

PN
PN⁺, PN⁻

PN

Сирру Г., Herzberg L.,
Herzberg H.

1933

III-2566

У. Chem. Phys., 1, 749

Спектроскопическое доказ-во
существования моит-лы
PN

PN; Γ .; ΔH_f^o *Bp-1739-III*

1933

Curry, Herzberg and Herzberg
2.Z.Physik 86, 348 (1933)

Circ.500

 EOT 2 2

10 *ca*

g

PN

Ghosh P. N., Datta A. S. 1939

Z. Physik, 1934, 87, 500-4.

34.133

PN

1939

Mouren H., Rosen B.,
Webroff G.,

Compt. Rend., 1939, 209, 207.

Через нуклоны -

${}^1\text{F} \rightarrow {}^1\Sigma$ переход

${}^1\Sigma$ -сеп. coef.

PN

Tanaka Y.,

1942

Sci. Pap. Inst. phys.-chem. Res.,
Tokyo, 1942, 39, 156-64.

un. Zeise H.

42.78.

Z. Elektrochem., 1942, 48, 476-509.

7

42.73

PN

Barrow R.F.

1944

Proc. phys. Soc. London,
1944, 56, 211-2.

4425. 8 gues

PN

Хасрман и др.
Нитфман Е.О. и др.

1954

УАСЗ, 1954, 76, №24, 6239-3

D₀

Синтез нитридов фторфора

[Энергия диссоциации PN
D₀ = 7,1 ± 0,05 eV]

PN

Margrave G.L.,
Staphitanonda P.

1955

J. Phys. Chem., 59, N12, 1231

Do

Газообразные нитриды
металлов. I. Теоретическое рас-
четы энергии диссоци-
ации двухатомных
нитридов.

● (Cu. SiN.) III

III - 1256

1955

W_e (PN, AsN, SbN, NaLi, FrLi, FrNa, RbK, CsK,
FrK, FrRb, FrCs, PbC, BiN, AsP, SbP, BiP,
SbAs, BiAs, PoO, SeS, TeS, PoS, PoSe, PoTe,
AtCl, AtBr, AtI, F₂)

Mitra S. S.

Z. Phys., 1955, 140, 45, 531-534 (нем.)

+0

Grundschwingungen von zweiatomigen Molekülen

20

РЖХим 1955, 3166

Есть гр. к.

PN

Bb-5351-IV

1957

Alec H. Schen

Ann Rev. Phys. Chem.

(70)

1957, 8, 439.

• Can Be D

PN

Potter R. L. DiStefano V. N. ⁸⁶¹

(25)

J. Phys. Chem., 1961, 65, 899

Парамагнитное оми
нимо, его соединения газора

PN

ВФ - 2974-III

1963

7 Б100: Об эмиссии PN и PO в реакциях PCl_3 и PCl_5 с атомарным азотом. Guenebaut Henri, Pascat Bernard, Couet Claude, Marsigny Louis. Sur les émissions de PN et PO dans les réactions de PCl_3 et PCl_5 avec l'azote atomique. «C. r. Acad. sci», 1963, 257, № 1, 135—138 (франц.)

PCl_3 и PCl_5 дают с атомарным азотом люминесценцию серо-фиолетового цвета. Анализ спектра продукта реакции PCl_3 с атомарным азотом позволил обнаружить ранее наблюдаемый радикал $\text{PN}({}^1\Pi - {}^1\Sigma^+)$. Получены также новые характеристики радикала $\text{PO}({}^2\Sigma - {}^2\Pi)$:

Е. Матросов

X. 1964. 4

1963

Bq-2974-III

PN and PO emissions in the reactions of PCl_3 and PCl_2 with atomic nitrogen. Henri Guenebaut, Bernard Pascat, Claude Couet, and Louis Marsigny (Fac. Sci., Reims, France). *Compt. Rend.* 257(I), 135-8(1963); cf. *CA* 58, 9857h; 59, 209g. A violet-gray luminescence was observed in these reactions. Spectral analysis data of $\text{PN}(^1\pi - ^1\Sigma^+)$ in the region 2304.7-3092.93 Å. and of $\text{PO}(^2\Sigma - ^2\pi a)$ in the region 3198-3498 Å. are given.

BGJF

C.A. 1963. 59. 7
7086 d

$\text{Cl}_5 \cdot \text{AlCl}_3$, $\text{PCl}_5 \cdot \text{SbCl}_5$; $\text{TeCl}_4 \cdot \text{PCl}_5$
 $\text{Cl}_5 \cdot \text{BCl}_3$, $\text{SeCl}_4 \cdot \text{PCl}_5$; (Di) V 5948 1966

Gerding H., Dinker J.C.,
Rev. Chim. Miner., 1966; 3(4),

815-29

с в-ак в смес
в арг ес

10

ca 67

A - 1440. 10, 11, 12, 13 Aug. 1966

O_2 ; MF; HCl; HBr; SO; N_2 ; P_2 ;

PN; Li; LiM; Na_2 ; NaM; NM;

(all: norm., reg 2nd am. molec.)

Schwedeman R.N.,

J. Chem. Phys, 1966, 44(2), 556-61

Proc Phys, 1966, 5

8D110

10

M 1636a-III

1966

MOJ. num., (P₂, PN, SiN, NBr, BaO, BeF, SiF,
no. num. Numb
Do SnF)

Singh Ran B., Rai D.K.
Indian J. Pure and Appl. Phys., 1966, 4,
N 3, 102-105

Potential curves for some diatomic
molecules, P₂, PN, SiN, NBr, Bao, BeF,
SiF, and SnF

J

F

PF., 1966, 11D58

PN

A-1443.

1967

(we)

Goodfriend P. L.,

Canad. J. Phys., 1967, 45,
N10, 3425-27.

PN

Oscar Manuel Uy 1967

Diss. Abstr. B28, N6,
2831' — ,

Do

PN

Термиз диссоциации
и другие термодина-
мические св-ва, изучен-
ные при испарении
метил-га. бромида
(ср. PN) I

LiF, BeO, BF, CO, MgO, AlF, SiO, 1967
P.N, CaO, SrO, KCN, FHF⁻, CO₂
N₂O, OCN⁻, FCN, SCO, SCN⁻, ClCN,
FO:CH, NCO:CH (D_o) IX-3235

Yoshimine M. McLean A.D.,
Int. J. Quantum Chem., Symp., 1967,
No 1, 313-26.
10 24

PN

Yoshimine M.,
McLean A. D.

1967

D₀

Int. J. Quantum Chem.,
Syrup. 1967 (N 1)

(see. LiF) III



PN

BGP- A 1158

1968

Empedocles P.

coll.
noem.

Theor. chim Acta 1968, 10 (4)
331-6

PN

(D.)

8 III

Уч. О. М., Kohl F. J.,
Carlson K. D.

1968

J. Phys. Chem.
72, N5, 1611

Энергия диссоциации PN
и другие термодинами-
ческие св-ва, найденные
при измерении P_3N_5 .



(см. P-N) I

PN

number 4636 1969

Gingerich R.A.

J. Phys. Chem., 1969,

73, 18, 2434

D_{00}° ,

$D_0^{\circ}; \Delta H_f$

(Cell. P₂) III

1970

Ив. Мер,
район
мол-в
РН

22 Б45. Распределение электронной плотности в молекулах, содержащих элементы третьего периода, по методу самосогласованного поля. Boyd Donald B. Self-consistent field electron distributions in molecules with second-row elements. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 9, 4846—4857 (англ.)

Построены карты электронной плотности для молекул PN , P_2 , MgO , PO , PO^- , $\text{PO}_2\text{-SO}$, SiH_4 , PH_3 и H_2S с использованием волновых функций, полученных по методу ССП МО ЛКАО. Дифференциальные карты (на к-рых построены разности молек. и суммы атомных плотностей) использованы для сравнения молек. распределения заряда с атомными плотностями. Между полными плотнос-

X. 1970. 22

(+9) X

тями, полученными в миним. базисе и в почти хартри-
фовском расчете, имеются колич. расхождения, одна-
ко дифференциальные карты оказываются похожими в
обоих методах, если атомные и молек. волновые функ-
ции берутся из расчетов одного и того же типа. Добав-
ление к миним. базису $3d$ -АО тяжелых атомов повы-
шает электронную плотность в области связи. Обсужда-
ются оптим. параметры для $3d$ -АО.

По резюме

1970

[NP(N)₂]₃

(58865e) Preparation and ir spectrum of triphosphonitrilo-hexaazide, (NP(N₃)₂)₃. Rauchle, F.; Gayoso, M. (Inst. Quim. Inorg., C.S.I.C., Madrid, Spain). *An. Fis.* 1970, 66(7-8), 241-5 (Span). P₃N₂₁ was prepd. by the method of Grundmann and Raetz (with some variations), and the ir spectrum was obtained. In the assignment of the ir bands, it is assumed that the mol. has symmetry D_{3h} . The vibrations of the azide groups, the ring, and the NPN groups are considered sep. M. A. Spinnler

uk-chemp,

exp-pa

III

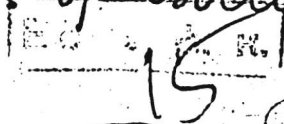
C. A. 1971. 74. 12.

CP; SiN; CO; N₂; CS; PN; SiO; P₂; SiS. 1970
(XIII 1262) (Кривые потенциальной энергии) 1314

Szőke S.; Vajna Z.; Jalsóvszky G.

Acta Chim. (Budapest) 1970, 63 (1), 59-66

Potential and electron energy
curves of isoelectronic molecules.



CP 10



CA, 1970, 72, N10, 47562m

X 5255 Pacet. revu. comp-pa ($\text{Li}_2, \text{B}_2,$
 $\text{C}_2, \text{N}_2, \text{O}_2, \text{F}_2, \text{CO}, \text{PN}, \text{P}_2, \text{CS}, \text{SiO}, \text{LiF},$
 $\text{HCl}, \text{NaF}, \text{NaCl}, \text{LiNa}, \text{Na}_2$) 1971

Chu San Y. Frost A. S.,

J. Chem. Phys., 1971, 54, Na,
764-68

10

ppp 1971

PN

XIII - 1446

1971

M. N.

56439r Molecular beam electric resonance spectrum of phosphorus nitride. Raymonda, John; Klemperer, William, (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1971, 55(1), 232-3 (Eng). The radio-frequency spectrum of PN is reported. The hyperfine-structure consts. of the 1st 3 vibrational states are fitted by μ_v (elec. dipole moment) = $2.7511 - 0.0086(v + 1/2) \pm 0.0006$ D, $(eqQ)_N$ (quadrupole coupling const.) = $-5172.8 + 60.7(v + 1/2) \pm 0.5$ kHz, $C_P = -78.2 \pm 0.5$ kHz, and $C_N = 10.4 \pm 0.5$ kHz.

C.A. 1971. 45 8

PN

XIII - 1476

1971

24 Б329. Спектр электрического резонанса. $P^{31}N^{14}$ в молекулярном пучке. Raymond John, Klemperer William. Molecular beam electric resonance spectrum of $P^{31}N^{14}$. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 1, 232—233 (англ.)

Исследован спектр электр. резонанса молекулы $P^{31}N^{14}$ полученной при термич. распаде P_3N_5 . Идентифицированы линии с $\Delta|M_I|=1$, $\Delta J=0$, $J=1$ и $V=0$; 1 и 2. Определены постоянные магнитной CTC (C_P, C_N) и зависимости дипольного момента μ и постоянной квадрупольного взаимодействия eqQ от колебательного состояния: $C_P=78,2 \pm 0,5$ кГц, $C_N=10,4 \pm 0,5$ кГц, $\mu_v = 2,7511 - 0,0086 (V+1/2) \pm 0,0006 D$, $(eqQ_N)_v = -5172,8 + 60,7 (V+1/2) \pm 0,5$ кГц. М. Р. Алиев

ш.п.

X. 1971.24

PN

XIII - 1476

1971

(Д232) Спектр электрического резонанса $^{31}\text{P}^{14}\text{N}$ в молекулярном пучке. Raymond A. John, Klemperer, William. Molecular beam electric resonance spectrum of $^{31}\text{P}^{14}\text{N}$. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 1, 232—233 (англ.)

Исследован спектр электр. резонанса молекулы $^{31}\text{P}^{14}\text{N}$, полученной при термич. распаде P_3N_5 . Идентифицированы линии с $\Delta|M_J|=1$, $\Delta J=0$ и 1 и $v=0$, 1 и 2. Определены постоянные магнитной сверхтонкой структуры C_P и C_N и зависимости дипольного момента (μ_v) и постоянной квадрупольной связи от колебательного состояния: $C_P = -78,2 \pm 0,5$ кГц, $C_N = 10,4 \pm 0,5$ кГц, $\mu_v = 2,7511 - 0,0086 (v + 1/2) \pm 0,0006$ ед. Дебая, $(eqQ)_N = -5172,8 + 60,7 (v + 1/2) \pm 0,5$ кГц. В. Л. С.

спектр

9, 1972, 12

PN

XIII - 1998

1971

8 B25. Вычисление межъядерных расстояний из интенсивности электронно-колебательных полос. Witschel W. Internuclear distances from estimated spectroscopic intensities. «Z. Phys. Chem.» (BRD), 1971, 76, № 1—2, 57—60 (англ.)

С использованием аналитич. выражений для факторов Франка—Кондона, полученных методом возмущений с учетом аугармоничности потенциальной энергии, из относит. интенсивности полос перехода $A^1\Sigma - X^1\Sigma$ молекулы PN вычислено межъядерное расстояние $P-N$ в возбужденном состоянии $A^1\Sigma$. Показано, что погрешность метода не превышает 2%. М. Р. Алиев

Ze

X. 1972.8

PN

XIII - 2148

1972.

144615s Composition of phosphorus oxynitride vapor. Gordienko, S. P.; Millers, T.; Serebryakova, T. I.; Fenochka, B. V.; Baltkaula, A (Inst. Probl. Materialoved., Kiev, USSR). *Latv. PSR Zinat. Akad. Vestis, Kim. Ser.* 1972, (4), 400-1 (Russ). Mass-spectrometric studies of PON were made at 905°-1225°K. N^+ , N_2^+ , P^+ , PN^+ , P_2^+ , P_4^+ , and $P_4O_{6-10}^+$ were found in the

spectra. PN , N_2 , P_2 , and P_4O_{10} are the main components of the vapor phase, while the compn. of the solid PON remains unchanged after vaporization. The dissocn. energy of PN mol. is 160.1 kcal/mole.
W. Brzostowski

(70°)
C.A. 1972. 77. N22.

PN

9 Д449. Вращательный спектр молекулы PN. Hoff J., Tiemann E., Törring T. Rotationsspektrum des PN. «Z. Naturforsch.», 1972, 27a, № 4, 703—704 (нем.)

Исследованы переходы между вращательными состояниями молекулы PN, $J=0 \rightarrow 1$ в области частот 46—47 ГГц. Молекулы PN в основном $v=0$ и первом возбуждении $v=1$ колебательном состоянии получались испарением P_3N_5 в танталовой печи при t -рах 1000—1100°С и 1100—1400°С соответственно. Измеренные частоты вращательных переходов использованы для определения молекулярных констант молекулы PN. Используемый метод дает возможность определять константы враща-

тельных переходов молекулы с точностью, более чем на два порядка превышающей ранее достигнутую при определении аналогичных констант из наблюдения оптич. спектров. Библ. 5. А. П.

(м.п.)

1972

81008-2018

XIII

Ф. 1972. 92.

PN

XIII - 248

1982

40977v Rotational spectrum of phosphorus nitride (PN).
Hoeft, J.; Tiemann, E.; Toerring, T. (II. Phys. Inst., Freie
Univ. Berlin, Berlin, Ger.). *Z. Naturforsch. A* 1972, 27(4),
703-4 (Ger). The rotational spectrum of PN was studied by
using a mol. beam microwave spectrometer. The frequencies of
the $J = 0 \rightarrow 1$ transition of $^{31}\text{P}^{14}\text{N}$ were 46,989.017-46,992.862
MHz for $v = 0$ and 46,656.324-46,657.845 MHz for $v = 1$. The
mol. consts. were reported and the elec. dipole moment was $\mu =$
2.7470, 2.7385, and 2.7299 D for $v = 0, 1$, and 2, resp.

M.N.

C.A. 1982. 77.6

PN

XIII - 2048

1982

18 Б239. Вращательный спектр молекулы PN. Hoff J., Tiemann E., Törring T. Rotationsspektrum des PN. «Z. Naturforsch.», 1972, 27a, № 4, 703—704 (нем.)

Измерены частоты 5 линий квадрупольной сверхтонкой структуры вращательного перехода $I=0 \rightarrow 1$ молекулы PN в основном и 1-м возбужденном колебательном состоянии, из к-рых с привлечением лит. данных вычислены эффективные значения вращательной постоянной ($B_0 = 23578,1394$ Мгц), постоянной центробежного искажения ($D_0 = 32,624$ Мгц), постоянной колебательно-вращательного взаимодействия ($\alpha_0 = 166,356$ Мгц). Дипольный момент μ_e и межъядерное расстояние r_e равны: $\mu_e = 2,7513 D$, $r_e = 1,4908 \text{ \AA}$. М. Р. Алиев

м.ч.

X. 1982. 20¹⁸

O_2, Br_2, N_2, PN, P_2 (p-уни numbers.) 1972
Stoke S., $\bar{x} 3084$

Acta Chim. (Budapest), 1972, 71, N2,
231-8 (ann.)

5-5

Semiempirical method for constructing potential energy functions of diatomic molecules.

10



CA, 1972, 76, N20, 1177-164

РН

XIII - 2221

1972

17Б161. Вращательный спектр в миллиметровой области и молекулярные постоянные $P^{31}N^{14}$. Wyse F. C., Manson E. L., Gordy W. Millimeter wave rotational spectrum and molecular constants of $^{31}P^{14}N$. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 3, 1106—1108 (англ.)

С использованием МВ-спектрометра с высокоточной ячейкой поглощения исследован вращательный спектр $P^{31}N^{14}$ (I), образующегося при термич. разложении P_3N_5 при 670—800°. Найдены вращательные переходы I в области ~93 300—376 000 МГц ($1 \leq J \leq 8$) в колебательных состояниях $v=0, 1, 2, 3, 4$. Из анализа МВ-данных с использованием ф-лы Данхема определены коэф. Данхема для I: $Y_{01}=23\,578,240 \pm 0,011$, $Y_{11}=-165,976 \pm 0,018$, $Y_{21}=-0,192 \pm 0,009$ МГц, $Y_{31}=-7,6 \pm 0,13$, $Y_{02}=-32,70 \pm 0,08$ КГц. Из этих постоянных вы-

м.п.

X. 1973 № 1.

числены равновесные молек. постоянные I: $B_e = 23578,34 \pm 0,08$ МГц, $\omega_e = 1335,6 \pm 0,15$, $\omega_e X_e = 6,5 \pm \pm 0,5$ см⁻¹, $r_e = 1,49086 \pm 0,00002$ А. Определены коэф. в разложении потенциальной функции Данхема $V(\xi) = hca_0\xi^2(1 + a_1\xi + a_2\xi^2 + a_3\xi^3 + \dots)$, где $\xi = (r - r_e)/r_e$, для I: $a_0 = (5,670 \pm 0,011) \times 10^5$ см⁻¹, $a_1 = -2,992 \pm 0,002$, $a_2 = 5,7 \pm 0,4$, $a_3 = -10 \pm 3$. Уточнено значение дипольного момента I: $\mu = 2,7514 - 0,008$ ($\nu + 1/2$) $\pm 0,0006$ D.

А. П. Александров

PN

XIII - 2221

1942

(u.n.)

81683q Millimeter wave rotational spectrum and molecular constants of phosphorus-31 nitride. Wyse, F. C.; Manson, E. L.; Gordy, W. (Dep. Phys., Duke Univ., Durham, N.C.). *J. Chem. Phys.* 1972, 57(3), 1106-8 (Eng). The rotational spectrum of diat. PN was measured in the mm and submm wave regions by use of a high temp., microwave spectrometer. Transitions were obsd. in 5 different vibrational states. From anal. of the data the following Dunham coeffs. are obtained: $Y_{01} = 23,578.240(11)$ MHz, $Y_{11} = -165.976(18)$ MHz, $Y_{21} = -0.192(9)$ MHz, $Y_{31} = -7.6(13)$ kHz, and $Y_{02} = -32.70(8)$ kHz. The Dunham potential consts. were: $a_0 = 5.670(11) \times 10^5$ cm⁻¹, $a_1 = -2.992(2)$, $a_2 = 5.7(4)$, and $a_3 = -10(3)$. The equil. internuclear distance is $r_e = 1.49086(2)$ Å.

C.A. 1942. 44. 12

PN

1973

16 Б146. Спектры флуоресценции PN и BF. Moeller Michael B., Silvers Stuart J. Fluorescence spectra of PN and BF. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 19, № 1, 78—81 (англ.)

Получена резонансная флуоресценция (Ф) молекул PN и BF. Исследуемые молекулы получались в микроволновом разряде через смеси $\text{PCl}_3 + \text{N}_2$ и $\text{BF}_3 + \text{He}$, соответственно. Продукты разряда прокачивались через флуоресцентную ячейку. Ф возбуждалась светом разрядных ламп, наполненных такими же смесями. Показано, что время жизни PN и BF в потоке не менее 0,2 сек. В спектре PN измерены относит. интенсивности полос. Вычисленные из них факторы Франка — Кондона хорошо согласуются с рассчитанными теоретически. Д. И. Катаев

спектры
(7ми)

x. 1973 N 16

(+1) ☒

PN

1973

130056u Fluorescence spectra of phosphorus nitride (PN) and boron fluoride (BF). Moeller, Michael B.; Silvers, Stuart L. (Dep. Chem., Univ. Pennsylvania, Philadelphia, Pa.). *Chem. Phys. Lett.* 1973, 19(1), 78-81 (Eng). Resonance fluorescence was obsd. from diat. PN and BF. The species were produced in a microwave discharge and flowed into a fluorescence cell. Vibronic transition probabilities for PN are reported and compared with calcd. Franck-Condon factors.

Cueing

C.A. 1973. 78 N 20

(+1)

BF

⊗

PJN

B 9p-1-X

1974.

Anderson A.B., Hoffman R.,

J. Stat. Phys., 1974, 60, ^{N-11} 4271-3.

номени. кривое

(см. Lit; III)

PN

1974

Lovas F.J., et al.

J. Phys. and Chem. Ref. Data,
1974, 3, 609-769.

M.N.

(em. Bao; iii)

PN

1975

checkp

17913m Hanle effect measurement of the lifetime of the A^{11} state of phosphorus nitride. Moeller, Michael B.; McKeever, Mark R.; Silvers, Stuart J. (Dep. Chem., Univ. Pennsylvania, Philadelphia, Pa.). *Chem. Phys. Lett.*: 1975, 31(2), 398-400 (Eng). Hanle effect spectra were obsd. for the A^{11} state of PN. PN was generated in a microwave discharge and flowed into a fluorescence cell where it is optically excited by a PN emission lamp. The Hanle effect signal for the $v' = 0$ band is fitted to a calcd. signal, detg. a radiative lifetime for the band of 227 ± 70 nsec.

C.A. 1975. 83 N2

*4-10550

1975

PN

(3 Д336.) Фотоэлектронная спектроскопия нестабильных частиц: молекула PN. Wu M., Fehlnert T. P. Photoelectron spectroscopy of unstable species. The PN molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1975; 36, № 1; 114—116 (англ.)

Получен He I фотоэлектронный спектр молекул PN, полученных испарением P_3N_5 в вакууме при $T \approx 1100^\circ K$. Обнаружены и идентифицированы 4 полосы с вертикальными потенциалами ионизации (в эв): $X^2\Sigma_g^+ - 11,85$, $A^2\Pi_u - 12,52$, $B^2\Sigma_u^+ - 15,8$, $C^2\Sigma_u^+ - 16,7$. В первой полосе обнаружена колебательная структура с $\nu = 1200 \text{ см}^{-1}$, во второй — с $\nu = 1050 \text{ см}^{-1}$. Фотоэлектронные спектры CN и N_2 сходны. Как и в случае N_2 , теорема Купманса для PN не выполняется. Библ. 18.

Ю. В. Чижов

фотоэлектронный
(у) спектр

XIII-3228

X 1976 X3



(+1)

м.с.

ХУ-10550

1975

РН

4 Б149. Фотоэлектронная спектроскопия нестабильных соединений. Молекула РН. Wu M., Fehlner T. P. Photoelectron spectroscopy of unstable species. The PN molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 36, № 1, 114—116 (англ.)

Изучен возбуждаемый излучением He-I, фотоэлектронный спектр молекул РН, полученных при испарении P_3N_5 при t -ре 1100 К с послед. очисткой от N_2 . В спектре наблюдается два четких максимума с энергией 11,85 и 12,52 эв, к-рые отнесены к σ - и π -уровням молекулы РН. Последняя полоса имеет колебательную структуру с $\omega = 1200 \text{ см}^{-1}$. Так как это значение меньше, чем $\omega = 1336 \text{ см}^{-1}$ в свободной молекуле РН, то сделан вывод, что π -уровень носит связывающий характер. В спектре наблюдаются также очень слабые максимумы с энергией 15,8 и 16,7 эв, к-рые также могут относиться к молекуле РН, однако не исключено, что они связаны с наличием небольшого количества молекул N_2 . В. И. Н.

фотоэлектронный
спектр.

X 1976 N 4

3228

XIII

PN

*45-10550
XIII-3228

1975

гемесл.
спектр.

211122t Photoelectron spectroscopy of unstable species.
Phosphorus nitride (PN) molecule. Wu, M.; Fehlner, T. P.
(Dep. Chem., Univ. Notre Dame, Notre Dame, Indiana).
Chem. Phys. Lett. 1975, 36(1), 114-16 (Eng). The He(I)
photoelectron spectrum of the PN mol., produced by the
vaporization of P_3N_5 at $1100^\circ K$, was recorded. The assignment
of the obsd. bands on the basis of vibrational fine structure
indicates that this mol. constitutes another example of the qual.
failure of Koopmans' theorem.

C.A. 1975-83 N26

РН
(ННР)+ } (расчет м.и.) 1976

XIII-3497
Борисов В.В., Корниченко В.А.,
ис. доц. химии, 1976, 50, № 4, 977-979

Электронное строение РН 4 карбона
(ННР)+

Ис. Хим., 1976, 17556

10

Есть оригинал

Р.у.
Ис.

PN

1976

Grover M., et al.

Adv. Atom. and Mol. Phys.
Vol. 12. New York e.a., 1976,
165-213

сбор:
опытская
карта

70311.2137

Ph, DB, TC

25065

PN (u.n.)

OTT.

1976

4938

Gordy W. Spektroskopie v daleké
infráčervené oblasti s použitím mikrovln-
né techniky. "Chem. listy", 1976, 70,
N12, 1244-1260 (чеш., рез.англ.)

0832 лнк

788 789 823

ВИНИТИ

PN

offuck 5758

1977

SiS

P₃N₃

Si₂S₂

88: 96810e The matrix infrared spectrum of phosphorus nitride and silicon sulfide. Atkins, Robert M.; Timms, Peter L. (Sch. Chem., Univ. Bristol, Bristol, Engl.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1977, 33A(9), 853-7 (Eng). PN and SiS, prepd. by heating P₃N₅ and reacting CS₂ with Si, resp., were trapped in Kr matrixes at 10 K and studied by IR spectroscopy. On warming the matrix, PN trimerized to cyclic P₃N₃. SiS and Si₂S₂ were detected simultaneously in the matrix. Force consts. and vibrational frequencies are compared with other Group IV chalcogenides.

cas. room;

Si, enrof & matfuss

(+3)

⊗

C.A., 1978, 82, N14

РЛ

Фриси 5758

1977

3 Б226. Инфракрасный спектр PN и SiS изолированных в матрице. Atkins Robert M., Timms Peter L. The matrix infrared spectrum of PN and SiS. «Spectrochim. acta», 1977, A 33, № 9, 853—857 (англ.)

Измерены ИК-спектры моонитрида фосфора и моносulfида кремния изолированных в криптоновой матрице ($T=10-50^{\circ}\text{K}$, разбавление 1:500 и 1:1000, соотв.). Молекулы PN получали при испарении P_3N_5 ($800-900^{\circ}$), молекулы SiS — при прохождении паров сероуглерода над нагретым (1000°) кремнием. В спектре PN наблюдается полоса 1323 см^{-1} , исчезающая после нагревания матрицы до 35°K , при этом появляются полосы 1137 и 718 см^{-1} , интенсивность к-рых остается постоянной вплоть до t -ры 50°K , соотв-щей началу испарения матрицы. В спектре изотопозамещенного образца (50% ^{15}N) наблюдаются полосы 1323 и 1295 см^{-1} (P^{15}N), а после нагрева матрицы — полосы $1137, 1127, 1117, 1107\text{ см}^{-1}$

Si, N.

④1 EY

X, 1978, N3

отношение интенсивностей 5:3:3:5) и полосы 720, 718, 714, 710 см^{-1} . Полосы, появляющиеся при отжиге матрицы, отнесены на основании анализа изотопных сдвигов к тримеру P_3N_3 . Предполагается, что отсутствие полос димера может быть связано с более высокой энергией активации для процесса димеризации. В спектре моносulfида кремния наблюдается интенсивная полоса 736,0 см^{-1} ($^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$), слабые полосы 729,5 см^{-1} ($^{29}\text{Si}^{32}\text{S}$), 726 см^{-1} ($^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$), 723 см^{-1} ($^{30}\text{Si}^{32}\text{S}$) и полосы (500 и 456 см^{-1}), отнесенные к колебаниям $\nu(B_{2u})$ и $\nu(B_{3u})$ циклич. димера. При отжиге матрицы интенсивность всех перечисленных полос уменьшается, однако новые полосы в спектре не появляются. Присутствие полос димерных молекул до отжига объясняют либо наличием их в газовой фазе, либо образованием из мономерных молекул в процессе напыления матрицы. Каких либо доказательств, свидетельствующих о димеризации SiS за счет диффузии в матрице ниже 40° K, не обнаружено. Полученные значения частот колебаний SiS, Si_2S_2 , сило-вые постоянные связи этих молекул и величина SSiS сопоставляются с данными по моносulfидам германия, олова и свинца.

В. М. Ковба.

PN

офис 5758

1977

SiS

(2i)

(+3) ☒

ф. 1978
N2

2 Д367. ИК-спектры PN и SiS, изолированных в матрицах. Atkins Robert M., Timms Peter L. The matrix infrared spectrum of PN and SiS. «Spectrochim. acta», 1977, A 33, № 9, 853—857 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения в широком спектральном интервале молекул PN и SiS, изолированных в матрицах из криптона при $t \approx 10^\circ \text{K}$. Найденные частоты фундаментальных колебаний равны 1323 см^{-1} для P^{14}N и 736 см^{-1} для Si^{32}S . Исследовано влияние «отжига» матрицы до 40°K на относит. интенсивности наблюдаемых полос поглощения. Кроме того, проведены эксперименты с образцами, обогащенными изотопом ^{15}N . Анализ всей совокупности эксперим. данных позволил идентифицировать полосы поглощения, соответствующие колебаниям циклич. тримеров P_3N_3 , симметрии D_{3h} и циклич. димеров Si_2S_2 , симметрии D_{2h} . Библи. 11. Ю. М. Л.

PN⁺

ammueu 5629

1977

u, n, 20

87: 143783q Vacuum ultraviolet photoelectron spectrum of the phosphorus nitride ($X^1\Sigma^+$) molecule. Bulgin, Denis K.; Dyke, John M.; Morris, Alan (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, Engl.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1977, 73(7), 983-90 (Eng). The vacuum UV photoelectron spectrum of $PN(X^1\Sigma^+)$ is reported and interpreted using ab initio MO calcs. Three bands for PN ionization were obsd. having vertical ionization potentials 11.88, 12.30, and 15.74 eV, resp. Potential energy diagrams, bond energies, equil. bond lengths, and vibrational frequencies are also reported for PN^+ excited states. The results are compared with those for the low-lying ionic states of N_2 and P_2 .

C, A. 1977. 87 N18

PN

оттиски 5629

1977

1 Д333. УФ-фотоэлектронный спектр $\text{PN}(X^1\Sigma^+)$.

Bulgin Denis K., Dyke John M., Morris Alan.
Vacuum ultraviolet photoelectron spectrum of the
 $\text{PN}(X^1\Sigma^+)$ molecule. «J. Chem. Soc. Faraday. Trans»,
1977, Part 2, 73, № 7, 983—990 (англ.)

Исследованы HeI-фотоэлектронные спектры продуктов пиролиза (1100°K) P_3N_5 и продуктов реакции P_2 с NO над нагретым (1800°K) углеродом. Установлено, что полосы в фотоэлектронных спектрах с вертикальными потенциалами ионизации (в эв) 11,88; 12,30; 15,74 относятся к PN^+ в состояниях $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$, $B^2\Sigma^+$ соответственно. Из анализа колебательной структуры полос определены энергии диссоциации (6,25 и 5,83 эв для состояний $X^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi$), равновесные межъядерные расстояния 1,50; 1,565 и 1,45 Å и колебательные частоты 1239, 1110 и 1400 cm^{-1} для состояний X, A, B. Приведены диаграммы потенц. энергии для этих состояний иона PN^+ . В рамках неэмпирич. метода рассчитаны потенциалы ионизации PN. Обсуждена проблема выполнимости теоремы Купманса. Библ. 25. Ю. В. Чижов

фотоэлектронный
спектр

ф. 1978 № 1

PN

от тжсч 5629

1977

PN⁺

2Б128. Фотоэлектронный спектр молекулы PN($X^1\Sigma^+$) в вакуумной УФ-области. Bulgin Denis K., Dyke John M., Morris Alan. Vacuum ultraviolet photoelectron spectrum of the PN($X^1\Sigma^+$) molecule. «J. Chem. Soc. Faraday Trans», 1977, Part 2, 73, № 7, 983—990 (англ.)

Измерен фотоэлектронный спектр молекулы PN($X^1\Sigma^+$), возбуждаемый источниками He-I и Ne-I. Молекулы PN образовывались в результате пиролиза P_3N_5 , либо при взаимодействии P_2 и NO на нагретом угле ($\sim 1800^\circ K$). Кроме полос в области 11,88, 12,30 и 15,74 эв, принадлежащих PN, в первом случае в спектре присутствовали также полосы N_2 и H_2O , а во втором — полосы N_2 , CO и NO. Часть полос отнесена к неидентифицированным продуктам р-ций. При отнесении использованы результаты неэмпирич. расчетов по методу ССП молекул PN и PN⁺. Полоса 11,88 эв со слабой колебательной компонентной ($\Delta\nu = 1230 \text{ см}^{-1}$) отнесена к процессу $PN(x^1\Sigma^+) \rightarrow PN^+(x^2\Sigma^+)$ (ионизация орбитали 7σ). Понижение частоты колебания по срав-

(и.и. J, E)

2, 1978, №2

нению с нейтр. молекулой объясняется удалением слабо связанного электрона. Вторая полоса ($12,30$ эв), обладающая развитой колебательной структурой ($\omega_e = 1110$ см $^{-1}$, $\omega_e x_e = 10 \pm 20$ см $^{-1}$), отнесена к процессу $\text{PN}(x^1\Sigma^+) \rightarrow \text{PN}^+(A^2\Pi)$ (ионизация орбитали 2π). При использовании источника возбуждения Ne-I каждая полоса расщеплялась на две компоненты с $\Delta\nu = 110 \pm 30$ см $^{-1}$ ($x \rightarrow A^2\Pi_{1/2}$ и $x \rightarrow A^2\Pi_{3/2}$), что согласуется с имеющейся оценкой постоянной спин-орбитального расщепления для состояния $A^2\Pi\text{PN}^+$ (140 см $^{-1}$). Полоса $15,74$ эв с колебательной компонентой $\Delta\nu \sim 1400$ см $^{-1}$ соответствует ионизации орбитали 6σ и образованию $\text{PN}^+(B^2\Sigma^+)$. Приведена схема потенциальных кривых $\text{PN}^+(x^2\Sigma^+, A^2\Pi, B^2\Sigma^+)$ и $\text{PN}(x^1\Sigma^+)$ и корреляц. диаграмма низколежащих электронных состояний N_2^+ , PN^+ и P_2^+ .

В. М. Ковба

ions
an

P.N

1977

Chong D. P., et al.

J. Electron Spectrosc.

Relat. Phenom., 1977, 10,
N2, 137-45.

• (en. CS; IV)

(packet
rolled
cylinder
position
center)

PN

XIII - 3957

1977

87: 46334m On the photoelectron spectrum of phosphorus mononitride. Domcke, W.; Cederbaum, L. S.; Von Niessen, W.; Diercks, G. H. F. (Inst. Theor. Phys., Tech. Univ. Muenchen, Garching, Ger.). *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 1977, 11(2), 239-43 (Eng). The ionization potentials (IP's) and vibrational structure in the photoelectron spectrum of PN were calcd. by using a Green's function approach. To obtain accurate values for the IP's, terms of >3rd order have to be included in the self-energy part; this can be achieved by a renormalization of the interaction. The final values for the IP's obtained with the renormalized self-energy part are 11.97 eV (7σ) and 12.24 eV (2π). The interchange of the 2π and 7σ IP's is reproduced already in 2nd order of the perturbation theory. The inclusion of higher order contributions is essential to obtain good numerical values for the IP's. The renormalization procedure is not applicable for the 6σ IP, since poles of the self-energy part occur in this energy region, indicating the presence of satellite lines. The vibrational structure of the bands and the vibrational coupling parameters are given.

(y)²
optical
coupling

C. A. 1977

87 NO

PN

XIII - 3957

1977

22 Б34. О фотоэлектронном спектре PN. Domcke W., Cederbaum L. S., Von Niessen W., Diercksen G. H. F. On the photoelectron spectrum of PN. «J. Electron. Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1977, 11, № 2, 239—243 (англ.)

Методом функций Грина рассчитаны потенциалы ионизации (ПИ) и колебательная структура фотоэлектронного спектра молекулы PN. В кач-ве нулевого использовано приближение Хартри — Фока. Базис составлен из сгруппированных декартовых гауссовых функций (7s, 5p, 2d) на атоме фосфора и (5s, 3p, 1d) на атоме азота. Для полной энергии при эксперим. равновесном межъядерном расстоянии $R=2,8176$ ат. ед. получено значение, хорошо согласующееся с более точными расчетами в приближении ССП. ПИ определены решением уравнения Дайсона с собственно-энергетич. частью, вычисленной с точностью до второго и третьего порядков теории возмущений при учете всех МО за исключением основных. Для получения окончательных значений ПИ использована процедура перенормировки взаимодейст-

фотоэлектр.
спектр

X. 1977

№ 22

вия, позволяющая учесть вклады в ПИ от членов более высоких порядков. Для первых двух ПИ с уровнями 7σ и 2π получены значения 11,97 и 12,24 эв, соотв. Надежную величину для след. ПИ с уровня 6σ в использованном приближении получить не удалось, что связано с трудностью отделения линии, отвечающей ионизации с орбитали 6σ , от спутной линии, соотв-щей ионизации электрона с орбитали 7σ и одновременному возбуждению электрона с орбитали 2π на незанятую орбиталь 3π . Показано, что две эти линии можно различить по их колебательной структуре, более сложной в случае спутной линии. Полученные результаты для ПИ и колебательной структуры, фотоэлектронного спектра молекулы РН хорошо согласуются с экспериментом и с результатами расчета по теории возмущений Рэлея — Шредингера.

В. Б. Павлов-Веревкин

PN

XIII - 3957

1977

10 Д401. О фотоэлектронном спектре PN. Domcke W., Cederbaum L. S. Von Niessen W., Diercksen G. H. F. On the photoelectron spectrum of PN. «J. Electron. Spectrosc. and Relat Phenom.», 1977, 11, № 2, 239—243 (англ.)

В рамках неэмпирич. метода с использованием ф-ции Грина рассчитаны потенциалы ионизации и колебательная структура полос в фотоэлектронном спектре PN. Рассчитанные потенциалы ионизации PN равны (в эв) 11,97 и 12,24. Отмечено, что, как и в случае N_2 , имеет место нарушение теоремы Купменса. Первый и второй потенциалы ионизации PN связаны с удалением электронов из МО типа 7σ и 2π соответственно. Рассчитанная колебательная структура полос в фотоэлектронном спектре PN хорошо согласуется с эксперим. данными. Библ. 15.

Ю. В. Чижов

фотоэлектронный
спектр

ф. 1977. № 10

$P^{14}N$

ommuch 6252

1978

$P^{15}N$

Atkins R. M., et al.

(vi) Inorg. Nucl. Chem. Lett.
1978, 14, 113-115
Interaction of PN with
metal atoms ● in a krypton
matrix

PN

Froben F.W.,

1979

Matrix isolation of high temperature species and matrix perturbation effects.

чекмр
в
ампу-
ле

10th Materials Research Symposium on characterization of High temperature, Vapors and Gases.

NBS Special Publication 561
Volume 1, 1979, 523-528.
(Углерод)

PN

1981

23 Б174. Переход ${}^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ молекулы PN. Co-
quart B., Prudhomme J. C. The ${}^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ tran-
sition of the PN molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1981,
87, № 1, 75—84 (англ.)

И.А., До

Выполнено повторное исследование с бо́льшей диспер-
сией и разрешением перехода ${}^1\Sigma^+ (v'=v_1-v_1+10) -$
 $X^1\Sigma^+ (v''=0-7)$ в спектре испускания молекулы PN в
области 1600—1900 Å. Спектр возбуждался в ВЧ-разря-
де при прохождении через него смеси POCl_3 и азота
(1:1) при низком давлении. Наблюдалось 45 полос,
для к-рых измерена и проанализирована вращательная
структура (для 14 наиболее интенсивных полос приве-
дены волновые числа линий и их отнесение). Абс. ну-
мерация полос по v' не определена. Уровни возбужден-
ного состояния ${}^1\Sigma^+$ возмущены. Возмущения частично
объясняются взаимодействием состояния ${}^1\Sigma^+$ с состоя-
нием $A^1\Pi$. Связанная с возмущениями нерегулярность
в положении уровней не позволила определить молек.
постоянные верхнего состояния. Значения ω_e , $\omega_e x_e$,
 $\omega_e y_e$, B_e , α_e , γ_e (в см^{-1}) и r_e (в Å) $\text{PN}(X^1\Sigma^+) -$
1336,96; 6,906; -0,005; 0,78626; $5,31 \cdot 10^{-3}$, $3,8 \cdot 10^{-5}$,
1,4910. Метод линейной экстраполяции и ослабление ли-
ний вращательной структуры полос с $v' > v_1 + 5$, связы-

X.1981, 19, N23.

ваемое со случайной преддиссоциацией, использованы
для оценок энергии диссоциации молекулы в состояниях
 $X^1\Sigma^+$ и $A^1\Pi$. В. М. Ковба

ПОЛ.
ВЫ

PN

1981

12 Д525. Переход $^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ в молекуле PN. The $^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ transition of the PN molecule. Coquart B.,

Prudhomme J. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 87, № 1, 75—84 (англ.)

Переход $^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ в молекуле PN сфотографирован с высокой дисперсией (обратная дисперсия 0,25 Å/мм) в диапазоне 1600—1850 Å. Выполнен вращательный анализ и обнаружено 11 колебательных уровней нового состояния $^1\Sigma^+$. Эти уровни взаимодействуют с другими состояниями, что не позволяет осуществить абсолютную колебательную нумерацию. Некоторые возмущения могут быть приписаны взаимодействиям с состоянием $A^1\Pi$. Ослабление линий объяснено случайной преддиссоциацией. Проведено обсуждение энергий диссоциации состояний $X^1\Sigma^+$ и $A^1\Pi$. Библ. 11. Б. Д. Ф.

м.п;

ф. 1981, 18, N 12.

PN

Отпуск 12887 1981

4 Д557. Исследование с высоким разрешением перехода $A^1\Pi-X^1\Sigma$ радикала PN. A high resolution study of $A^1\Pi-X^1\Sigma$ transition of the PN molecule. Ghosh S. N., Verma R. D., VanderLinde J. «Can. J. Phys.», 1981, 59, № 11, 1640—1652 (англ.; рез. фр.)

Vi, m.n.

Спектр испускания радикала PN сфотографирован с высоким разрешением (дисперсия 0,6 А/мм) в области 2200—3100 А. Выполнен анализ переходов $A^1\Pi, v'=0-10-X^1\Sigma^+, v''=0-11$, из которых лишь наиболее интенсивные анализировались ранее при низком и среднем разрешении. Обнаружены новые возмущения во вращательной структуре состояний $A^1\Pi, v'=0, 2, 3$ и 7. Установлено, что уровни $A^1\Pi, v=2, 3$ возмущены состоянием $^3\Sigma^-$, а уровень $A^1\Pi, v=0$ — состоянием $^3\Delta$. Оба возмущающих состояния ($^3\Sigma^-$ и $^3\Delta$) имеют конфигурацию $1\pi^4 2\pi^3 7\sigma^2 3\pi$. Определены молекулярные постоянные этих состояний и уточнены значения постоянных для состояния $A^1\Pi$. Библ. 15. В. С. Иванов

ф. 1982, 18, № 4.

PN

Ommuck 12887

1981

 $(A^1\Pi-X^1\Sigma)$

95: 228633f A high resolution study of $A^1\Pi-X^1\Sigma$ transition of the phosphorus nitride (PN) molecule. Ghosh, S. N.; Verma, R. D.; VanderLinde, J. (Dep. Phys., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can. E3B 5A3). *Can. J. Phys.* 1981, 59(11), 1640-52 (Eng). The emission spectrum of PN was photographed at high resolu. at 2200-3100 Å. The bands analyzed involve $v' = 0-10$ to $v'' = 0-11$ transitions of the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ system of which only a few of the strongest bands have previously been reported at low and medium resolu. From a rotational anal. of the spectrum, new perturbations in the $v' = 0, 2, 3$, and 7 levels of the $A^1\Pi$ were obsd. A deperturbation study of these levels as well as a previously reported perturbation in the $v' = 1$ identify the perturbing states as $^3\Delta$ perturbing $A^1\Pi$, $v = 0$ and $^3\Sigma^-$ perturbing $A^1\Pi$, $v = 2$ and 3; both states arising from the $1\pi^4 2\pi^3 7\sigma^2 3\pi$ configuration. Mol. consts. for the perturbing states were obtained in addn. to improved mol. consts. for the $A^1\Pi$ state.

PN

Оттиск 12887 1981

8 Б126. Исследование с высоким разрешением перехода $A^1\Pi-X^1\Sigma$ молекулы PN. Ghosh S. N., Verma R. D., Vander Linde J. A high resolution study of $A^1\Pi-X^1\Sigma$ transition of the PN molecule. «Can. J. Phys.», 1981, 59, № 11, 1640—1652 (англ.; рез. франц.)

С высоким разрешением сфотографирован спектр испускания молекулы PN в области 2200—3100 Å, связанный с переходом $A^1\Pi (v=0-10)-X^1\Sigma^+ (v=0-11)$. Приведены волновые числа начал полос и величины T_v , B_v , D_v для состояний $X^1\Sigma^+ (v=0-11)$ и $A^1\Pi (v=0-10)$. Анализ вращательной структуры спектра показал наличие возмущений в случае уровней $v=0, 2, 3, 7$ состояния $A^1\Pi (v=0, 1)$ — возмущенное состояние $^3\Delta$, $v=2, 3$ — возм. состояние $^3\Sigma^-$, оба состояния соотв. электронной конфигурации $1\pi^4 2\pi^3 7\sigma^2 3\pi$. Значения молек. постоянных (в см^{-1}) PN с учетом возмущений: состояние $X^1\Sigma^+ - \omega_e = 1337,0$, $\omega_e x_e = 6,88$, $\omega_e y_e = 0,007$, $B_e = 0,786486$, $\alpha_e = 0,005538$, $\beta_e = 7 \cdot 10^{-7}$; состояние $A^1\Pi - T_e = 39805,9$, $\omega_e = 1103,0$, $\omega_e x_e = 7,25$, $B_e = 0,7310$, $\alpha_e = 0,00641$. Молек. постоянные возмущающих уровней:

М.П.

Х. 1982,
19, № 8

$A^1\Pi, v=0 \leftrightarrow {}^3\Delta - T=39\,776, B=0,56, 2A=32$, параметр
 взаимодействия $\eta=0,83$ (в см^{-1}) $A^1\Pi, v=1 \leftrightarrow {}^3\Sigma^-(v) -$
 $T=41\,023, B=0,633$, параметр взаимодействия $\xi=8,0$,
 $A^1\Pi, v=2 \leftrightarrow {}^3\Sigma^-(v+1) - T=41\,960, B=0,628, \xi=11,9$.
 В. М. Ковба

PN

ommu 6782

1978

ASN

59: 50690h Ab initio and semiempirical estimates of phosphorus nitride valence state interactions. Gottscho, Richard A.; Field, Robert W.; Lefebvre-Brion, H. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, Mass.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 70(3), 420-31 (Eng). Hartree-Fock wavefunctions for the valence state of PN arising from the lowest energy open shell configurations, $2\pi^4 7\sigma 3\pi$ and $2\pi^3 7\sigma^2 3\pi$, are generated and used in ab initio calcs. of diagonal spin-orbit, off-diagonal spin-orbit, and rotation-electronic matrix elements. These results are compared with those from 2 semiempirical methods, one based on AO populations and the other dependent solely on at. spin-orbit splittings. The latter method is surprisingly successful in predicting the $^3\Delta$ spin-orbit const. for a series of isovalent mols. Semiempirical ests. of the $^3\Delta$ and $^3\Pi$ spin-orbit consts. of AsN are given. The Hartree-Fock values of the a and b perturbation parameters are 50 cm^{-1} and 0.60 (unitless), resp. A previously reported perturbation in the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ band system arises from a $^3\Sigma^- \sim ^1\Pi$ spin-orbit interaction.

chem-
optum-
frequency

(+1) ☒

c. A. 1978. 89 N6.

Оттиск 6782

1978

PN

3 Б32. Неэмпирические и полуэмпирические оценки взаимодействий валентных состояний в молекуле PN. Gottscho R. A., Field R. W., Lefebvre-Brion H. Ab initio and semiempirical estimates of PN valence state interactions. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 70, № 3, 420—431 (англ.)

Кв. мех,
расчет

Проведены неэмпирич. и полуэмпирич. расчеты спин-орбитального и электрон-вращательного взаимодействий для молекулы PN. Для неэмпирич. расчетов использованы волновые функции, найденные в рамках метода Хартри-Фока для валентных состояний, возникающих из конфигураций типа $(1\sigma-6\sigma)^2 1\pi^4 2\pi^4 7\sigma 3\sigma$ и $(1\sigma-6\sigma)^2 1\pi^4 2\pi^3 7\sigma^2 3\pi$. Проведенные расчеты позволили интерпретировать обнаруженные ранее экспериментально возмущения в полосе $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ молекулы PN, как результат спин-орбитального взаимодействия. На основе полуэмпирич. методов, использующих атомные заселенности и величины атомных спин-орбитальных расщеплений, предсказаны значения параметров для молекулы AsN.

Б. И. Жилинский

2: 1979, №3

PJV Lommuca 7516 | 1978

Nagy - Felsobukd, et al

кв. м. м. м.
п. а. с. с. с.
г. а. с. с. с.

Aust. J. Chem., 1978, 31,
2571-79

(see. N2; 10)

PN

nummer 8907

197-9

Clad. 1207 -

Ohwada K.
Spectrochim. acta,
1979, A35, 1353-57.

PN

5 Б185. Новый электронный переход в молекуле PN. Coquart B., Prudhomme J. C. A new electronic transition of the PN molecule. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1980, 13, № 11, 2251—2254 (англ.)

Изучены возбуждаемые МВ-разрядом спектры испускания проточной смеси гелия и трихлорида фосфора в области 1600—1850 Å. Наблюдено и измерено более 20 кантов новых полос испускания с красным оттенением, не принадлежащих к молекулам PO или P₂. Наблюдаемые полосы отнесены к молекуле PN, волновые числа кантов расположены в таблицу Деландра. Показано, что проявляющиеся в спектре переходы связаны с 12 неидентифицированными уровнями верхнего состояния и уровнями $v=0, 1, 2$ состояния $X^1\Sigma^+$ молекулы PN. Полученные значения $\Delta G''$ хорошо согласуются с лит. данными, а $\Delta G'$ изменяются в пределах 510—535 см⁻¹. Новая система отнесена к переходу $^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$, что согласуется с теор. предсказаниями. Отмечено аномальное изменение $\Delta G'$ в верхнем состоянии и противоречие в значениях вращательных постоянных ($B_{v+4'} < B_{v+5'}$), полученных из спектров поглощения с высокой дисперсией («J. Mol. Spectr.», 1979, 74, 146).

С. Б. Осин

Новый
Эл. переход,
спектр
испускания

Д. 1981. № 5

1983

51201
отмиса 10245

Отмечено 10245

1980

PN

3 Д154. Новый электронный переход в молекуле PN. A new electronic transition of the PN molecule. Coquart B., Prudhomme J. C. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1980, 13, № 11, 2251—2254 (англ.)

Зафиксирована новая система полос в диапазоне 1600—1850 Å, отвечающая переходам между возбужденным уровнем $a^1\Sigma^+$ молекулы PN и ее основным состоянием $X^1\Sigma^+$. Переход наблюдался как в спектре поглощения (дисперсия $0,25 \text{ Å} \cdot \text{мм}^{-1}$), так и в спектре испускания (дисперсия $4,5 \text{ Å} \cdot \text{мм}^{-1}$). Предположительная электронная конфигурация верхнего уровня имеет

M. N.

$(1\sigma-6\sigma)^2 1\pi^4 2\pi^3 7\sigma^2 3\pi$. Подбор более оптимальных условий возбуждения молекулы позволит в будущем провести детальный анализ вращательной структуры данного перехода. А. Радциг

Ф. 1981 N 3

PN

[OT. 10245]

1980

21. Chem

93: 194658j A new electronic transition of the phosphorus mononitride molecule. Coquart, B.; Prudhomme, J. C. (Cent. Spectrosc. Mol., Univ. Reims, 51062 Reims, Fr.). *J. Phys. B* 1980, 13(11), 2251-4 (Eng). A transition obsd. accidentally at high dispersion in the absorption spectra of $P^{18}O$ (P.; et al., 1979) and in the emission spectra of $P^{16}O$ at low resolu. was assigned to the PN mol. The transition involves the known $X^1\Sigma^+$ ground state and a new excited state of $1\Sigma^+$ symmetry for which 12 vibrational levels were obsd. Anomalous vibrational seps. were detected for this state.

C. A. 1980, 93 N 20

PN

ommueu 11003

1981

 ${}^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$
 refer to,
 (Do)

94: 216882c The ${}^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ transition of the phosphorus(III) nitride molecule. Coquart, B.; Prudhomme, J. C. (Lab. Chim. Phys., Fac. Sci., 51062 Reims, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 87(1), 75-84 (Eng). The recently obsd. ${}^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ transition of the PN mol. was photographed at high dispersion in the 1600-1900-Å region. A rotational anal. is carried out and shows 11 vibrational levels of the new ${}^1\Sigma^+$ state. These levels are perturbed and abs. vibrational numbering cannot be detd. Some perturbations can be accounted for by interactions with the $A^1\Pi$ state. Weakening of lines are explained as accidental predissocns. and the dissocn. energies of the $X^1\Sigma^+$ and $A^1\Pi$ states are discussed.

C.A. : 1981. 94 N 26

PN

1981

Itoh H., et al.

Зикром.
европейск

Z. Naturforsch., 1981,
A 36, N 10, 1092-1094.

● (сч. Ni-PN; III)

PN⁺

офрук 12868

1981

95: 141077d Phosphorus nitride (PN⁺) ($B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$) emission produced from Penning ionization of transient phosphazo($X^1\Sigma^+$) radicals. Obase, Hiroshi; Tsuji, Masaharu; Nishimura, Yukio (Res. Inst. Ind. Sci., Kyushu Univ., Fukuoka, Japan 812). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 81(1), 119-22 (Eng). A new emission spectrum in the 305-370 nm region was recorded from the reaction of transient PN mols. in a flowing He afterglow. This band system is assigned to the $PN^+(B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+)$ transition on the basis of isotopic and photoelectron spectroscopic data. Mol. consts. are estd. for the $PN^+(B)$ and $PN^+(X)$ states.

чек

C. A. 1981, 95, N16.

PN

офис 11866

1981

М.П.

1 Д699. Исследование излучения $\text{PN}^+(\text{B}^2\Sigma^+ - \text{X}^2\Sigma^+)$ при пеннинговской ионизации нестабильного радикала $\text{PN}(\text{X}^1\Sigma^+)$. $\text{PN}^+(\text{B}^2\Sigma^+ - \text{X}^2\Sigma^+)$ emission produced from Penning ionization of transient $\text{PN}(\text{X}^1\Sigma^+)$ radicals. Obase Hiroshi, Tsuji Masaharu, Nishimura Yukio. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 81, № 11, 119—122 (англ.)

В области 305—370 нм исследован спектр излучения при пеннинговской ионизации ($\text{He } 2^3\text{S}$) продуктов СВЧ-разряда газовой смеси $\text{PCl}_3 + \text{N}_2 + \text{Ar}$. На основе анализа колебательной структуры полос, использования изотопного (^{15}N) эффекта, данных фотоэлектронной спектроскопии установлено, что наблюдаемая система полос принадлежит переходу $\text{PN}^+(\text{B}^2\Sigma^+ - \text{X}^2\Sigma^+)$. Определены колебательные частоты и константы ангармоничности (в см^{-1}) для состояния $\text{X}^2\Sigma^+$, $\text{PN}^+ - \omega_e = 1305 \pm 3$, $\omega_e x_e = 7,5 \pm 1$; для состояния $\text{B}^2\Sigma^+$, $\text{PN}^+ - \omega_e = 719 \pm 3$, $\omega_e x_e = 2,5 \pm 1$. Ю. В. Чижов

фр. 1982,
18, №1.

PN⁺

PN

М. П.

Отмечен 11861

1981

21 B115. Эмиссия $PN^+(B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+)$ возникающая при пеннингговской ионизации нестабильных радикалов $PN(X^1\Sigma^+)$. Obase H., Tsuji M., Nishimura Y. $PN(B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+)$ emission produced from Penning ionization of transient $PN(X^1\Sigma^+)$ radicals. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 81, № 1, 119—122 (англ.)

В области длин волн 305—370 нм измерен спектр эмиссии, возникающий при р-ции продуктов газового разряда в смеси $PCl_3 + N_2 + Ar$ с потоком атомов гелия, находящихся в состоянии послесвечения. Из анализа сдвигов линий при переходе от изотопа $^{15}N_2$ к изотопу $^{14}N_2$ и на основе лит. данных. фотоэлектронной спектроскопии заключено, что особенности в измеренном спектре обусловлены переходами между колебательными уровнями $B^2\Sigma^+$ и $X^2\Sigma^+$ состояний иона PN^+ , образованного при пеннингговской ионизации нестабильных радикалов $PN(X^1\Sigma^+)$ атомами $He(2^3S)$. С помощью полученных данных определены константы T_e , ω_e и $\chi_e\omega_e$ для $PN^+(X)$ и $PN^+(B)$. Из сопоставления найденных ω_e с соотв-щей величиной для $PN(X)$ сделан вывод, что $PN^+(X)$ и $PN^+(B)$ образуются в результате потери электрона с слабо и сильно связывающих МО PN соответственно. О. А. Басченко

X.21. 1981

РЛ

оттиск 11345

1981

9 Д482. Спектр ИК-поглощения молекул $^{31}\text{P}^{14}\text{N}$ в области 1300 см^{-1} . The infrared spectrum of $^{31}\text{P}^{14}\text{N}$ near 1300 см^{-1} . Maki Arthur G., Lovas Frank J. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, № 2, 368—374 (англ.)

С помощью перестраиваемого полупроводн. лазера исследованы спектры ИК-поглощения молекул $^{31}\text{P}^{14}\text{N}$ в газовой фазе при T -рах $800\text{—}1050\text{K}$ в области основной колебательно-вращательной полосы. Наряду с основным колебательным переходом $\nu=0\rightarrow 1$ наблюдались также горячие переходы $1\rightarrow 2$, $2\rightarrow 3$ и $3\rightarrow 4$. Проведено отнесение вращательных линий с J от 3 до 53. На основании анализа полученных данных, а также данных по микро-волн. поглощению PN определены 10 колебательно-вращательных постоянных молекул PN и их погрешности.

М. 112 -

ф. 1981 N 9

Оттиск 11.345

1981

РН

18 Б288. Инфракрасный спектр $^{31}\text{P}^{14}\text{N}$ вблизи 1300 см^{-1} . Maki Arthur G., Lovas Frank J. The infrared spectrum of $^{31}\text{P}^{14}\text{N}$ near 1300 см^{-1} . «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, № 2, 368—374 (англ.)

Впервые наблюден ИК-спектр поглощения молекулы РН в газовой фазе. Спектр измерен перестраиваемым диодным лазером при T -рах от 800 до 1050°C . Градуировка спектра проведена с использованием волновых чисел МВ и ИК-линий поглощения N_2O с погрешностью $\pm 0,002\text{ см}^{-1}$. Наблюдаемые ИК-переходы отнесены к колебательно-вращательным переходам с $J''=3-53$ в полосах $\nu=1\leftarrow 0$, $2\leftarrow 1$, $3\leftarrow 2$, $4\leftarrow 3$. Комбинацией полученных данных по частотам ИК-переходов с известными данными по частотам МВ-переходов определены

десять коэф. в ф-ле Данхэма для колебательно-вращательной энергии двухатомной молекулы.

В. М. Михайлов

М.М.

И.К. спектр

Х 1981 N 18

DTTUCK 11345

1281

PN

' 94: 74129m The infrared spectrum of phosphorus nitride ($^{31}\text{P}^{14}\text{N}$) near 1300 cm^{-1} . Maki, Arthur G.; Lovas, Frank J. (Mol. Spectrosc. Div., Cent. Thermodyn. Mol. Sci., Washington, DC 20234 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 85(2), 368-74 (Eng). The IR absorption spectrum of the PN mol. was measured at temps. between 800 and 1050° with a tunable diode laser. The transitions measured ranged from $J'' = 3$ to $J'' = 53$ and include the vibrational transitions $v = 1 \leftarrow 0.2 \leftarrow 1.3 \leftarrow 2$, and $4 \leftarrow 3$. These measurements were combined and microwave measurements made by others to yield a consistent set of 10 Dunham rovibrational consts. and their uncertainties.

U. K. Chatur

C. A. 1981. 24, N10

NP⁺

1982

Brüna P. J., Dohmann H.,
et al.

расчёт
и т. д., J. Mol. Struct., 1983, 93 Suppl.
„Theochem.“, 10; Theor. Chem., 1982,
Proc. 13 Congr. Theor. Chem.

универс., Lat. Expression, Alghero
апрель. (Sassari), 5-8 Oct., 1982, 309-

- 318.
(ан. C^-Si^- ; III)

PN

10mmuck 16011/ 1982

лазерный
спектр

Eng R.S., Ku R.T.,
Spectrosc. Lett., 1982,
15, N10-11, 803-929.

PN

1982

Ohwada Ken.

расчёт

сост. носей.

и E.

J. Chem. Phys., 1982,

77, N1, 424-428.

(сост. BeB; III)

$P=N$

1983

24 Б33. Двухвалентный фосфор: квантовохимическое исследование систем $P=N$ и $P=C$. Coordination 2 du phosphore: étude quantochimique des systèmes $P=N$ et $P=C$. Gonbeau D., Pfister-Guillouzo G., Bagnans J. «Can. J. Chem.», 1983, 61, № 7, 1371—1378 (фр.; рез. англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в базисе 4-31 ГФ с учетом поляризац. d -ГФ на атомах Р, N рассчитано электронное строение модельных систем $HP=NH$ и $PH=CH_2$. Для цис- и транс-изомеров $HP=NH$ и $PH=CH_2$ проведена полная оптимизация геометрич. параметров. Проанализированы маллиkenовские заселенности и карты плотностей отдельных МО. На основе расчетов барьеров вращения вокруг двойных связей $P=N$ и $P=C$ оценены прочности связей $2p_\pi-3p_\pi$. Установлена существенная роль корреляц. эффектов в определении относит. энергий структур, различающихся поворотом на 90° . Интерпретированы особенности реакц. способности рассмотренных систем. Обсуждены р-ции димеризации, а также место протонирования в $HP=NH$. И. А. Тополь

геометрия,
структура

⊗
(H)

X. 1983, 19, № 24

PN

1983

1 Л242. Электронный спектр PN. Исследование методом конфигурационного взаимодействия. The electronic spectrum of PN. A configuration interaction study. Grein F., Karig A. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 99, № 1, 25—34 (англ.)

М.П.

С помощью метода конфигурационного взаимодействия, развитого Буенкером и Пейеримхофом, рассчитаны потенц. кривые основного состояния и всех возбужденных состояний молекулы PN, соответствующих одно-электронным возбуждениям $2\pi \rightarrow 3\pi$, $7\sigma \rightarrow 3\pi$, $2\pi \rightarrow 8\sigma$ и $7\sigma \rightarrow 8\sigma$. ССП и КВ-расчеты выполнены для значений R 4 Å и от 1,3 до 2 Å. Определены спектроскопич. постоянные и энергии диссоциации PN. Отмечено, что рассчитанный спектр PN очень похож на хорошо известный спектр молекулы N₂ и состоит из двух групп близко расположенных возбужденных состояний, испытывающих сильное взаимное возмущение. Библи. 18.
А. В. Н.

ср. 1984, 18, №1

PN

1983

24 Б24. Электронный спектр молекулы PN. Изучение методом конфигурационного взаимодействия. The electronic spectrum of PN. A configuration interaction study. Grein F., Kapur A. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 99, № 1, 25—34 (англ.)

спектр,
расчет М.П.

Методом конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитаны потенциальные кривые всех синглетных и триплетных состояний молекулы PN, соотв-щих в рамках одно-электронной схемы возбуждениям $2\pi \rightarrow 3\pi$, $7\sigma \rightarrow 3\pi$, $2\pi \rightarrow 8\sigma$ и $7\sigma \rightarrow 8\sigma$. Расчет проведен в интервале межъядерных расстояний 1,3—2 А, а также при 4 А для определения энергии диссоциации. Использован двух-экспонентный базис сгруппированных гауссовых орбиталей, дополненный поляризац. и диффузными функциями. МО получены методом ССП. В расчет методом КВ включались одно- и двукратно возбужденные конфигурации по отношению к набору нескольких основных конфигураций, отобранные по их вкладу в понижение энергии; результат экстраполирован к полному набору

X. 1983, 19, № 24

одно- и двукратно возбужденных конфигураций. Потенциальные кривые аппроксимированы полиномами 4 степени и по формулам Данхема определены основные спектроскопич. постоянные, хорошо согласующиеся с известными эксперим. данными для состояний $X^1\Sigma^+$ и $A^1\Pi$. Состояния $X^1\Sigma^+$, $2^1\Sigma^+$, $A^1\Pi$, $1^1\Delta$, $1^1\Sigma^-$, $1^3\Sigma^+$, $1^3\Pi$, $1^3\Delta$ и $1^3\Sigma^-$ являются валентными, состояния $2^3\Sigma^+$, $2^1\Pi$ - и $2^3\Pi$ -ридберговыми. На основании близости спектроскопич. постоянных молекул N_2 и PN сделан вывод, что спектр молекулы PN должен быть сходен со спектром молекулы N_2 .

А. А. Сафонов

PN

1983

95-112 no-
 meses. keep-
 um.

99: 12961w The electronic spectrum of phosphorus(III) nitride. A configuration interaction study. Grein, F.; Kapur, A. (Dep. Chem., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can. E3B 6E2). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 99(1), 25-34 (Eng). Potential energy curves were calcd. for the ground state of PN and for all excited singlet and triplet states resulting from the $2\pi \rightarrow 3\pi$, $7\sigma \rightarrow 3\pi$, $2\pi \rightarrow 8\sigma$, and $7\sigma \rightarrow 8\sigma$ orbital excitations. CI studies at 4 Å served to establish disocn. energies. Spectroscopic consts. were calcd., and are in good agreement with those of the known $X^1\Sigma^+$ and $A^1\Pi$ states. Overall, their similarity with those obsd. for N_2 is striking. Various states considered to perturb the known excitations are discussed. The recently discovered second $^1\Sigma$ state is included.

C.A. 1983, 89, 112

PN, PN⁺

Um. 16128

1983

6 Д475. Реакции с энергетическим обменом между метастабильными атомами He(²S) и Ne(²P_{0,2}) и радикалами PN. Energy-transfer reactions between He(²S) and Ne(²P_{0,2}) metastable atoms and PN radicals. Obase Hiroshi, Tsuji Masaharu, Nishimura Yukio. «Chem. Phys.», 1983, 74, № 1, 89—95

В области 300—400 нм получены спектры испускания продуктов, образующихся при взаимодействии метастабильных атомов He(²S) и Ne(³P_{0,2}) с радикалами PN в газовой фазе. Генерация атомов He*, Ne* и радикалов PN осуществлялась в СВЧ-разряде. В спектрах обнаружена структура, отнесенная авторами к переходам в системе $B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ иона PN⁺. По эксперим. данным рассчитаны молекулярные константы иона PN⁺ (в см⁻¹): $\omega_e = 1306 \pm 3$, $\omega_e x_e = 7,9 \pm 0,7$ для состояния X и $T_e = 31\,354 \pm 6$, $\omega_e = 719 \pm 3$, $\omega_e x_e = 1,6 \pm 0,7$ для состояния B соответственно. Полученные данные сопоставлены с имеющейся информацией о переходах в системе $\text{PN}(X) \rightarrow \text{PN}^+(B)$. Библ. 19.

М. Т.

М.П.

ор. 1983, 18, № 6

PN⁺

Om. 16128

1983

B²Σ⁺ - X²Σ,

M.N.

98: 116331m Energy-transfer reactions between helium(2³S) and neon(³P_{0,2}) metastable atoms and PN radicals. Obase, Hiroshi; Tsuji, Masaharu; Nishimura, Yukio (Res. Inst. Ind. Sci., Kyushu Univ., Fukuoka, Japan 816). *Chem. Phys.* 1983, 74(1), 89-95 (Eng). Energy-transfer reactions between He(2³S) and Ne(³P_{0,2}) metastable atoms and PN radicals were investigated by emission spectroscopy. Thirteen new PN+(B²Σ⁺ - X²Σ⁺) emission bands were found in addn. to 2 previously identified bands in the range 305-395 nm. From these obsd. band-head wavelengths, the following mol. consts. were obtained for the X and B states of PN⁺: for PN+(X): ω_e = 1306 ± 3 cm⁻¹, ω_ex_e = 7.9 ± 0.7 cm⁻¹, and for PN+(B): T_e = 31354 ± 6 cm⁻¹, ω_e = 719 ± 3 cm⁻¹, ω_ex_e = 1.6 ± 0.7 cm⁻¹. The PN+(B)-state vibrational population was estd. from the emission intensities and the calcd. Morse Franck-Condon (FC) factors for the PN+(B-X) transition. Both the results obtained by He(2³S) and Ne(³P_{0,2}) Penning ionization were shifted to lower vibrational levels in comparison with the calcd. FC factors for vertical PN(X) → PN+(B) ionization. Besides PN+(B-X) emission, unidentified bands were obsd. in the 231-236 nm region in the He afterglow, probably originating from PN or PN⁺.

C.A. 1983, 98, N14

PN⁺

1984

Obase Hiroshi, Tsuji
Masaharu, et al.

спектр
испуск.,
л.п.

Chem. Phys., 1984,
87(1), 93-9.

(сер. ● CS⁺; III)

PN

(Om. 20 407)

1984

5 Л253. Изотопические сдвиги в системе $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ молекулы PN. Isotope shifts in the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ system of PN molecule. Saraswathy P., Krishnamurthy G. «Pramana. J. Phys.», 1984, 23, № 5, 665—669 (англ.)

Исследован спектр испускания молекул PN, возбуждаемых СВЧ-разрядом в трубке, содержащей фосфор, азот и неон. Проанализированы изотопич. сдвиги полос системы $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ при возбуждении смесей с различными изотопами азота. Подтверждена правильность ранее предложенного колебательного отнесения полос этой системы.

В. С. Иванов

М. П.

ф. 1985, 18, N 5

PN

Om. 20407

1984

! 102:35739z Isotope shifts in the $A'^1\Pi - X'^1\Sigma^+$ system of phosphorus-nitrogen (PN) molecule. Saraswathy, P.; Krishnamurty, G. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400 085 India). *Pramana* 1984, 23(5), 665-9 (Eng). The emission spectrum of PN mol. was excited in an electrodeless microwave discharge in sealed tubes contg. P, N, and Ne. Isotope shifts of several bands of the $A'^1\Pi - X'^1\Sigma^+$ system were studied by using N isotopes. Vibrational assignments of several bands were confirmed.

(Krishnamurty, P.)

$A'^1\Pi - X'^1\Sigma^+$

Krishnam.

atnam

C.A. 1985, 102, N4.

PN

Om. 20 269

1984

4 Л204. Переход $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ в молекуле $P^{15}N$. The $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ transition of the $P^{15}N$ molecule. Verma R. D., Ghosh S. N. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1984, 17, № 17, 3529—3533 (англ.)

Исследован спектр поглощения молекулы PN в спектральной области 2000—1200 Å. Для полосы $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma_2^+$ получена колебательно-вращательная структура с разрешением $0,05 \text{ см}^{-1}$ для изотопомеров $P^{15}N$ и $P^{14}N$. По величинам изотопных сдвигов линий выполнено отнесение колебательных уровней состояния $E^1\Sigma^+$ и получены спектроскопич. постоянные T_v , $\Delta G_{v+1/2}$, B_v и D_v для состояний с v от 4 до 12. Найденные молекулярные постоянные сравнены с постоянными молекул CS и SiO, изоэлектронных молекуле PN. А. И. Д.

м-п.

фз. 1985, 18, №4.

PN

(On 20269)

1984

101:180314r The $E^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ transition of the phosphorus nitride ($P^{15}N$) molecule. Verma, R. D.; Ghosh, S. N. (Dep. Phys., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can. E3B 5A3). *J. Phys. B* 1984, 17(17), 3529-33 (Eng). The $E^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ transition of the PN mol. was rephotographed in absorption at high resolu. in the 1600-1750 Å region using ^{14}N and ^{15}N atoms. Rotational anal. of the $E-X$ bands of $P^{15}N$ is carried out. From a study of the isotopic shifts an abs. numbering of the E vibrational levels is detd.

$(E^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+)$

C.A. 1984, 101, N 20

РН

Кобнянский А.И.,

1985

Авторедерат диссертации
на соискание ученой степени
к. ф.-м. наук, Москва, 1985.

М.П.,

(477-X15) Математическое модели-
рование электромагнитных
спектров двухатомных
молекул.

PN°

1986

Brown Ronald D.,

Head-Gordon Martin.

растрём
сущ-
брауаи.

Chem. Phys., 1986,
105, N1-2, 1-6.

л. п.

(сир.  CH₂O°; III)

PN⁺

1986

Nishimura Yukio.

Новые
данные
спектры

Кюсю гайяку сэйсак ка-
закү, кэнкюдзэ хокорү,
Repts Res. Inst. Ind. Sci.
Kyushu Univ., 1986, №80,
111-122.

(ср. SO⁺; III)

PN

1986

107: 103085p Potential energy curves and dissociation energy of phosphorus nitride. Murthy, B. Bhanu; Jha, B. L.; Jha, P. P. (Indian Sch. Mines, Dhanbad, 826 004 India). *Indian J. Phys.*, B 1986, 60B(5), 443-6 (Eng). The $X^1\Sigma^+$ and $A^1\pi$ potential energy curves of the PN mol. were calcd. The ground state dis-ocn. energy was estd. using the Lippincott Potential Function. The results agree with exptl. data.

номерус.
кривые

$X^1\Sigma^+$ и $A^1\pi$;

Do

C.A. 1987, 107, N 12

PN

Om. 27050

1987

20 Б4473. Реакция $P(^4S_u) + N_3(^2\Pi_g)$. Химическая генерация нового метастабильного состояния PN. The $P(^4S_u) + N_3(^2\Pi_g)$ reaction: chemical generation of a new metastable state of PN. Henshaw T. L., MacDonald M. A., Stedman D. H., Coombe R. D. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 11, 2838—2842 (англ.)

В проточном реакторе при полном давл. 1,5 Торр исследована кинетика и спектроскопия хемилюминесцентной р-ции атомов $P(^4S_u)$ с радикалами $N_3(^2\Pi_g)$. Атомы фосфора получали пропусканием PF_3 через разряд в смеси с Ag. Радикалы N_3 образовывались в р-ции $F + HN_3 \rightarrow HF + N_3$, где атомы F получали в разряде смеси CF_4 с Ag. За атомами $P(^4S)$ наблюдали по резонансной ВУФ-флуоресценции. Хемилюминесценция регистрировалась с помощью монохроматора и фотоумножителя. Измерена константа скорости р-ции $P(^4S_u) + N_3(^2\Pi_g) \rightarrow PN + N_2(X^1\Sigma_g^+)$, равная $k = (4,7 \pm 0,4) \cdot 10^{-11} \text{ см}^3/\text{с}$. В спектрах хемилюминесценции PN наблюдаются две системы полос, к-рые приписываются переходу $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$, и ранее не наблюдававшемуся переходу. Из спектра новой системы получены молек. постоянные возбужденного состояния PN: $T_e = 25\,863 \text{ см}^{-1}$; $\omega_e' = 957 \text{ см}^{-1}$ и

M. A.

X. 1987, 19, n20

$\omega_e x_e = 18 \text{ см}^{-1}$. Из сравнения с аналогичной р-цией $\text{N}(^4\text{S}_u) + \text{N}_3(^2\Pi_g)$ предполагается, что PN образуется в метастабильном состоянии $a^3\Pi$ или $a'^3\Sigma^+$, со временем жизни, превышающим 4 мс. Н. И. Бутковская

PN

(DM. 26303)

1987

Lazzarotti P, Tossell J.A.,

ab initio
pacrem

J. Phys. Chem., 1987,
91, N4, 800-804.

PN

1987

Pytko P,
Diercksen C.H.F., et al.

теор.
papers

Chem. Phys. Lett.
1987, 134 (6), 575-8.

(cur. ● ALF; III)

PN

(om. 26293)

1987

Pyykko P., Diercksen G.H.F.,
et al.,

кв.вех.

poierem

Chem Phys. Lett., 1987,
134, N 6, 575-578.

PN

М. 27159

1987

2 Л168. Вращательный анализ полос $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ молекул $P^{14}N$ и $P^{15}N$. Исследование возмущений состояния $A^1\Pi$. Rotational analysis of $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ bands of $P^{14}N$ and $P^{15}N$. Perturbation studies in the $A^1\Pi$ state. Saraswathy P., Krishnamurty G. «Pramāna. J. Phys.», 1987, 29, № 1, 53—77 (англ.)

УФ-полосы системы $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ молекул $P^{14}N$ и $P^{15}N$ исследованы в спектрах СВЧ-разряда смесей N_2/Ne со следами фосфора. Выполнен вращательный анализ 11 полос $P^{14}N$ и 16 полос $P^{15}N$. В результате анализа возмущений уровней $v=0-4$ состояния $A^1\Pi$ идентифицированы три возмущающих состояния $e^3\Sigma^-$, $d^3\Delta$ и $b^3\Pi$. Определены спектроскопич. постоянные возмущающих состояний. На основании изотопич. сдвигов выполнена колебательная нумерация возмущающих состояний. Библ. 21.

В. С. Иванов

М.П.

Ф. 1988, 18, № 2.

PN

Om. 27159 1987

107: 144052u Rotational analysis of $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ bands of phosphorus nitride ($P^{14}N$ and $P^{15}N$): perturbation studies in the $A^1\Sigma$ state. Saraswathy, P.; Krishnamurty, G. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400 085 India). *Pramana* 1987, 29(1), 53-77 (Eng). The UV band systems $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ of $P^{14}N$ and $P^{15}N$ were excited in an electrodeless tube contg. traces of P, N_2 , and Ne using a microwave discharge (2450 MHz). Bands of the isotopic species, $P^{15}N$, were obtained using $^{15}N_2$ enriched to 95.5%. Rotational analyses of 11 bands of $P^{14}N$ and 16 bands of $P^{15}N$ were carried out. Three perturbing states $e^3\Sigma^-$, $d^3\Delta$, and $b^3\Pi$, arising from the lower valence configurations were identified from the obsd. perturbations in the $v' = 0-4$ levels of the $A^1\Pi$ state. Deperturbation studies led to the detn. of mol. consts. of the perturbing states. Vibrational assignments of the perturbing states were made from isotope shift studies.

A-X, Pransam
arany

c.A. 1987, 107, N16

PN

1987

108: 45992q Vibrational transition probabilities, f -centroids and PE-curves for hydroxyl and phosphorus nitride (PN). Singh, Markandey (Dep. Phys., Univ. Gorakhpur, India). *Astrophys. Space Sci.* 1987, 138(1), 79-86 (Eng). Vibrational transition probabilities, namely Franck-Condon factors and f -centroids, were evaluated using an approx. anal. method for the A-X systems of OH and PN. Rydberg-Klein-Rees-Vanderslice potential energy curves for $X^2\Pi$, $X^1\Sigma^+$, $A^2\Sigma^+$, and $A^1\Pi$ states of OH and PN were constructed using the latest spectroscopic data. The value of f -centroids for the band increased linearly with the corresponding wavelengths. Results are shown for 6 new bands of OH and 8 new bands of PN in the spectra of astronomical objects.

Лnm, крупные
помехи. Желтый,

$X^2\Pi$, $X^1\Sigma^+$,
 $A^2\Sigma^+$ и $A^1\Pi$

(H) 

OH



C. A. 1988, 108, v 6

PN

OM 27984

1987

5 Л187. Новый спектр радикала PN в вакуумной УФ-области. New spectrum of the PN radical in the vacuum ultraviolet region. Verma R. D., Ghosh S. N., Iqbal Zafar. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1987, 20, № 16, 3961—3974 (англ.)

Фотографическим методом с высоким разрешением ($0,05 \text{ см}^{-1}$) исследованы спектры поглощения в области 130—150 нм радикалов PN в газовом разряде. Богатая структура, наблюдаемая в этой области, отнесена к электронно-колебательно-вращательным переходам в четырех возбужденных электронных состояниях, два из которых являются триплетными, а два — синглетными. Анализ вращательной структуры позволил определить молекулярные постоянные этих состояний. Установлено, что состояния одинаковой четности сильно взаимодействуют между собой. Проведена оценка энергии диссоциации обнаруженных возбужденных электронных состояний.

К. Э. М.

М.П.

ф. 1988, 18, №5

PN

(Dm. 27984)

1987

107: 144075d New spectrum of the phosphorus mononitride radical in the vacuum ultraviolet region. Verma, R. D.; Ghosh, S. N.; Iqbal, Zafar (Dep. Phys., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can.). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1987, 20(16), 3961-74 (Eng). A new absorption spectrum of PN was obtained and photographed at high resoln. at 1300-1500 Å. The rotational anal. of the bands revealed 4 new electronic states of PN which are named $\alpha^1\Pi$, $\beta^1\Pi$, $\gamma^1\Sigma^+$ and $\delta^1\Sigma^+$. Two Π states as well as two Σ states interact with each other homogeneously. A discussion on electron configuration is given.

спектр в ВУФ
ультр. сост.,
трансат. анализ

C.A. 1987, 107, N16

PN⁺

Дм. 28992) 1988

№ 8 Д108. Изучение электронных состояний PN⁺ методом конфигурационного взаимодействия. Electronic states of PN⁺ obtained by configuration-interaction studies. Grein F. «Chem. Phys.», 1988, 120, № 3, 383—388 (англ.)

В рамках метода НИК-КВ выполнены расчеты кривых потенц. энергии для 18 низших дублетных и квартетных электронных состояний PN⁺. МВФ строилась на МО, полученных методом Хартри—Фока для X¹Σ⁺ состояния молекулы PN, и включала все конфигурации, имеющие для любого межъядерного расстояния и любого корня вес, превышающий 0,01. КВ включало все конфигурации, одно- и двукратно возбужденные по отношению к НИК и удовлетворяющие пороговому условию, равному 5×10^{-6} Хартри. Найдено, что из всех рассмотренных состояний 14 являются стабильными. Для них получены основные спектроскопич. постоянные.

А. И. К.

М.П.

ср. 1988, 18, № 8

PN^+

Am. 28992

1988

16 B1015. Электронные состояния PN^+ , вычисленные методом конфигурационного взаимодействия. Electronic states of NP^+ obtained by configuration-interaction studies. Grein F. «Chem. Phys.», 1988, 120, № 3, 383—388 (англ.).

Представлены результаты расчета энергий 18 низлежащих электронных состояний иона PN^+ (дублеты и квартеты типов Σ^+ , Σ^- , Π и Δ) в интервале межъядерных расстояний R от $\sim 2,5$ до 4 и при 10 ат. ед. Расчет методом конфигурац. взаимодействия (КВ 1+2 НИК) выполнен в двухэкспонентном базисе сгруппированных гауссовых орбиталей, дополненном поляризац. и диффузными ф-циями. Базис МО получен методом ССП для состояния $X^1\Sigma^+PN$. Потенциальные кривые 14 состояний PN^+ в указанном интервале R имеют миниму-

М.П.

Х. 1988, 19, N 16

мы. Для этих состояний вычислены спектроскопич. постоянные. Определены вертикальные и адиабатич. Потенциальной энергии из основного состояния РN. Результаты в целом хорошо согласуются с эксперим. данными. Однако для состояния $2(B)^2\Sigma^+$, потенциальная кривая имеет два близко расположенных неглубоких минимума, отмечено значит. расхождение вычисл. и эксперим. величин.

В. Ф. Хрустов

PN⁺

(OM-28992)

1988

Низинне гуфта
кбарт. со ом.

108: 176029d Electronic states of phosphorus nitride (PN⁺) obtained by configuration-interaction studies. Grein, F. (Dep. Chem., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can. E3B 6E2). Chem. Phys. 1988, 120(3), 383-8 (Eng). Potential curves were calcd. for 18 low-lying doublet and quartet states of PN⁺, using CI methods and double- ζ plus polarization and diffuse basis sets. Spectroscopic consts. were evaluated for 14 stable states. The X $^2\Sigma^+$ ground state lies close to A $^2\Pi$ (0.34 eV calcd.). The 2 $^2\Sigma^+$ state has 2 shallow min. of similar energy, being due to $\sigma^* \rightarrow \sigma$ at smaller R , and $\tau \rightarrow \pi^*$ at larger R . For N₂⁺, $\sigma^* \rightarrow \sigma$ is lower in energy than $\pi \rightarrow \pi^*$, whereas the opposite situation applies to P₂⁺.

C.A. 1988, 108, N 20

PN

(Im 29019)

1988

Коркеев А. А., Медведь
А. М. и др.

М. 17. Изв. АН СССР. Сер. хим.,
1988, № 4, 900-903.

(сир. PNO; III)

PN Peterson Kirk A.,
Woods R. Claude.

1988

meop.
pacrim J. Chem. Phys. 1988,
89 (8), 4929-44.

(cor. SiF_4 ; III)

PN

от 33 209

1989

(М.П.)

12 Б1123. Стабильность PN и $(PN)_3$. Неэмпирический расчет и исследование ИК-спектра методом матричной изоляции. The stability of PN and $(PN)_3$. Ab initio calculations and matrix infrared investigations / Ahlrichs R., Bär M., Plitt H. S., Schnöckel H. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 161, № 2.— С. 179—184.— Англ.

Проведено эксперим. масс-спектрометрич. и ИК-спектроскопич. исследование р-ций $1/2P_2 + 1/2N_2 = PN$ (I) и $3PN = (PN)_3$ (II). Описан новый метод получения молекул PN. Для определения структуры молекулы $(PN)_3$ и энергий р-ций I и II проведены неэмпирич. расчеты молекул PN и $(PN)_3$. Для расчета молекулы PN (так же, как и в предшествовавших расчетах N_2 и P_2) использован метод ф-ционала связанных пар и базис сгруппир. гауссовых ф-ций, включавший набор поляризац. ф-ций ($3d2f1g$). Расчет молекулы $(PN)_3$ проведен методом ССП в базисе, включавшем поляризац. ф-ции ($2d1f$). Получены энергии р-ций I и II 117 ± 10 и -334 ± 60 кДж/моль. Молекула $(PN)_3$ имеет плоскую циклич. структуру.

А. А. Сафонов

X. 1990, N 12

PN

OT 33209

1989

111:245236R The stability of phosphorous nitride and the phosphorous nitride trimer (PN) and (PN)₃. Ab initio calculations and matrix infrared investigations. Ahlrichs, Reinhart; Baer, Michael; Plitt, Harold S.; Schaeckel, Hansgeorg (Inst. Phys. Chem. Elektrochem., Univ. Karlsruhe, D-7500 Karlsruhe, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 161(2), 179-84 (Eng). A new method of generating the high temp. mol. PN is described. Previous results for the decomn. of PN into P₂ and N₂ as well as for the formation and properties of (PN)₃ are confirmed. The reaction energy E_R for the reaction $1/2 P_2 + 1/2 N_2 \rightarrow PN$ is detd. from

extended CPF calcs. to be $E_R = 117 \pm 10$ kJ/mol, which implies $D_0(PN) = 6.2 \pm 0.1$ eV. (PN)₃ has a D_{3h} planar ring equil. structure at the SCF level. Vibrational frequencies of (PN)₃ are reported. SCF and CPF treatments show formation of the trimer, 3PN $\rightarrow$ (PN)₃, to be exothermic by 334 ± 60 kJ/mol.

param &
chem

& literature

(41) 12

(PN)₃

C.A. 1989, 111, N26

PN

[om. 33715]

1989

Schnöckel M.,

u.h.

Kem. Kozl. 1989, 70,
Nr. 213-236.

PN [Om. 35812] (34354) 1990

MacLagan R.G.A.R.,

Ap.
microp.
pavem

J. Phys. Chem. 1990, 94,
3373 - 3376.

A Theoretical Study of the
Proton Affinities of some

Phosphorus Compounds.

NP

1990

Мусаев Д.Т., Яковлев В.В.
и др.

и.п. Молекулярная структура.
(обзор) Уварово, 1990. С. 18-24.

(сер. ● CN^- ; III)

1990

PN

4 Д150. $F_2P \equiv N$: исключительно стабильные системы. $F_2P \equiv N$: A remarkably stable species / Nguyen Minh Tho, Vansweevelt H., Ha Tae-Kyu, Vanquickenborne L. G. // J. Chem. Soc. Chem. Commun.— 1990.— № 20.— С. 1425—1427.— Англ.

С использованием методов самосогласованного поля, многочастичной теории возмущений в варианте Меллера—Плессета (МП) и КВ выполнены расчеты геометр. структуры и энергии трех изомеров молекулы F_2PN . При этом на первом шаге методом МП второго порядка найдены геометр. параметры, которые затем использовались во всех дальнейших расчетах. Получены полные и относит. энергии изомеров для различных уровней учета электронной корреляции (ЭК). Наиболее полный учет ЭК проводился в рамках МП 4-го порядка с суммированием вкладов всех одно-, двух-, трех- и четырехкратных возбуждений, а также методом КВ, включавшим в рассмотрение одно-, двух- и трехкратно возбужденные конфигурации. Сделаны выводы об относит. стабильности изомеров. Указано, что молекула F_2PN должна быть стабильной и может быть синтезирована в лаборатории.

А. И. К.

М.Н.

④ (4) F_2PN
ф. 1991, № 4

PN

1990

Peterson Kirk A.,
Woods R. Claude.

по теме:
Энергия,
М, расчет

J. Chem. Phys. 1990. 92,
N10. С. 6061-6068.

(сер.  ALF; III)

1990

PN

14 Б1030. Изoeлектронные аналоги PN. Исключительно стабильные многозарядные катионы. Isoelectronic analogues of PN: Remarkably stable multiply charged cations / Wong Ming Wah, Radom L. // J. Phys. Chem.— 1990.— 94, № 2.— С. 638—644.— Англ.

Рассчитаны фрагменты потенциальных кривых для изoeлектронного ряда PN: CS, SiO, BCl, AlF, BeAr, MgNe, SN^+ , PO^+ , CCl^+ , SiF^+ , BAr^+ , AlNe^+ , SO_2^{2+} , NCl^{2+} , PF^{2+} , CAr^{2+} , SiNe^{2+} , OCl^{3+} , SF^{3+} , NAr^{3+} , PNe^{3+} , FCl^{4+} , OAr^{4+} , SNe^{4+} , FAr^{5+} , ClNe^{5+} , ArNe^{6+} . Использованы базисы на основе трехэкспонентных наборов типа 6-311 с добавлением поляризац. ф-ций. Энергии рассчитаны в приближениях теории возмущений 3-го, 4-го порядка и в многоконфигурац. приближении ССП. Определены связанные состояния, для к-рых даны оценки спектроскопич. постоянных. Найдено, что все двухзарядные катионы д. б. стабильными. Трехзарядные системы SF^{3+} и PNe^{3+} также должны быть стабильными, несмотря на сильное кулоновское отталкивание. Обсуждены диабатич. и адиабатич. корреляц. диаграммы для фрагментации двухзарядных катионов, поясняющие их стабильность. А. В. Немухин

M. A.

427

X. 1990, № 14

PN

(Om. 37351)

1992

118: 13429b Rydberg states of phosphorus nitride (PN). Bredohl, H.; Dubois, I.; Macau-Hercot, D.; Remy, F. (Inst. Astrophys., Univ. Liege, B-4000 Liege, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1992, 156(2), 292-5 (Eng). The absorption spectrum of PN was obsd. after the pyrolysis of P₂N₂ by using the synchrotron radiation of SUPERACO in Orsay (France). Sixteen new states was obsd. up to 1050 Å and classified into five Rydberg series (*nsc*, *np π* , *nps*, *nd π* , *nds*) converging to 11.83 ± 0.02 eV. In perfect agreement with the photoelectron value.

(Pugsten-cocm.)

C. A. 1993, 118, N2

PN

1992

У 4 Д89. Расчеты основного состояния $X'\Sigma^+$ и низколежащих возбужденных состояний $A'\Pi$ и ${}^1\Delta$ молекулы PN методом конфигурационного взаимодействия. I. Кривая потенциальной энергии состояния $X'\Sigma^+$ в PN. Различные спектроскопические параметры. Configuration interaction calculations on the $X'\Sigma^+$ ground state and low-lying $A'\Pi$ and ${}^1\Delta$ excited states of the PN molecule. I. Potential energy curve of the $X'E^+$ state of PN. Miscellaneous spectroscopic observables / Brouckère Guy de, Feller David, Koot Jacob J. A., Berthier Gaston // J. Phys. B. — 1992. — 25, № 21. — С. 4433—4445. — Англ.

М.Л.

Методом НИК-КВ с использованием расширенного гауссова базиса проведены расчеты основного состояния $X'\Sigma^+$ молекулы PN с целью точного определения поверхности потенц. энергии в окрестности минимума. Из этих данных рассчитаны различные спектроскопич. параметры. Обнаружены существенные корреляционные эффекты в дипольном и квадрупольном моментах и во

Ф. 1993, № 4

взаимодействии с ядром N. Путем численного решения радиального уравнения Шредингера рассчитаны чисто вращательные возбуждения, согласующиеся с экспериментом. Проведены также расчеты частот колебательно-вращательных переходов, времен жизни этих переходов и чисто вращательных переходов, для которых нет эксперим. данных.



PN

1992

118: 45970n Configuration interaction calculations on the $X^1\Sigma^+$ ground state and low-lying $A^1\Pi$ and $A^1\Delta$ excited states of the phosphorous nitride (PN) molecule. 1. Potential energy curve of the $X^1\Sigma^+$ state of PN. Miscellaneous spectroscopic observables. De Brouckere, Guy; Feller, David; Koot, Jacob J A; Berthier, Gaston (Dep. Phys. Astron., Univ. Amsterdam, 1018 X Amsterdam, Neth.). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1992, 25, 4433-45 (Eng). A series of multireference CI calcs. using an extended Gaussian basis set have been performed on the $X^1\Sigma^+$ ground state of the PN mol. in order to accurately det. the potential energy surface in the vicinity of the min. With the help of this curve a wide assortment of spectroscopic observables have been computed. The overall agreement with expt. is good. Marked correlation energy effects are found for the elec. dipole/quadrupole moments and nitrogen nuclear coupling. Pure rotational excitations calcd. by means of the numerical solns. of the radial Schroedinger equation are found to be in quite good agreement with expt. Av. values of the elec. dipole moment over the first vibrational levels have been derived and the trend exhibited by the exptl. data is well reflected by the theor. results. Vibrorotational transitions, pure vibrational and vibrorotational lifetimes have also been detd. which, to data, have not been detd. exptl.

no met. k. k. k.
OCHH. $X^1\Sigma^+$ COCM
prop. pacim

C.A. 1993, 118, N 6

PN

1992

McLean A.D., Liu B.,
et al.,

ф-ция
потенц. я. Chem. Phys. 1992,
жестин, 97(III), 8459-64.
Ze, We, —
γ, De,
расчет (ли. ● B_2^+ ; III)

PN

1992

116: 201526p Geometric and electronic structure of ground and excited states of Group VA diatomics. A theoretical LCGTO-MP-LSD study. Toscano, M.; Russo, N. (Dip. Chim., Univ. Calabria, I-87030 Arcavacata, Italy). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1992, 22(4), 683-92 (Eng). LCGTO-MP-LSD calcn. was performed for the ground and several low-lying excited states of homo- (N_2 , P_2 , As_2 , and Sb_2) and hetero-nuclear (PN, AsN, AsP, AsSh, SbN, and SbP) group VA diatomics. For all the systems the ground state is found to be $1\Sigma^+$. For N_2 and P_2 , the $1\Sigma_g^+$ ground state is followed by the $3\Sigma_g^+$, $3\Pi_g$, $3\Sigma_u^+$, $1\Pi_g$, and $1\Delta_u$ low-lying excited states is $3\Sigma_u^+$, $3\Delta_u$, $1\Delta_u$, $3\Pi_g$, $1\Pi_g$. For the hetero-nuclear diatomics the $1\Sigma^+$ ground state is, in the case of PN, AsN, AsP, SbN, and SbP, followed by the $3\Sigma^+$, 3Σ , 3Π , 3 and 1Δ low-lying excited states while for the AsSb diat. an inversion of stability of the two last singlets occurs. The calcd. spectroscopic parameters (R_e , ω_e , and D_e) are in good agreement with all the available exptl. results while, the T_e values are overestimated by about 0.5 eV. Mulliken population anal. shows that both homo- and hetero-nuclear group VA diatomics are essentially triple bonded systems.

Δ
(+9)

Mulliken M.
COCM, Wille,
neop. paper

C.A. 1992, 116, N20

AsN , AsP , N_2 , P_2 , As_2 ,
 Sb_2 , $AsSb$, SbN , SbP

PN

1993

119: 146868m Configuration interaction calculations on the $X^1\Sigma^+$ ground state and low-lying $A^1\Pi$ and $^1\Delta$ excited states of the phosphorus nitride (PN) molecule. II. Potential energy curves of the $A^1\Pi$ and $^1\Delta$ excited states of phosphorus nitride and spectroscopic properties. de Brouckere, Guy; Feller, David; Koot, Jacob J. A. (Dep. Phys. Astron., Univ. Amsterdam, 1018 NE Amsterdam, Neth.). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1993, 26(13), 1915-34 (Eng). CI calcns. have been performed on the $A^1\Pi$ and $^1\Delta$ states of PN in the vicinity of their resp. equil. geometries, yielding spectroscopic constns. (r_e , k_e , ω_e , $\omega_e x_e$, B_e , etc.) in good agreement with the available exptl. data. The $^1\Delta$ state, which is unknown exptl., is predicted to lie less than 500 cm^{-1} above the $^1\Pi$ state and $40,345\text{ cm}^{-1}$ above the $^1\Sigma^+$ ground state. Theor. vibrational bands for the $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ transition were computed, along with the corresponding Franck-Condon factors. The calcd. vibrational transitions agree quite well with the obsd. values while the Franck-Condon factors compare favorably with those calcd. semiempirically from obsd. vibrational transition probabilities. The sequence of abs. radiative intensities for the rovibrational ($j' = 4$) bands $[(v', v'')]$, i.e.

(X¹Σ⁺, A¹Π, ¹Δ)

meop. param

M-H

C. A. 1993, 119, N 14

$|(0,0)\rangle|(1,0)\rangle|(2,1)\rangle|(3,2)\rangle|(4,3)\rangle$, cannot be confirmed exptl. because of the perturbation of nearby states on low-lying ${}^1\Pi$ vibrational states ($v' = 0-4$). Spontaneous radiative and non-radiative lifetimes derived according to two decay mechanisms—a cascade ($A^1\Pi$ state being 'isolated') mechanism and an elec. dipolar transition mechanism show that the latter mode of decay is several orders of magnitude larger. The single exptl. known lifetime value, i.e. for $v' = 0$, issued from this decay mode agrees reasonably well with the calcd. value. For the ${}^1\Delta \rightarrow A^1\Pi$ transition, the elec. dipolar decay is only slightly favored with respect to the cascade mode. The lifetimes computed for both decay modes are found to be close to those in the valence isoelectronic CO mol. Other misc. observables, which to date have not been detd. exptl. for these excited states, including pure rotational, pure vibrational and rovibrational transitions, selected one-electron properties and av. values of the elec. dipole moment over the first few vibrational levels ($v = 0-5$) are likewise reported.

PN⁺

1994

120: 119745h A high-resolution study of the B²Σ⁺ - X²Σ⁺ transition of the phosphorus nitride (PN⁺) molecular ion. Ahmad, Imtiaz K.; Hamilton, Peter A. (Dep. Chem., Queen Mary and Westfield Coll., London, UK E1 4NS). *J. Mol. Spectrosc.* 1994, 163(1), 214-20 (Eng). The B²Σ⁺ - X²Σ⁺ emission spectrum of PN⁺

was recorded at rotational resolu. for the 1st time. Seven intense bands were rotationally analyzed over the 305- to 370-nm region to det. the rotational consts. of the v' = 0, 1, 2 and v'' = 0, 1, 2, 3 levels. Max. entropy deconvolution procedures were applied to the spectra and gave a significant improvement in the mol. parameters detd. Rotational perturbations were obsd. in all upper state vibrational levels.

(B²Σ⁺ → X²Σ⁺)

C.A. 1994, 120, N10

PN

(cm. 37773)

1994

Boldyrev A.I., Bonzalez N.,
Simons J.,

15⁺
2⁺
2⁺
железы,
теорет.
расчет

г. физ. Chem., 1994,
98, N 40, 9931-44.

PN⁺

01 38265

1994

19 Б1126. Энергии наиболее низколежащих кватерных состояний PN^+ и P_2^+ , определенные с использованием спектроскопии обращения заряда. Energies of the lowest quartet states in PN^+ and P_2^+ , determined using charge-inversion spectroscopy / Reid C. J. // Chem. Phys. Lett. — 1994. — 229, № 3. — С. 279—284. — Англ.

Определены энергии низколежащих кватерных электронных состояний ионов PN^+ и P_2^+ . Быстрые пучки (4 кэВ) катионов PN^+ или P_2^+ , образующихся при ионизации электронным ударом (100 эВ) соотв. паров тримера фосфонитрилхлорида ($P_3N_3Cl_6$) или красного фосфора (P_4), вступали в р-ции последовательного одноэлектронного захвата с молекулами $CS_2(G)$ по схемам $M^+(x) + G_1 \rightarrow M(y) + G_1^+ + (i)$, $M(y) + G_2 \rightarrow M(z) + G_2^+ + (i')$ (x, y, z — электронные состояния ионов и нейтральных молекул PN и P_2 ; (i) и (i') отражают энергетический баланс р-ций; G — молекулы CS_2 в основном электронном состоянии $X^1\Sigma_g^+$; G_1^+ , G_2^+ — ионы CS_2^+ в различных состояниях, $\tilde{X}^2\Pi_g$, $\tilde{A}^2\Pi_u$, $^2\Pi_g$. Анализировалась по-

М.А.

(4) 17

X. 1995, N 19

ступательная энергия недиссоциированных анионов, образующихся по второй стадии. Показано, что первоначальные катионы получают в дублетных состояниях X и A, а также в квартетных состояниях (или группах квартетных состояний) с энергией (в эВ): для PN^+ $2,74 \pm 0,20$ ($^4\Sigma^+$ и $^4\Pi$); для P_2^+ $1,96 \pm 0,15$ ($^4\Sigma_u$, $^4\Pi_g$), $2,88 \pm 0,20$ ($^4\Delta_u$). Оценено сродство молекулы PN к электрону, $0,32 \pm 0,20$ эВ.

В. М. Ковба

OT 38265

1994

PN

$$A_e = 0.32 \pm 0.20 \text{ eV}$$

PN⁺

$$T_e(^4\Sigma^+, ^4\P) \sim 2.74 \pm 0.20 \text{ eV}$$

P₂⁺

$$T_e(^4\Sigma_u, ^4\P_g) \sim 1.96 \pm 0.15 \text{ eV}$$

Reid C. Y.

Chem. Phys. Lett, 1994, 209, 53
279-284

Energies of the lowest
quartet states of PN⁺ and
P₂⁺, determined using
charge-inversion spectroscopy

PN⁺

OT 38265

1994

121: 286906p Energies of the lowest quartet states in PN⁺ and P₂⁺, determined using charge-inversion spectroscopy. Reid, C. J. (EPSRC Mass Spectrometry Service Centre, Chemistry Department, University of Wales Swansea, Singleton Park, Swansea, UK SA2 8PP). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 229(3), 279-84 (Eng). Fast (4 keV) PN⁺ and P₂⁺ cations, formed from 100-eV electroionized phosphonitrilic chloride and phosphorus, resp., were induced to undergo sequential single-electron-capture reactions with CS₂, and the undissociated product anions were translational-energy analyzed. The spectra showed that cations were present in both the X and A doublet states and also in one or more quartet states. For PN⁺, the relative term energy of the quartet state (or group of states) was 2.74 ± 0.20 eV (⁴Σ⁺ and ⁴Π); whereas for P₂⁺, two quartet states (or groups) were found with relative term energies of 1.96 ± 0.15 eV (⁴Σ_u and ⁴Π_g) and 2.88 ± 0.20 eV (⁴Δ_u). These values are in agreement with recent theor. calcns. The electron affinity of PN was found to be 0.32 ± 0.20 eV.

спектр,
электрон.
состояния,
эксперимент

PN (Ae)

С.А. 1994, 121, N 24



P₂⁺ (спектр,
электрон. сост.,
эксперимент)

PN

1994

Woon D. E., Dunning
T. H., Jr.

et. al. J. Chem. Phys. 1994.
101, N10. C. 8877.

(see  Al₂; III)

PN

1995

23 Б1165. Инфракрасный фурье-спектр PN. The Fourier transform infrared spectrum of PN / Ahmad Imtiaz K., Hamilton Peter A. // J. Mol. Spectrosc. — 1995. — 169, № 1. — С. 286—291. — Англ.

С высоким разрешением ($0,2 \text{ см}^{-1}$) измерен ИК-спектр поглощения молекул PN в области полосы фундаментального перехода 1—0. Молекулы PN получали в проточном разряде через смесь PCl_3/N_2 . Начало полосы и значения вращательных постоянных (в см^{-1}): $1323,15465$, $B_0 = 0,783714$, $D_0 = 1,089 \cdot 10^{-6}$, $B_1 = 0,778165$, $D_1 = 1,0933 \cdot 10^{-6}$. С использованием известных данных по более высоколежащим колебательным уровням ($v \leq 11$)

рассчитан следующий набор равновесных молекулярных постоянных (в см^{-1}): $\omega_e = 1336,948$, $\omega_e x_e = 6,8958$, $\omega_e y_e = -6,05 \cdot 10^{-3}$, $B_e = 0,7864844$, $\alpha_e = 5,5337 \cdot 10^{-3}$, $\gamma_e = -7,99 \cdot 10^{-5}$, $D_e = 1,0897 \cdot 10^{-6}$, $\beta_e = 8,9 \cdot 10^{-10}$.

В. М. Ковба

М.П.

X. 1995, № 23

PN

1995

122: 117766h The Fourier transform infrared spectrum of PN. Ahmad, Imtiaz K.; Hamilton, Peter A. (Department Chemistry, Queen Mary and Westfield College, London, UK E1 4NS). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 169(1), 286-91 (Eng). The IR absorption spectrum of the PN mol. has been recorded for the first time using an FTIR spectrometer. A flowing discharge of PCl_3 and N_2 was used to produce short-lived PN mols. at room temp. in a long-path cell. Spectra of the fundamental transition were recorded at a nominal of 0.02 cm^{-1} and calibrated against accurately known water vapor lines present in the background to give an abs. and relative accuracy on the order of 0.0004 cm^{-1} . The line positions measured in this work were analyzed in terms of effective band consts. and combined with previous high-temp. microwave and IR data to produce accurate spectroscopic parameters for the ground state $X^1\Sigma^+$.

(physic UK
chem, etc.)

$X^1\Sigma^+$ ecm.

C.A. 1995, 122, N10

PN

[Om. 37832]

1995

Bredohl H., Breton J., et al.,

(9) J. Mol. Spectrosc.,
1995, 171, 125-129

The Absorption Spectrum of
PN between 1000 and 600 $\text{\AA}$

PN

1996

125: 19490f CI calculations of miscellaneous spectroscopic observables for the PN $X^1\Sigma$, $A^1\Pi$ and $^1\Delta$ states. de Brouckere, G. (Department of Physics and Astronomy, University of Amsterdam, 1018 XE Amsterdam, Neth.). *Top. Mol. Organ. Eng.* 1996, 14 (Strategies and Applications in Quantum Chemistry), 319-332 (Eng). For the ground and excited electronic states ($X^1\Sigma$, $A^1\Pi$, and $^1\Delta$) of phosphorous nitride (PN), the potential energy curves were obtained in CI calcns. The spectroscopic consts. and properties calcd. included: total energies, dipole moments, quadrupole moments, N quadrupole coupling consts., bond lengths, force consts., vibrational consts., rotational consts., zero-point vibrational energy, elec. field gradient at the N nucleus, rotational and rotational-vibrational transition energies, and spontaneous radiative transition lifetimes.

 $X^1\Sigma$, $A^1\Pi$, $^1\Delta$, номечу-

кратке,

мелоп. пункт

C. A. 1996, 125, N 2

PN

Om 38.587

1996

126: 284196m Towards a confirmation of theoretical predictions of selected spectroscopic constants for the $D^1\Delta$ state of PN. de Brouckere, Guy; Feller, David; Le Floch, Andre; Melen, Francine; Dubois, Iwan; Bredhol, Harald (Dep. Physics Astronomy, Univ. Amsterdam, 1018XE Amsterdam, Neth.). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1996, 29(24), 6069-6074 (Eng), Institute of Physics Publishing. Recent high-resoln. measurements of the $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ bands in PN have provided addnl. information about the perturbations of the low-lying $A^1\Pi$ vibrational levels resulting from interactions with nearby valence states. The primary interaction arises from the $D^1\Delta$ excited state. Multireference configuration-interaction calcns. were performed on the $X^1\Sigma^+$, $A^1\Pi$ and $D^1\Delta$ states of PN in order to gain some insight into the probable accuracy of theor. predicted spectroscopic constns. for the $^1\Delta$ state, including r_e , B_e and T_e .

($D^1\Delta$, etc.)

C.A. 1997, 126, 421

PN

1996

124: 245366f A new study of the perturbations in the $A^1\Pi$ state of PN. Le Floch, A. C.; Melen, F.; Dubois, I.; Bredohl, H. (Department Physics, University Tours, F-37200 Tours, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1996, 176(1), 75-84 (Eng). The $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ system of the PN mol. was reexamd. via high resolu. conventional spectroscopy, at higher rotational J -values than those in previous studies. Perturbations occurring in the $A^1\Pi$ ($v = 0$ to 3) levels give access to information concerning the ($e^3\Sigma^-$, $a^3\epsilon^+$, $d^3\Delta$, $C^1\Sigma^-$, $D^1\Delta$) valence states. Of particular interest are (1) the strong spin-orbit interaction between the $e^3\epsilon^-$ and $A^1\Pi$ ($v_A = 2$) levels, yielding 17 rotational energy levels of the $e^3\Sigma^-$ state, and (2) the triple crossing occurring between the $A^1\Pi$ ($v_A = 3$), $d^3\Delta$, and $C^2\Sigma^-$ levels.

возмущение

(в $A^1\Pi$ состоянии)С. А. 1996, 124, № 18

PN⁻

Butser, Bennady L., 1998
et al.,

смагнуті
м. космолог.

Phys. Rev. A: At. Mol.
Opt. Phys. 1998, 58(6),
4972-74.

(all. SiO^- ● ; III)

PN⁺

2000

134:92704u High-Resolution Fourier Transform Emission Spectroscopy of the $B^2\Sigma^+$ ($v = 0$)- $X^2\Sigma^+$ ($v = 0$) Transition of the PN^+ Ion. Imajo, Takashi; Tokieda, Ken; Nakashima, Yoshihiro; Tanaka, Keiichi; Tanaka, Takehiko (Department of Chemistry, Faculty of Science, Kyushu University, Hakozaki, Higashiku, Fukuoka, Japan 812-8581). *J. Mol. Spectrosc.* 2000, 204(1), 21-25 (Eng), Academic Press. UV emission spectrum of the $B^2\Sigma^+$ ($v = 0$)- $X^2\Sigma^+$ ($v = 0$) transition of the PN^+ ion was obsd. at a resolu. of 0.05 cm^{-1} by a Fourier transform spectrometer. The rotational anal. led to a great improvement of rotational consts. in the $B^2\Sigma^+$ ($v = 0$) and $X^2\Sigma^+$ ($v = 0$) states as well as to the 1st detn. of centrifugal distortion consts. for both levels and spin-rotation interaction const. in the $X^2\Sigma^+$ ($v = 0$) state. Rotational perturbation in the $B^2\Sigma^+$ ($v = 0$) state was obsd. (c) 2000 Academic Press.

(FTIR-check)

C.A. 2001, 134, N7.

- NP

2001

ab initio
CMP-PA,
Химика

135: 247470m Energetics of NP and NB complexes in silicon. Zavodinsky, V. G.; Visikovski, A. V.; Kuyanov, I. A. (Institute for Automation, Russia Far Eastern State University, Vladivostok, Russia 69022). *Comput. Mater. Sci.* 2001, 21(4), 505-508 (Eng), Elsevier Science B.V. The authors studied the energetics and electronic structures of NB and NP complexes using the ab initio HF and LDA and AM1 semiempirical methods. These complexes were elec. inactive. The formation energies were 1.6 eV for the NB coupling and 2.4 eV for the NP pairing. The N-P and N-B interat. equil. distances are about 3.5 Å for both complexes.

④ 2
C.A. 2001, 135, N17.