

Ря-соединения

VIII 2580

1949

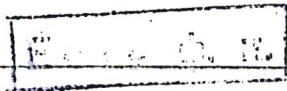
USi₂, NbSi₂, PuSi₂, CeSi₂ (re)

Zachariasen W.H.,

Acta crystallogr., 1949, 2, 94-99

Me

CA, 1949, 6484j



1955

β - PuSi₂ (r xy).

Runnalls O.J.C., Boucher R.R.,
Acta crystallogr., 1955, 8, N 9,
592

The crystal structure of PuSi₂

Encl. 18.

PacX, 1956, N 10, 28261

M.

VIII 1829

1960

PuB (re); PuB_2 (re), PuB_4 (re) PuB_6 (re)

McDonald B.J., Stuart W.I.,

Acta crystallogr., 1960, 13, N 5, 447-448

The crystal structures of some plutonium
borides

EO 12812

PNX 1960, 91370

the

Kyar J. L.

1963, 1964

et al

Mol. Phys, 7, 21, 17 (1963-4)

Эксперим. измерение и 5f-6f
переходов в U (IV), Np (IV),
Pu (IV) в разреженной
газ.

PuN

Gingerich K. A.

1967

D₀

J. Chem. Phys., 47, no. 6, 2192

Мерные диссоциации
газообразного PuN .

(см. PuN) III

am mccc 840

1969

Pu C

Gingerich K. A.

J. Chem. Phys., 50, (NS),
2255.

D₀

(Coll. UC) III.

III

$Pu H^+$

Bp-3937-VIII

1970

$Pu D^+$

Moreland P.E.; et al.

Int. J. Mass Spectrom.

Ion. Phys., 1970, 5,

N 1-2, 127-36.

масс-
спектр.

(см. U-H; III)

PuH_x

5 Б640. Исследование гидрида плутония методом ядерного магнитного резонанса. Cinader G., Zamir D., Hadari Z. NMR study of the plutonium hydride system. «Phys. Rev. B: Solid State», 1976, 14, № 3, 912—920 (англ.)

1976

спектр

При T -рах 77—300° K на нестехиометрич. образцах PuH_x (I) с $x=1,78; 2,35; 2,65$ и $2,78$ измерены спектры ПМР. Спектры I состоят из двух линий, различающихся положением, площадью по кривой и шириной. Эти линии идентифицированы как относящиеся к протонам расположенным в октаэдрич. (H_0) и тетраэдрич. (H_T) позициях решетки I. Сдвиг Найта для H_0 не выходит за пределы ошибки эксперимента; для H_T сдвиг измерен, и его изменение описывается законом $K=K_0+c_h/(1-\theta_h)$, где параметр c_h практически не зависит от x . Характер зависимости $K(T)$ аналогичен закону Кюри — Вейсса, что указывает на парамагнетизм I и возможность магнитного упорядочения I при низких T -рах. Для $x=2,78$ обнаружено ферромагнитное упорядочение при $\theta_h=85^\circ K$; значения θ_h резко уменьшаются при уменьшении x . Высказано предположение об антиферромагнитном упорядочении при малых x . Характер T -ной зависимости времен спин-решеточной релаксации свидетельствует о наличии в I локализованного магнитного мо-

X 1977 N 5

мента у ионов плутония. Обнаружено, что скорость диффузии «октаэдрич.» протонов больше, чем «тетраэдрич.» Из совокупности полученных данных сделан вывод о том, что характер связи атомов водорода, расположенных в октаэдрах и тетраэдрах, различен. Для описания электронного строения I предложена модель, согласно которой с октаэдрич. атомами Н связан новый уровень, расположенный ниже валентной зоны. Сделано также предположение об уменьшении валентности у ионов плутония, расположенных вокруг октаэдрич. протонов.

С. Ш. Шильштейн



M_2Ru

1974

($M = Fe, Co, Ni$)
($Ru, Rh, or Ir$)

Chapnik Y. M.

Phys. Status Solidi 1974

3.9(2) K 135 - K 138 (Eng).

экстр.
ночи
9 н. ч. 296

● (св. Al_2P ; III)

оттиски 6701

1978

PuN
PuN₂

9 Б172. Инфракрасные спектры матричноизолированных нитридов плутония. Green D. W., Reedy G. T. Infrared spectra of matrix-isolated plutonium nitrides. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 2, 552—555 (англ.)

Измерены ИК-спектры продуктов р-ций атомарного плутония с N₂¹⁴, N₂¹⁵ и N¹⁴N¹⁵, изолированных в матрице тв. Ar. Идентифицированы полосы поглощения, свидетельствующие об образовании в этих условиях PuN и PuN₂. В случае PuN вычислена гармонич. частота колебания $861,9 \pm 1,6 \text{ см}^{-1}$ и 1-я поправка на ангармоничность $3,1 \pm 0,8 \text{ см}^{-1}$. Для изотопозамещенных молекулы PuN₂ определены частоты вал. кол. ν_3 , проведен анализ норм. кол. и сделан вывод о линейной структуре этой молекулы. Отмечено, что отриц. величина валентно-валентного взаимодействия силовой постоянной PuN₂ свидетельствует о более слабой связи PuN по сравнению с PuN₂.

О. Г. Гаркуша

XVIII-4263

Ч.К.
См. атт.

2-1979, 19

PuN

PuN₂

И. К. Смирнов

оттиски 6701 1978
XVIII-7263

1 Д413. ИК-спектры матрично-изолированных нитридов Pu. Green David W., Reedy Gerald T. Infrared spectra of matrix-isolated plutonium nitrides. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 2, 552—555 (англ.)

Исследованы ИК-спектры (1050—700 см⁻¹) молекул PuN (I) и PuN₂ (II), а также их ¹⁵N-замещенных аналогов, изолированных в аргоновой матрице при т-ре 20° К. Частоты валентных колебаний I и ¹⁵N—I составляют 855,73 и 828,62±0,05 см⁻¹ соответственно. Теоретич. значение колебательной частоты I (в гармонич. приближении) равно 861,9±1,6 см⁻¹. Определена поправка на аангармоничность колебания I $\omega_e x_e = 3,1 \pm 0,8$ см⁻¹. Частоты валентного колебания γ в II, содержащих атомы ¹⁴N¹⁴N, ¹⁴N¹⁵N и ¹⁵N¹⁵N равны 1029,74; 1017,73 и 998,87±0,05 см⁻¹ соответственно. Показано, что молекулы II являются линейными, причем эффективность связи в II выше, чем в I. Библ. 12. И. В. А.

Ф. 1979, № 1

Publy

1979
Shiokawa S, et al.

раец
Зекмп.
Сирьк

Technol. Repts. Osaka
Univ., 1979, 29, 45-50

(see. Ayl; 10)

$U_{0.77}Pu_{0.23}O_{2+x}$ (at x)

1980

94: 147118u Oxygen potentials of uranium plutonium oxide ($U_{0.77}Pu_{0.23}O_{2+x}$) in the temperature range 1250-1550°C. Chilton, G. R.; Edwards, J. (Windscale Nucl. Power Dev. Lab., United Kingdom At. Energy Author., Sellafield/Seascale/Cumbria, Engl.). *Thermodyn. Nucl. Mater., Proc. Int. Symp.* 1979 (Pub. 1980). 1, 357-68 (Eng). IAEA: Vienna, Austria. The O potentials were measured at 4 temps. between 1250 and 1550° by using a thermogravimetric technique. Addnl. measurements made on UO_{2+x} and $U_{0.69}Pu_{0.31}O_{2+x}$ were compared with previously published data. Anomalies in some of the low temp. measurements may be attributable to small-scale variations in the Pu/(U + Pu) ratio.

Windscale
prometheus

C.P. 1981 84/118

1981

 $\text{Ru}_3(\text{CO})_{12}$

у,

2 Д804. УФ-фотоэлектронное исследование некоторых металлокарбонильных и гидридометаллокарбонильных кластеров. Ultraviolet photoelectron studies on bonding in some metal carbonyl and metal hydrido carbonyl clusters. Green Jennifer C., Mingos D. Michael P., Seddon Elaine A. «Inorg. Chem.», 1981, 20, № 8, 2595—2602 (англ.)

Получены HeI- и HeII-фотоэлектронные спектры в газовой фазе $\text{Ru}_3(\text{CO})_{12}$, $\text{Os}_3(\text{CO})_{12}$, $\text{Co}_4(\text{CO})_{12}$, $\text{Os}_6(\text{CO})_{18}$, $\text{H}_3\text{Re}_3(\text{CO})_{12}$, $\text{H}_4\text{Re}_4(\text{CO})_{12}$, $\text{H}_2\text{Os}_3(\text{CO})_{10}$, $\text{H}_4\text{Os}_4(\text{CO})_{12}$. Фотоэлектронные спектры интерпретированы при помощи анализа относит. интенсивностей в HeI- и HeII-спектрах и сравнения с фотоэлектронными спектрами родственных соединений. Первый потенциал ионизации исследованных соединений соответствует удалению электронов связи М—М. Показана важная роль атомов водорода в стабилизации кластеров. Обсуждена правомочность проведения аналогии между электронной структурой кластеров и металлич. поверхности. Библ. 32.

Ю. В. Чижев



(+7)

ф. 1982, 18, №2

Соединения Рн

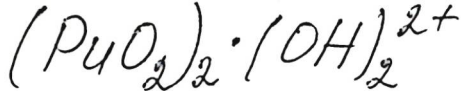
1981

Moravec J., et al.

Jad. Energ. 1981, 27(6),
214-215.

ИК-спектры
в матрицах.

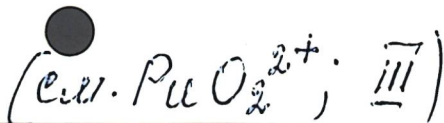
●
(см. Соедин. II; III)



1983

Madic C., Begun G. M.,
et al.

Vi; Inorg. Chim. Acta, 1983,
[1984], 94 [!], Spec., 100-102.



Pu Al₂

1986

Boring A.M., Albers R.C.,
Kolling D.D.,

н. см. см. см. см.,
раств

J. Mass. Mass. Mater,
1986, 54-57 (1), 543-4.

C.A. 1986, 104, N16, 136 351p

$PuPh_3$ 4 gp.

1986

Johansson Boerje,
Eriksson Olle, et al.

24.

empyrom.

Phys. Scr. 1986, T18,
68-72.

(cer. $AcRh_3$; III)

Gd(Pu)Cl₃

1987

Barbanel Yu. A.,
Lumpov A. A.

Секрет
ноveau.

Radiokhimiya
1987, 29(6), 730-41.

(ср. PuCl₃; III)

Рис №2

130353

1988

Красков К. С.,
Смирненко М. В.,

ОНИИТЭХИМ.

Дет. N 378-ХП-86,
Черкассы, 1988.



сл.п.
(обзор)



1990

Перцева В. Т.,

Цокова Т. В. и др.

Электрон.

Ж. неорг. хим.

Сибирск.

1990, 35, № 8, с. 2066-

2070.

(соед. $\text{UO}_2\text{Cl}_4^{2-}$; III)



1992

Ortiz J.V., Hay P.J.
et al.

U.S. J. Amer. Chem. Soc. 1992
114, N 7.C. 2736-2737.

(see $\bullet$ $\text{U}(\text{CH}_3)_3$; III)

PuN

(Om. 36 998)

1992

Suzuki Y., Maeda A, et al.,

(P, Kp) J. Nucl. Mater. 1992,
188, 239-243.

(Pu, U) N

Om. 36 998

1992

Suzuki Y., Maeda A., et al.,

(P, Kp) J. Nucl. Mater. 1992,
188, 239-243.

$PuO_2 SO_4$

1995

F: PuO_2SO_4

P: 3

05.Д.0178. Неэмпирические квантовохимические расчеты уранила UO_2^{2+} , плутонила PuO_2^{2+} и их нитратов и сульфатов. Ab initio quantum chemical calculations on uranyl UO_2^{2+} , plutonyl PuO_2^{2+} , and their nitrates and sulfates / Craw J. Simon, Vincent Mark A., Hillier Ian H., Wallwork Andrew L. // J. Phys. Chem. - 1995. - 99, N 25. - С. 10181-10185. - Англ.

Ab initio molecular orbital calculations on the structure and stability of the nitrate and sulfate complexes of uranyl (UO_2^{2+}) and plutonyl (PuO_2^{2+}) using effective core potentials are reported. It is found that the binding energy of sulfate is greater than that of nitrate to both uranyl and plutonyl, with a slight preference for plutonyl. A method of decomposing the binding energy into electrostatic, Pauli repulsion, polarization, and charge transfer components is described which predicts that electrostatic forces are dominant. A simple molecular mechanics potential is developed by using this finding, which is successful in reproducing the ab initio results.

X. 1996, N 5

PuO₂ (NO₃)₂

1995

F: PuO₂(NO₃)₂

P: 3

05.Д.0178. эмпирические квантовохимические расчеты уранила UO₂{2+}, плутонила PuO₂{2+} и их нитратов и сульфатов. Ab initio quantum chemical calculations on uranyl UO₂{2+}, plutonyl PuO₂{2+}, and their nitrates and sulfates / Craw J. Simon, Vincent Mark A., Hillier Ian H., Wallwork Andrew L. // J. Phys. Chem. - 1995. - 99, N 25. - С. 10181-10185. - Англ.

Ab initio molecular orbital calculations on the structure and stability of the nitrate and sulfate complexes of uranyl (UO₂{2+}) and plutonyl (PuO₂{2+}) using effective core potentials are reported. It is found that the binding energy of sulfate is greater than that of nitrate to both uranyl and plutonyl, with a slight preference for plutonyl. A method of decomposing the binding energy into electrostatic, Pauli repulsion, polarization, and charge transfer components is described which predicts that electrostatic forces are dominant. A simple molecular mechanics potential is developed by using this finding, which is successful in reproducing the ab initio results.

X. 1996, N 5

F: PuO₂SO₄

P: 3

1995

6Б176. эмпирические квантово-химические расчеты уранила UO₂²⁺ плутонила PuO₂²⁺, и их нитратов и сульфатов. Ab initio quantum chemical calculations on uranyl UO₂²⁺, plutonyl PuO₂²⁺, and their nitrates and sulfates / Craw J. Simon, Vincent Mark A., Hillier Ian H. Wallwork Andrew L. // J. Phys. Chem. - 1995. - 99, N 25. - С. 10181-10185. - Англ.

эмпирическим методом ССП МО ЛКАО с использованием релятивистских псевдопотенциалов в полном активном пространстве с учетом электронной корреляции в рамках МП2 и КВ проведены расчеты уранильного и плутонильного катионов и их сульфатов и нитратов. Приведены: равновесная геометрия, распределения электронной плотности, колебательные частоты. Энергии связи для сульфатов больше, чем для нитратов, причем для плутония они немного больше, чем для урана. Разделение энергии связи на компоненты показало преобладание электростатич. взаимодействий. а основании полученных результатов получен простой потенциал для метода молек. механики воспроизводящий неэмпирич. данные. Библ. 38.

Р.ЖС.Х. N 6, 1996

F: Pu - *Kamradt*

P: 3

2000

133:290303 Plutonium(IV) Sequestration:
Structural and Thermodynamic Evaluation of the
Extraordinarily Stable Cerium(IV)
Hydroxypyridinonate Complexes. Xu, Jide;

Radkov, Emil; Ziegler, Marco; Raymond, Kenneth N.

Department of Chemistry and Chemical
Sciences Division Lawrence Berkeley National
Laboratory, University of California Berkeley, CA
94720, USA Inorg. Chem., 39(18), 4156-4164

(English) 2000 Ligands contg. the 1-methyl-
3-hydroxy-2(1H)-pyridinone group (Me- 3,2-HOPO) are
powerful plutonium(IV) sequestering agents. The
Ce(IV) complexes of bidentate and tetradentate HOPO
ligands were quant. studied as models for this

sequestration. The complexes $\text{Ce}(\text{L1})_4$, $\text{Ce}(\text{L2})_4$, $\text{Ce}(\text{L3})_2$, and $\text{Ce}(\text{L4})_2$ [$\text{HL1} = \text{Me-3,2-HOPO}$; $\text{HL2} = \text{PR-Me-3,2-HOPO}$ ($\text{PR} = 4\text{-CONHPr}$); $\text{H2L3} = 5\text{LI-Me-3,2-HOPO}$ (I , $\text{X} = \text{CH}_2$); $\text{H2L4} = 5\text{LIO-Me-3,2-HOPO}$ (I , $\text{X} = \text{O}$)] were prepd. in THF soln. from $\text{Ce}(\text{acac})_4$ and the corresponding ligand. The complex $\text{Ce}(\text{L4})_2$ was also prepd. in aq. soln. by air oxidn. of the $\text{Ce}(\text{III})$ complex $[\text{Ce}(\text{L4})_2]^-$. Single-crystal x-ray diffraction analyses are reported for $\text{Ce}(\text{L1})_4 \cdot 2\text{CHCl}_3$ [P1 (no. 2), $Z = 2$, a 9.2604(2), b 12.1992(2), c 15.9400(2) Å, α 73.732(1), β 85.041(1), γ 74.454(1) degree.], $\text{Ce}(\text{L3})_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{OH}$ [P21/c (no. 14), $Z = 4$, a 11.7002(2), b 23.0033(4), c

PuN^+

2001

cmp-pr,

q-ue

nomerus

7hepruu

135: 262518b Structure and potential energy function of PuX^+ ($\text{X} = \text{O}, \text{H}, \text{N}, \text{C}$). Li, Quan; Wang, Hong-Yan; Jiang, Gang; Zhu, Zheng-He (Dep. Chem., Sichuan Normal Univ., Chengdu, Peop. Rep. China 610066). Wuli Huaxue Xuebao 2001, 17(7), 622-625 (Ch), Beijing

Daxue Chubanshe. The theor. study on PuX^+ ($\text{X} = \text{O}, \text{H}, \text{N}, \text{C}$) using the d. functional method (B3LYP) shows that PuO^+ , PuH^+ , PuN^+ and PuC^+ can be stable. Ground electronic states are $\text{X}^6\Sigma^-(\text{PuO}^+)$, $\text{X}^7\Sigma^-(\text{PuH}^+)$, $\text{X}^5\Sigma^-(\text{PuN}^+)$ and $\text{X}^8\Sigma^-(\text{PuC}^+)$. Their potential energy functions are in agreement with the Murrell-Sorbie function. Their force consts. and spectroscopic data have been obtained.

C.A. 2001, 135, 118

PuN^{n+}

2001

$n=1, 2, 3$

СМАГЛАНН,
НОМЕРА
ОП-УУ, МЕОР
РАСЧЕТ

135: 309121j Potential energy function and stability of PuN^{n+} .
Li, Quan; Jiang, Gang; Zhu, Zhenghe (Dep. Chem., Sichuan Normal Univ., Chengdu, Peop. Rep. China 610065). *Huaxue Wuli Xuebao* 2001, 14(3), 303-307 (Ch), Kexue Chubanshe. Potential energy functions and stability of PuN^{n+} ($n = 1, 2, 3$) were studied by using the B3LYP d. functional theory. The electronic ground states are $X^5\Sigma^+$ for PuN^+ and $X^4\Sigma^+$ for PuN^{2+} , and the ground state geometries and spectroscopic data for these two ions are obtained. PuN^{3+} is unstable.

C.A. 2001, 135, N21

PuC^+

2001

структура,
от-те
номера.
Freeium

135: 262518b Structure and potential energy function of PuX^+ ($X = O, H, N, C$). Li, Quan; Wang, Hong-Yan; Jiang, Gang; Zhu, Zheng-He (Dep. Chem., Sichuan Normal Univ., Chengdu, Peop. Rep. China 610066). Wuli Huaxue Xuebao 2001, 17(7), 622-625 (Ch), Beijing Daxue Chubanshe. The theor. study on PuX^+ ($X = O, H, N, C$) using the d. functional method (B3LYP) shows that PuO^+ , PuH^+ , PuN^+ and PuC^+ can be stable. Ground electronic states are $X^6\Sigma^-(PuO^+)$, $X^7\Sigma^-(PuH^+)$, $X^5\Sigma^+(PuN^+)$ and $X^6\Sigma^-(PuC^+)$. Their potential energy functions are in agreement with the Murrell-Sorbie function. Their force consts. and spectroscopic data have been obtained.

C.A. 2001, 135, N18

F: PuN2

P: 3

133:286797 An ab initio study of PuO2 and of
PuN2. Archibong, E. F.; Ray, A. K. Department of
Physics, University of Texas at Arlington
Arlington, TX 76019, USA THEOCHEM,
530(1,2), 165-170 (English) 2000, Ab initio
electronic structure calcns. using correlated wave
functions were performed to investigate the
structures, vibrational frequencies and energetics
of PuO2 and PuN2 mols. in their low-lying
electronic states. For PuO2, the 5.SIGMA.g+-
[(1.delta.u)2(1.phi.u)2] and the 5.PHI.u-

2000

$[(1.\delta.u)^2(1.\phi.u)^1(4.\sigma.g)^1]$ states are found to be nearly degenerate. However, frequency considerations indicate that the $5.\sigma.g^+$ state is the preferred candidate for the ground state. The CCSD(T) computed vertical ionization energy of PuO_2 of 9.92 eV compare favorably with the exptl. detd. ionization energy of 9.43 eV. For PuN_2 , the $3.PI.g^-[(1.\delta.u)^1(1.\phi.u)^1]$ state is predicted to be the ground state. The $.\omega.3$ mode frequency computed for the $3.PI.g$ ground state at the CCSD and CCSD(T) levels, when scaled by 0.93 and 0.92, resp., agrees perfectly with the $.\nu.3$ frequency of 1030 cm^{-1} reported from IR matrix isolation studies.
