2 7 5 ДИК ВИНТИ

$PF^+, PF_2^+, PF_3^+, F^-, F_2^-;$
 $PF^-, PF_2^-, CN^+, PF^+, FCN^-$ - (A.P.) 1974
 $\frac{PF_3}{PF_2}, \frac{PF_2}{PF_3}, \frac{CN}{PF_2}$ - (D^o) X14216

Harland P.W., Rankin D.W.H., Thynne J.C.J.

Int. J. Mass spectrom. and Ion

Phys., 1974, 13, N4, 395 - 410 (anal.)

Ionization by electron impact
of phosphorus trifluoride difluorocyanophosphine.

BeTrus, 1974, 11D236

10 (P)
(см. оригинал)

41225.9102

Ph, Ch, TC

PF₂ 96201 02
(равнов. геол.)

1974

44-7693

Hudson A., Wiffen J.T.

XIII-2892-82

The structure of phosphino and phospho-
ranyl radicals. "Chem. Phys. Lett.",
1974, 29, N 1, 113-115

(см PH₂ III)
(англ.)

0265 ДИК

243 243 = 251

ВИНИТИ

50730.9091

Ph, Ch, TC

96201

PF₂

1975

*4-9510

Kendrick J., Hillier I.H., Guest M.F.
The calculation of hyperfine coupling
constants of NF₂ and PF₂ by UHF and
CI methods. "Chem. Phys. Lett.", 1975,
33, N 1, 173-175

(англ.)

0422 пик

ВИНИТИ

383 383

F_3 , PF_2 , PF (7) XIII 2933 1975

Torgerson D.F., Westmore J.B.,
Can. J. Chem., 1975, 53 (6), 933-8.

Energetics of the ionization and
fragmentation of phosphorus tri-
fluoride by electron impact.

A. 1975. 83 N2. 20501f.

HO (P)

5

70317.1506

34469

1976

Ch, Ph, TC, MGU

PF₂

* 9-17642

Deb B.M., Bose S.K., Sen P.N.
Geometry predictions for HAB_2 and AB_5
molecules based on their highest occupied
molecular orbitals. "Indian J. Pure and
Appl. Phys.", 1976, 14, N 6, 444-452.

(англ.)

0832 FNN

793 793 823

ВИНИТИ

60604.3693

TC, Ph, Ch, MGU

96201

PF₂К.В. М.Х.
начет

1976

* 4-13897

у
Hudson A., Treweek R.F. The struc-
ture and hyperfine splittings of simple
phosphoranyl radicals. "Chem. Phys.
Lett.", 1976, 39, N 2, 248-249
(англ.)

8948-III

0529 мин

614 615

2 1

ВИНИТИ

PF₂

1977

Sondagar M. K.

curr.
work.

J. Shivaji Univ.: Sci., 1977,
17, 27-38.



(curr Cl₂O) III

PF₂

ommu 8364

1979

Hinchliffe A, et al.

kb. max.
factor

J. Mol. Spectrosc;
1979, 54, 231-8

(cur. NH₂, 14)

PF_2^+

[Оммух 13203]

1981

Harrison J. F.,

Электрон.

Структур.

J. Amer. Chem. Soc.,

1981, 103, N 25, 7406-

- 7413.

PF₂⁺

[Om. 18055]

1983

Neskovic O., Miletic M.,
et al.

(A.P.) J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1983, Pt 2, 79,
● NG, 1341-1346.

PF₂

1984

Berkowitz J., Greene J.P.,
et al.

No; J. Chem. Phys., 1984; 81,
N12, Pt2, 6166-6175.

(see  NF₃⁺; III)

PF₂

1986

(9)

106: 204576j Mass spectrometric study of PF₂ radical. Neskovic, O. M. (OOUR Inst. Hem., Belgrade, Yugoslavia). *Vestn. Slov. Kem. Drus.* 1986, 33(Suppl.), 281-2 (Serbo-Croatian). Exptl. details and the results of the study are presented. The photoionization efficiency curve of PF₂ radical was obsd. and had a structure in the vicinity of the ionization threshold. The efficiency ionization curves were obsd. of PF₂⁺ from PF₃, P₂F₄ and PF₂I with similar results. The anal. of the fine structure of ionization curves and the results were compared with those of MO calcn. of vibration energy of the PF₂ radical. The energy of the 0-0 transition was detd. i.e. the adiabatic ionization potential of PF₂ radical is 8.847 ± 0.01 eV.

G. Stoydin

C.A. 1987, 106, N24

PF₂

1986

105: 123248f The microwave spectrum of the difluorophosphorus (PF₂) radical in the $\tilde{X}^2B_1$ ground vibronic state. Saito, Shoji, Endo, Yasuki; Hirota, Eizi (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(4), 1778-84 (Eng). The microwave spectrum of the PF₂ radical in the $\tilde{X}^2B_1$ ground vibronic state was observed using a source modulation spectrometer. The radical was produced in a free-space absorption cell by a d.c. glow discharge in a mixture of PF₃ and CF₄, and 260 spectral lines were observed at 63-181 GHz and were assigned to 37 rotational transitions. The lines were least-squares analyzed to determine the rotational constants, centrifugal distortion constants, spin-rotation coupling constants with centrifugal distortion correction terms, and magnetic hyperfine coupling constants for both the P and F nuclei. The a_{iso} spin-rotation coupling constant was very small: -30.64 MHz, suggesting that excited electronic states contributing to a_{iso} are all high lying or their contributions have canceled each other. The structure of PF₂ was calculated from the observed rotational constants: $r(\text{P-F}) = 1.5792(18)$ Å and $\theta_0(\text{FPF}) = 98.48(21)^\circ$ with uncertainties in parentheses. The vibrational frequencies were estimated from the observed centrifugal distortion constants as $\omega_1 = 864(14)$, $\omega_2 = 365.3(11)$, and $\omega_3 = 848(24)$ in cm⁻¹. The T_{cc} dipolar hyperfine coupling constants for the spin density of the unpaired electron orbital to be 92.1% and 8.1% on P and each of F, respectively, whereas the a_{F} Fermi coupling constants lead to the s characters of 1.64% and 0.18% at the 2 atoms.

(MF check,
 $\tilde{X}^2B_1$)

C.A. 1986, 105, N14

PF₂

[Dm. 25948]

.1986

Saito S., Endo Y., et al.,

J. Chem. Phys., 1986,

(148 cncmp) 85, N 4, 1778-1784.

1986

PF₂

3 Б1326. Микроволновый спектр радикала PF₂ в X²B₁ основном вибронном состоянии. The microwave spectrum of the PF₂ radical in the X²B₁ ground vibronic state. Saito Shuji, Endo Yasuki, Hirota Eizi. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 4, 1778—1784 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

В обл. 63—181 ГГц измерен микроволновый спектр радикалов PF₂(X²B₁) образующихся в условиях проточного разряда постоянного тока через смесь PH₃ и CF₄ (давл. 0,01 мм). Значения (в МГц) вращат. постоянных (A, B, C), постоянных центробежного искажения (Δ_N, Δ_{NK}, Δ_K, δ_N, δ_K), постоянных спин-вращат. взаимодействия (ε_{aa}, ε_{bb}, ε_{cc}) и параметров их центробежного искажения (Δ_{N^S}, Δ_{N^SK^S}, Δ_{N^S}, δ_{N^S}): 27958,327, 9306,113, 6963,744, 1,1614·10⁻², -6,828·10⁻², 0,3849, 3,97·10⁻³, 2,013·10⁻², -30,04, 138,37, 0,46, -8,3·10⁻⁴, 7,4·10⁻³, -1,9·10⁻², -4,8·10⁻⁴. Приведены также параметры СТ-взаимодействия a_F, T_{aa}, T_{bb}, T_{cc}. Параметры r₀-структуры R₀=1,5792 Å, ∠FPF=98,48°. Оценены частоты колебаний молекулы (ω₁=864, ω₂=365,3, ω₃=848 см⁻¹). Обсужден характер связи в молекуле.

В. М. Ковба

(м.п.)

X. 1987, 19, N 3

PF₂

1986

1 Л172. Микроволновый спектр радикала PF₂ в основном вибронном состоянии X^2B_1 . The microwave spectrum of the PF₂ radical in the X^2B_1 ground vibronic state. Saito Shuji, Endo Yasuki, Hirota Eizi. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 4, 1778—1784 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

В диапазоне 63—181 ГГц исследован микроволновый спектр радикала PF₂. Идентифицированы линии 37 вращательных переходов с $N \leq 13$ и их СТС основного электронно-колебательного состояния X^2B_1 (всего 260 линий). Выполнен анализ спектра с учетом кватерного центробежного искажения, электронного спин-вращательного взаимодействия, электрон-ядерного спин-спинового взаимодействия и ферми-контактного взаимодействия для обоих ядер P и F и определены значения параметров этих взаимодействий. Из полученных значений вращательных постоянных вычислены структурные параметры ($PF=1,5792$ Å, $FPF=98,48^\circ$), а из центробежных постоянных оценены гармонические силовые коэф. и частоты колебаний PF₂. По константам СТС оценена спиновая плотность неспаренного электрона на ядрах P (92,1%) и F (8,1%). М. Р. Алиев

(м.п.)

ф. 1987, 18, N1

PF_2^+

(OM. 26577)

1987

Dyke J. M.,

молекуляр.
параметр.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt 2, 83, N1,
69-87.

FP_2^+

1988

Яковсон В. В.,

Знобича Т. С. и др.

Ж. Неорг. хим.,

с. н.

1988. 33, N 12. С. 2997-

-3000.

(сш. FN_2^+ ; III)

PF₂

1993

119: 127380e Generation of the difluorophosphino (PF₂($\tilde{A}$ ⁴A₂)) radical and assignment of the PF₂($\tilde{A}$ -X) emission spectrum. Zhao, Y.; Setaer, D. W. (Department of Chemistry, Kansas State University, Manhattan, KS 66506 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 210(4-6), 362-6 (Eng). The PF₂($\tilde{A}$ ⁴A₂) radical was generated by flowing PF₃ through a d.c. discharge using He or Ar carrier gas. The PF₂($\tilde{A}$ ⁴A₂-X ²B₁) low-resoln. emission spectrum was analyzed to obtain ν_0 , ω'_1 , ω'_2 and some anharmonic consta. The radiative lifetime of the PF₂($\tilde{A}$ ⁴A₂) state is ≥ 1.9 ns.

($\tilde{A}^4A_2 - X^2B_1$)
P_i)

C.A. 1993, 119, N 12

PF₂

1994

Austen Maggie A.,
Eriksson Leif A. et al.

теоретич. Can. J. Chem. 1994,
работам
европейск. 72(3), 695-704.

(суд.  NH₂; III)

PF₂

1994

15 Б156. Неэмпирическое исследование низколежащих электронных состояний радикала PF₂. Ab initio study of low-lying electronic states of the PF₂ radical / Cai Z. L. // J. Comput. Chem. .— 1994 .— 15 , № 3 .— С. 346—350 .— Англ.

Аннотация-
электрон-
состояния,

ab initio
расчет

X. N 15, 1996.

PF₂

1994

120: 227604v Ab initio study of low-lying electronic states of the PF₂ radical. Cai, Z. L. (Dep. Chem., East China Inst. Technol., Nanjing, Peop. Rep. China 210014). *J. Comput. Chem.* 1994, 15(3), 346-50 (Eng). The equil. geometries, excitation energies, force consts., and vibrational frequencies of the low-lying electronic states X²B₁, ²A₁, ²B₂, and ²A₂ of the PF₂ radical were calcd. at the MRSD-CI level with a double zeta plus polarization basis set. The calcd. geometry, force consts., and vibrational frequencies for the X²B₁ state are in good agreement with the available exptl. data. The electronic transition moments, oscillator strengths for the ²A₁ → X²B₁ and ²A₂ → X²B₁ transitions, and radiative lifetimes for the ²A₁ and ²A₂ states were calcd. based on the MRSD-CI wave functions.

Методом
квант. хим.
методом

С.А. 1994, 120, N 18

PF₂

1994

121: 216307v Observation of the PF₂ radical by resonance enhanced multiphoton ionization spectroscopy. Howe, J. D.; Ashfold, M. N. R.; Hudgens, J. W.; Johnson, R. D., III (Sch. Chem., Univ. Bristol, Bristol, UK BS8 1TS). *J. Chem. Phys.* 1994, 101(5), 3549-57 (Eng). The authors obsd. 9 new excited electronic states of the PF₂ radical in the wave no. range 50000-71000 cm⁻¹ via the 2 photon resonance enhancements they provide in mass resolved multiphoton ionization spectroscopy. The authors also report ab initio calcns. which yield optimized energies, geometries, and vibrational frequencies for the ground states of PF₂ and of the PF₂⁺ ion. Energetic considerations, and the observation that the frequencies of the ν_1' (sym. stretch) and ν_2' (bending) modes in these excited states closely parallel those of the ground state ion, lead one to conclude that all 9 excited states are Rydberg states belonging to series that converge to the ground state ionization limit. Polarization analyses and band contour simulations allow one to identify the electronic symmetries of the 1st 2 of these newly identified states (²B₁ and ²A₁, resp.) and to provide and est. of the excited state geometries [$r(P-F) \approx 1.49$ Å, $\angle F-P-F \approx 109^\circ$].

чекмп,
мультиметр-
параметр
 $\lambda \sim 1,49 \text{ Å}$
& FPF = 109°

C.A. 1994, 121, N 18

PF₂

1994

№ 4 Б1170. Наблюдение радикала PF₂ методом спектроскопии резонансно усиленной многофотонной ионизации. Observation of the PF₂ radical by resonance enhanced multiphoton ionization spectroscopy /Howe J. D., Ashfold M. N. R., Hudgens J. W., Johnson R. D. //J. Chem. Phys. .—1994 .—101 ,№ 5 .—С. 3549—3557 .—Англ.

Методом резонансно усиленной многофотонной (2+1)-ионизации исследованы девять новых электронных состояний радикала PF₂ в интервале энергий 50 000—71 000 см⁻¹. Радикалы получали при вз-вии атомарного фтора с форфином. Для возбуждения использовали импульсный перестраиваемый (280—400 нм) лазер на красителе с удвоением частоты. Все состояния являются ридберговыми по характеру и принадлежат сериям сходящимся к первому пределу ионизации. Положение начал переходов (ν_0), значения частот колебаний ω_1 и ω_2 и др. колебат. постоянных (в см⁻¹) в возбужденных электронных состояниях: $\tilde{E}^2B_1$: 51 932, 1016, 408,

М.А.

X.1995, № 4

$x_{11} = -3,5$, $x_{12} = -2,6$; $F'A_1$: 55 126, 1008; G : 58 184, 998;
 H : 60 962, 1004; I : 65 958, 980, 365, $x_{11} = -2$, $x_{12} = -6,6$,
 $x_{22} = 1,5$; J : 66 118, 981, 366, $x_{11} = -6$, $x_{12} = -4,5$; K : 66 763,
 956, 364; L : 67 922, 956, 358; M : 68 505, 972, 345, $x_{12} =$
 $= 6,2$. Семь состояний не отнесены по симметрии. Для
 радикала PF_2 и иона PF_2^+ в основных электронных со-
 стояниях выполнены неэмпирич. расчеты геометрич.
 структуры и частот колебаний: для PF_2 ($\tilde{X}$) $r_e = 1,613$ Å,
 $\angle FPF = 98,7^\circ$, $\omega_1 = 874$, $\omega_2 = 343$, $\omega_3 = 874$ см $^{-1}$; потен-
 циал ионизации 8,77 эВ; для PF_2^+ ($\tilde{X}$) соотв. 1,536 Å, 102,2°,
 1006, 384 и 1058 см $^{-1}$. Для двух первых возбужден-
 ных состояний $\tilde{E}$ и $\tilde{F}$ оценены $r(P-F)$ и $\angle FPF$, соотв.
 1,49 Å и 109°.

В. М. Ковба



1994



набл. в работе
[Ch. Ph. Lett, 1993,
210, 362] ссыл.
сва. с B₂, а
не Y₂.

Johnson R.D (III), Irikura K.K.

Chem. Phys. Lett., 1994, 228, 51, 2, 3, 273-78

Excited electronic states of PF₂

Тер. равнов. энергии возб. состояний
ниже 40000 см⁻¹ (²A₁ 15748; ²B₂ 21791,
⁴B₁ 27528, ²A₁ 40304, ²B₁ 41596 см⁻¹.
⁴A₂ 46879 см⁻¹ (±1500 см⁻¹ по отношению
к аксири, поэтому) Рассчитаны также
расчет координаты P_z.

PF₂

1994

17 5193. Возбужденные электронные состояния PF₂.
Excited electronic states of PF₂ / Johnson Russell D. (III),
Irikura Karl K. // Chem. Phys. Lett. — 1994. — 228, №
1—3. — С. 273—278. — Англ.

Методом теории возмущений второго порядка в полном активном пространстве с использованием атомных натуральных орбиталей рассчитаны энергии возбужденных электронных состояний PF₂ в области до 40 000 см⁻¹. Получены следующие положения уровней (и их симметрия): 15798 (²A₁), 21791 (²B₂), 27528 (⁴B₁), 40304 (²A₁), 41596 (²B₁) и 46879 (⁴A₂) см⁻¹. Авторы предполагают, что рассчитанные значения энергии не будут отличаться от эксперим. величин более, чем на 1500 см⁻¹. Подтверждением последнему могут служить полученные, недавно спектроскопич. данные, свидетельствующие о том, что излучающим состоянием PF₂ является состояние ²B₂, но не ⁴A₂.
Н. С.

М.П.

Х. 1995, N 17

PF₂

1994

121: 310539u Excited electronic states of PF₂. Johnso, Russell D. III II; Irikura, Karl K. (Chemical Kinetics and Thermodynamics Division, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD 20899 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 228(1,2,3), 273-8 (Eng). The energies of the states below 40000 cm⁻¹ have been calcd. at the CASPT2(3, 8)/ANO level. The symmetry assignments and energies at this level are: ²A₁ 15798 cm⁻¹, ²B₂ 21791 cm⁻¹, ⁴B₁ 27528 cm⁻¹, ²A₁ 40304 cm⁻¹, ²B₁ 41596 cm⁻¹, and ⁴A₂ 46879 cm⁻¹. We expect these energies to be within 1500 cm⁻¹ of exptl. detd. energies. These results suggest that the emitting state found in a recent spectroscopic study of PF₂ (*Chem. Phys. Letters* 210 (1993) 362) is not the ⁴A₂ state but the ²B₂ state.

lossy ang.
in. COCM.

$T_e < 40000 \text{ cm}^{-1}$

meop. packet

C.A. 1994, 121, N 26

PF_2, PF_2^+

теор. расчёт
эксп. воз.
состояний

Latifzadeh L., Balasubramanian K.,
Chem. Phys. Lett. 1994, 228, 463-70.
Electronic states of PF_2 and PF_2^+ .

1994

PF_2

PF_2^+

М.П.

1994

→ 17 Б194. Электронные состояния PF_2 и PF_2^+ . Electronic states of PF_2 and PF_2^+ / Latifzadeh Lida, Balasubramanian K. // Chem. Phys. Lett. — 1994 — 228, № 4—5 — С. 463—470 — Англ.

Методами ССП в полном активном пространстве (ССП ПАП) и конфигурац. вз-вия по отношению к нескольким исходным конфигурациям с учетом одно- и двукратных возбуждений (КВ НИК ОД) исследованы основные и возбужденные электронные состояния PF_2 и PF_2^+ . Используются два типа базисов — расширенные базисы с учетом всех электронов и валентные базисы с релятивистскими эффективными остоновыми потенциалами. Для связанных состояний определены спектроскопич. св-ва. Энергии диссоциации $PF-F$ получены в рамках квадратичного метода конфигурац. вз-вия и приближений ССП ПАП и КВ НИК ОД. Библ. 42. Н. С.

Х. 1995, М 17

PF₂
PF₂⁺

1994

ОК. и НУЖНО
БОЖ. СОСМ.
МЕОПЕМ. ПАС
ЗЕМ, ДО

121: 238676s Electronic states of PF₂ and PF₂⁺. Latifzadeh, Lida; Balasubramanian, K. (Department of Chemistry and Biochemistry, Arizona State University, Tempe, AZ 85287-1604 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 228(4-5), 463-70 (Eng). The ground and excited electronic states of PF₂ and PF₂⁺ have been investigated using the complete active space SCF (CASSCF) followed by multi-ref. singles and doubles CI (MRSDCI) methods that include up to 1.2 million configurations. These states include X²B₁, ⁴A₂, ²A₁(I), ²A₁(II), ²A₂, ²B₂(I), ²B₂(II), ⁴B₁, ²B₁(II) for PF₂ and ¹A₁, ²B₁, ¹B₁ for PF₂⁺. Both all-electron computations employing large basis sets and relativistic effective core potentials using valence basis sets were carried out. The spectroscopic properties were detd. for the bound states. The dissocn. energy of PF-F is obtained using the full second-order CI (SOC) and CASSCF/MRSDCI methods.

С.А. 1994, 121, ~20

PF₂⁺

(om. 38399)

1996

Youngsland Park and

побережье. R. Claude Woods,

побережье.

гггггггг, g. Chem. Phys., 1996,

м.п. 104, N14, 5547...

Accepted plus ten callen -
cations or the potential

energy surfaces and spectro-
scopic constants of LiF_2 ,
 PF_2^+ , SO_2 , PO_2^- , and ClO_2^+ .

PF₂

9,39171

1997

133: 10568v HeI photoelectron spectra of PH₂ and PF₂: comparison between simulation and experiment. Chau, Foo-Tim; Dyke, John M.; Lee, Edmond P. F.; Ridha, Abed; Wang, De-Chao (The Hong Kong Polytechnic University, Kowloon, Hong Kong). *Chem. Phys.* 1997, 224(2,3), 157-173 (Eng), Elsevier Science B.V. Correction of CA 128: 133992h. MO calcns. on PH₂ and PF₂ and some of their low-lying cationic states, followed by Franck-Condon calcns., were performed with the objective of simulating HeI photoelectron bands of these radicals. The MO calcns. involved MP2 and CCSD(T) geometry optimization and frequency calcns., with basis sets of size up to 6-311G(3df,2p), and as

meop. param,
geom. calc,
J

(+) PH₂ Δ

C.A. 2000, 133, N1.

well as G1/G2 calcns. Franck-Condon simulations of photoelectron bands were performed using force consts. derived from the ab initio calcns. Based on comparison between simulated and obsd. spectra, the 1st adiabatic ionization energy of PH_2 was confirmed as (9.84 ± 0.01) eV and the lowest singlet-triplet sepn. in PH_2^+ ($^1\text{A}_1 - ^3\text{B}_1$) was deduced as (0.78 ± 0.04) eV. Also, the 1st adiabatic ionization energy of PF_2 , corresponding to the ionization $\text{PF}_2^+ \ ^1\text{A}_1 \leftarrow \text{PF}_2 \ ^2\text{B}_1$, was established as (8.84 ± 0.01) eV. The vibrational structure obsd. in the 1st band of PF_2^+ was assigned to excitation of the sym. stretching mode (ν_1) in PF_2^+ (X^1A_1) and the vibrational structure obsd. in the 2nd band of PH_2 was assigned to excitation of the deformation mode (ν_2) in PH_2 (a^3B_1).

PF₂

1997

Nguyen M. T., Greve S.,
et al.

констант.
сверхтонкого
расщеплен.,
и. п.

Mol. Phys. 1997,
91 (3), 537 - 550.

(● PH; III)

PF₂

(Om 39158)

1998

Jiande Gu, Kaixian Chen
et al.,

(Ac)

J. Chem. Phys., 1998,
108 (3), 1050 - 1054.

PF_2^+

Lugez, C. d., et al; 1998

Ni ,
ab initio
lek cherny
J. Chem. Phys. 1998,
108 (20), 8381-93

(all- PF_4^+ , • III)

PF₂

1999

Jursic, B.S.

THEOCHEM 1999, 465 (2-3),
193-196

(J, Ae)

(all. PF, III)

PF₂

(Dm. 40280)

2000

Justic B.S.

Y, Ae

g. Nat. Struct (Theochem),
2000, 507, 11-16.