

Ра-соединения

1968

 $\text{Pa} = \text{O}$

100629a Hydrated and anhydrous oxides of pentavalent protactinium. Stchouzkoy, Tatiana; Muxart, Roland; Pezerat, Henri; Dhers, J. (Div. Radiochim., Inst. Phys. Nucl., Arcueil, Fr.). *Rev. Chim. Miner.* 1968, 5(5), 1085-1101 (Fr). The compn. of Pa hydroxide, pptd. in acid soln. by hydrolysis or by addn. of a base, is estd. to be an amorphous hydrated oxide with a not very well defined degree of hydration. Tetragonal crystals ($a = 10.891$, $c = 13.225$ A.) were obtained at $700 - (1040-1060^\circ)$, and hexagonal crystals ($a = 3.820$, $c = 13.225$ A.) at $1050-1500^\circ$. A f.c. pseudocubic phase at $600-700^\circ$ ($a = 5.446$) is doubtful. A 4th, nonidentified phase was observed at $\sim 1100^\circ$. Anhyd. and hydrated Pa oxides had ir spectra showing a polymer structure with a Pa-O-Pa skeleton, grafted with Pa = O groups. The absorption band of the Pa = O bond ($\sim 930 \text{ cm.}^{-1}$) is characterized for the 1st time.

E. Grunhut

 $\text{Vi}(\text{u.k.})$

C. A. 1969. 70. 22



(I)


1970

$\text{PaF}_5 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Brown D.,
Easey Y. F.,

J. Chem. Soc., 1970,

A, ~ 19, 3378.



(Cu. PaF_5) I

ук-суккуп

ThCl₄, PaCl₄, UCl₄, NpCl₄ (V) ^{VIII-6000/974} spec.

Bokros E. W., Kraser W., Schenk H. J.,
Schwocha K.,

J. Inorg. Nucl. Chem., 1974, 36 (4),
809-13

Vibrational spectra and force constants of the actinide (IV) chlorides: ThCl₄, PaCl₄, UCl₄, NpCl₄.

DMY

avg w

5 974. 81/10.56027d 10

1976

(vi)

PaO_2
 UO_2
 NpO_2
 PuO_2
 AmO_2
 Am_2O_3
 CmO_2

2.1978

1 Б203. Исследование окислов актинидов методом инфракрасной спектроскопии. Manes L., Buijs K., Schippa B. Investigation of actinide oxides by infrared spectroscopy. «Transplutonium 1975. Proc. 4th Int. Symp., Baden—Baden, 1975». Amsterdam e. a., 1976, 257—266. Discuss., 266 (англ.)

Измерены ИК-спектры поглощения $200\text{—}4000\text{ см}^{-1}$ тв. двуокисей Pa, U, Np, Pu, Am, Cm и Am_2O_3 (гексагон. и кубич. модификации) в матрице CsBr и CsJ (средний размер кристаллитов 5 мкм, конц-ия $10\text{—}60\text{ мкг/см}^2$). Интерпретация спектров выполнена в рамках теории Энгельмана и Руппина. При взаимодействии электромагнитного излучения с кристаллами, размеры к-рых сравнимы или меньше длины волны возбуждающего излучения, образуются два типа поляритонов — «объемные» и «поверхностные», расположенные, соотв., ниже ω_T и в интервале $\omega_T < \omega < \omega_L$ (ω_T и ω_L — поперечная и продольная моды). В спектрах наблюдались полярито-

(+5) $\square$

ны обоих типов. Обсуждена зависимость ω_T ($K=0$) и положения максимума $\omega_{\text{макс}}$ поляритонов от атомного номера актинидов. Все двуокиси изоструктурны (структура флюорита) с параметром решетки a_0 , монотонно уменьшающимся при переходе от Th к Cm. Если бы положение ω_T и $\omega_{\text{макс}}$ определялось только размерами элементарной ячейки кристаллов, следовало бы ожидать их монотонного увеличения от ThO_2 к CmO_2 . Однако при переходе от AmO_2 к CmO_2 наблюдалось уменьшение ω_T и $\omega_{\text{макс}}$. Предполагается, что это связано с изменением локализации и перекрывания $5f$ электронов четырехвалентных ионов актинидов. В. М. Ковба

$\text{Pa}(\text{HCOO})_4$

1977

5 Б185. Синтез, инфракрасные спектры и рентгенографические исследования тетраформатов тория, протактиния, урана и нептуния. Greis O., Bohres E. W., Schwachau K. Darstellung, Infrarotspektren und röntgenographische Untersuchungen der Tetraformiate von Thorium, Protactinium, Uran und Neptunium. «Z. anorg. und allg. Chem.», 1977, 433, № 6, 111—118 (нем.; рез. англ.)

Синтезированы безв. $\text{M}(\text{HCOO})_4$, где $\text{M} = \text{Th}$ (Ia), Pa (Iб), U (Iв) и Np (Iг), записаны их ИК-спектры в области $4000\text{—}40\text{ см}^{-1}$ и проведено отнесение полос. На основании анализа рентгенограмм порошков установлено, что кристаллы Ia, Iб и Iг имеют тетрагон. I-решетку, в то время как Iв — моноклинную C-решетку.

М. Дейчмейстер

И. К. Савицкий

(41)

Q

Q (41) $\text{Np}(\text{HCOO})_4$

ж., 115, 1978

PaD

10m. 17833

1982

Hildenbrand D. L.

y.

1982 (заче́тное соображе-
ние).

PaCl_6^{2-}

1982

/ 97: 28829d Quantum-chemical study of extreme valence forms of actinides. Ionova, G. V.; Pershina, V. G.; Spitsyn, V. I. (Inst. Fiz. Khim., Moscow, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1982, 263(1), 130-4 [Phys. Chem.] (Russ). The stability of high-valence forms of actinide elements was studied quantum mech.; quasirelativistic MO calcns. on AnCl_6^{2-} ($\text{An} = \text{Pa}, \text{U}, \text{Np}, \text{Pu}, \text{Am}, \text{Cm}, \text{and Cf}$) were made based on numerical Hartree-Fock functions. The oxidn. potentials $E^0(\text{III-IV})$ and (IV-V) of Pa-Cf and the spin-orbit interaction energies of Pa-Md were calcd. The possible existence of pentavalent Cm and Cf in soln. is discussed.

neopent-
p-actin

(+6) 

UCl_6^{2-} , NpCl_6^{2-} , PuCl_6^{2-} ,

AmCl_6^{2-} , CmCl_6^{2-} ,
 CfCl_6^{2-}

C.A. 1982, 97, ~4

$\text{PaC}(\kappa)$

1982

Mallett C. P.

теорет.
расчет
электрон.
структ.

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

●
(см. $\text{ThC}(\kappa); \text{III}$)

PaRh_3

1986

Johansson Boerje,
Eriksson Olle, et al.

24.

empykon.

Phys. Scr. 1986, T18,
65-72.

(cur.  AcRh_3 ; III)

Pa-0

1986

Kleinschmidt R.D.,
Ward J.W.

(Do) g. Less-Common Met.
1986, 121, 61-6.

(see. PuF₅; III)

PaO-0

1986

Kleinschmidt P.D.,

Ward J.W.

(20)

J. Less-Common Met.

1986, 121, 61-6.

(cu. Pu F₅; III)

Pa Cls

1991

Pershina V., Sepp.
W.D. et al.

M.n. GSI - Rept. 1991. N91-
1, Sci. Rept. 1990. C.
275. (● V Cls; III)

PaBr₅

1991

Pershina V., Sepp
W.D. et al.

u. n.

GSI-Rept. 1991. N 91-
1, Sci. Rept. 1990. C. 278.

(cer. VCl₅; III)

PaOCl_3

1992

Pershina V., Lepp W.D.
et al.,

Анализ.
структура, J. Chem. Phys. 1992,
теор. рас- 97, N2, 1123-1131
чет

(cell. VOCl_3 ; ● III)

PaOBr_3

1992

Pershina V., Lepp W.D.,
et al.,

Александр.
Смесь
мел. рас-
см

J. Chem. Phys. 1992,
97, No 2, 1123 - 1131.

(all. VOCl_3 ; ● III)

Pa Br₅

1992

Pershina V., Sepp N.-D. et al.,

Электрон.
структура J. Chem. Phys., 1992, 97,
N 2, C. 1116 - 1122

P. d. X. N 8, 1993, 8 B 1025

1996

F: PaCl₅

P: 3

9Б131. Электронная структура и свойства галогенидов элементов IV, V и VI групп, включая транс-актиниды / Ионова Г. В., Першина В. Г., Герасимова Г. А., Михалко В. К., Кострубов Ю. Н., Сураева Н. И. // Ж. неорган. химии. - 1996. - 41, N 7. - С. 1190-1197. - Рус.

Рассмотрена электронная структура и свойства галогенидов IV, V и VI групп, включая 104-, 105- и 106-й элементы. Расчеты электронной структуры молекул MCl₅ и MBr₅ (M=V, Nb, Ta, Ha и Pa) подтвердили, что ганий является типичным представителем элементов V группы, причем его свойства определяются валентными орбиталями 6d и 7s. Сравнение результатов атомных и молек. релятивистских и нерелятивистских расчетов элементов V группы и их соединений (MCl₅) показало, что релятивистские эффекты определяют тенденции в хим. свойствах. Результаты расчетов позволили сделать вывод, что высшие галогениды транс-актинидов проявляют

Рис 1997

уменьшение устойчивости по отношению к диссоциации связи М-С
при увеличении порядкового номера хим. элемента. Библ. 36.

1996

F: Pavr5
p:3

9Б131. Электронная структура и свойства галогенидов элементов IV, V и VI групп, включая транс-актиниды / ИONOBA Г. В., Першина В. Г., Герасимова Г. А., Михалко В. К., Кострубов Ю. Н., Сураева Н. И. // Ж. неорган. химии. - 1996. - 41, N 7. - С. 1190-1197. - Рус.

РЖХ. 1997

Рассмотрена электронная структура и свойства галогенидов IV, V и VI групп, включая 104-, 105- и 106-й элементы. Расчеты электронной структуры молекул $MCl[5]$ и $MBr[5]$ ($M=V, Nb, Ta, Ha$ и Pa) подтвердили, что ганий является типичным представителем элементов V группы, причем его свойства определяются валентными орбиталями 6d и 7s. Сравнение результатов атомных и молек. релятивистских и нерелятивистских расчетов элементов V группы и их соединений ($MCl[5]$) показало, что релятивистские эффекты определяют тенденции в хим. свойствах. Результаты расчетов позволили сделать вывод, что высшие галогениды транс-актининов проявляют уменьшение устойчивости по отношению к диссоциации связи $M-Cl$ при увеличении порядкового номера хим. элемента. Библ. 36.

Pa 15

1996

Конта Р.В., Терешка В.И.

★ гр.,

м.п. 22. Корман. Хилли,
1996, 41, N 7, с. 1190-1197

(см. Pa 15;

III)

PaC₂₈

1996

Zhao K., Pitzer R.M.,

J. Phys. Chem. - 1996. -
100, N 12. - C. 4798-4802

(Ae, III)

(all. C₂₈;  III)

PaO_2^+

1999

Dyall, Kenneth B.,

стабильность
и
стр-ра,
теор. расчет

Act. Phys. 1999, 96(4),
571-578.

(ср. ThO_2 ;  III)

PaF5

F: PaF5

P: 1

(м.н., Т.ф.назав) $I_K + II_K(tL)$

2003

04.04-19Б3.7. Термодинамические свойства PaCl[5] и PaF[5], полученные на квантово-химических расчетов. Thermodynamic properties of PaCl[5] and PaF based on quantum chemical calculations / Kovacs A., Konings R. J. M., Nem D. S. // J. Alloys and Compounds. - 2003. - 353, N 1-2. - С. 128-132. - А

На основе результатов квантово-химических расчетов, проведенных с использованием методов BP86 и B3LYP теории функционала плотности, проведе анализ термодинамических свойств PaCl[5] и PaF[5]. Показано, что тригонально-бипирамидальная структура (D[3h]) на 4-6 кДж/моль более устой чем тетрагонально-пирамидальная структура (C[4v]). Геометрические парамет частоты колебаний структур D[3h], рассчитанные двумя методами, хорошо согласуются. Результаты использованы для расчета термодинамических функции молекул PaCl[5] и PaF[5]. В сочетании с литературными данными оценены энтальпии образования. Библи. 44.

PaCl_5

F: PaCl_5 (м.п., т.ф. газоб) $\text{I}_K + \text{II}_K$ (+1)
P: 1 2003

04.04-19Б3.7. Термодинамические свойства $\text{PaCl}[5]$ и $\text{PaF}[5]$, полученные на квантово-химических расчетов. Thermodynamic properties of $\text{PaCl}[5]$ and PaF based on quantum chemical calculations / Kovacs A., Konings R. J. M., Nem D. S. // J. Alloys and Compounds. - 2003. - 353, N 1-2. - С. 128-132. - А

На основе результатов квантово-химических расчетов, проведенных с использованием методов BP86 и B3LYP теории функционала плотности, проведе анализ термодинамических свойств $\text{PaCl}[5]$ и $\text{PaF}[5]$. Показано, что тригонально-бипирамидальная структура ($D[3h]$) на 4-6 кДж/моль более устой чем тетрагонально-пирамидальная структура ($C[4v]$). Геометрические парамет частоты колебаний структур $D[3h]$, рассчитанные двумя методами, хорошо согласуются. Результаты использованы для расчета

термодинамических функции молекул $\text{PaCl}[5]$ и $\text{PaF}[5]$. В сочетании с литературными данными оценены энтальпии образования. Библ. 44.