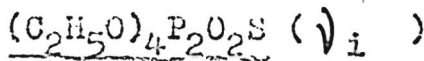
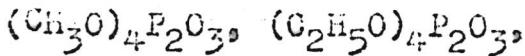


C-P-S

2007

1956



Bandler M.,

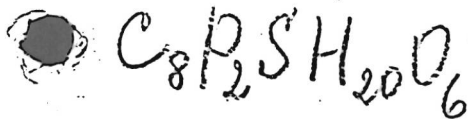
Naturwissenschaften, 1956, 43,

N 6, 124

Исследования соединений фосфора.

...

J



2033
(CH₃)₄S₂P₂ (структура)

1957

Youbeau J., Reinhardt H., Bianchi D.

Z. phys. Chem. (BRD), 1957, 12, n 5-6,
387-392 (нем).

Кольцевой спектр и строение
тетраметилдитиозина.

Рис. 1, 1958, n 10, 11429

W

2

8010

1958

/CH₃)₃PS, Cl₃PS, Br₃PS ($\sqrt{i}$)

Hooge F.N., Christen P.J.

Recueil trav.chim., 1958, 77,

N 9-10, 911-922

Отнесение колебательной частоты ...

C₃PSHg

J

2001

(CH₃O)₃PO, (CH₃O)₃PC (V₁) 1959.

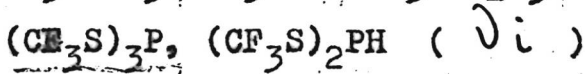
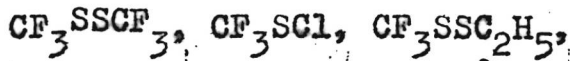
Матвиц Н.С., Понов Е.М., Касачин Н.И.,
Оптика и спектроскопия, 1959, 2, № 2,
170-177

Расчет характеристических полосатий
...

C₃P₃H₃O₃

1959

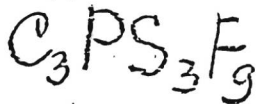
5057



Nabi S.N., Sheppard N.

J. Chem. Soc., 1959, Nov., 3439-3441

Инфракрасные спектры...



J

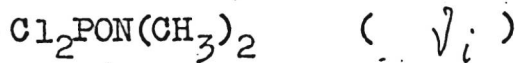
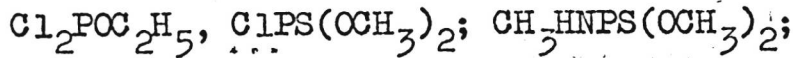
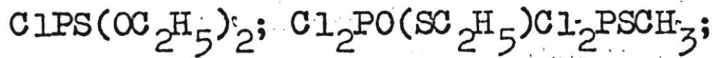
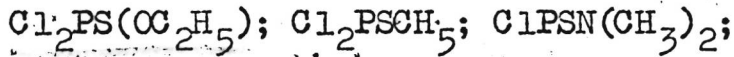
1959

Попов Е.Н., Мастрюкова Т.А.,
Родионова Н.П., Кабачник М.И.
Ж. общ. химии, 1959, 29, № 6,
1998-2006

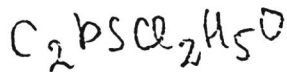
Колебательные спектры...

1959

9432

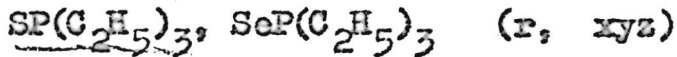


J



1959

8399



Van Meersche M., Leonard A.
Acta crystallogr., 1959, 12, 1053-54

Structure de ...

J

$\text{C}_6\text{PSH}_{15}$



2019

1961

 CH_3PCl_2 , CH_3PSCl_2 , CH_3POCl_2 , $\text{CH}_3\text{PSeCl}_2$ ($\checkmark$ 1)

Quinchon J., LeSech M., Gryszkiewicz-
Trochimowski E.

Bull. Soc. chim. France, 1961, N 4,
735-738

Изучение метилдихлорфосфина и его ...

J

 CPSCl_2H_3

C-P-S

CH₃PSF₂

(CH₃)₂PSF

HK-chemp

Chem.,

335

Schmuckler R.

1963

J. Inorg. and Nucl.

1963, 25, ~4,



(Cu. C-P-F) III

(CH₃)PS

(V_{P=S.})

Bop-2032-IV	1963
-------------	------

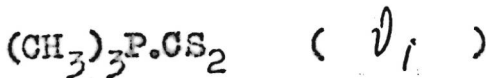
Zingaro R.A.

Inorgan. Chem., 1963,
2, v1, 192-196

Phosphine sulfides and...

M-461

1965



Beg M., Arshad A., Siddiqui M.S.
Canad. J. Chem., 1965, 43, N 3,
608-613

Spectroscopic studies of organophos-
phorus compounds. ...

J
PX, 1965, 21 109



CH_3PSCl_2
 CH_3POCl_2

C-P-S-Hal, Durig, J. R., [BQ-M317-IV/1965]
 Block F., Levin J.W.

Spectrochim. Acta, 21(6), 1105.

Vibrational Spectra of CH_3PCl_2

CH_3POCl_2 and CH_3PSCl_2

CPSCl_2H_3 1842 • III (cm. CH_3PCl_2)

1965

Raman spectra of trimethylphosphine sulfide and bis(dialkylphosphinothioyl) compounds. H. Gerding, D. H. Zipp, F. N. Hooge, G. Blasse, and P. J. Christen (Univ. Amsterdam). *Réc. Trav. Chim.* 84(9-10), 1274-8(1965)(Eng). Raman spectra of $\text{Me}_3\text{P}(:\text{S})$ and of $\text{R}_2\text{P}(:\text{S})\text{P}(:\text{S})\text{R}_2$, where R is Me, Et, Pr, or Bu, and the dipole moments of the latter 3 were measured and are tabulated, the purpose being to establish the P-P stretching frequency. With R = Me, the symmetry of the skeleton part of the mol. is C_{2h} , but with the longer alkyl groups, the mol. and possibly the skeleton itself has a lower symmetry than C_{2h} because of the inconsistency of the observed dipole moments of ~ 1.5 D. relative to the contributions of the alkyl groups alone, and because the observed skeleton vibrations do not fit selection rules for C_{2h} symmetry. P-C and P:S stretching vibrations were observed and identified. Goubreau, *et al.* (CA 51, 17453a), assigned the 430-cm^{-1} band in $\text{Me}_2\text{P}(:\text{S})\text{P}(:\text{S})\text{Me}_2$ to P-P but did not report the 510-cm^{-1} vibration, which was found in all alkyl bis compds. The 430-cm^{-1} band was

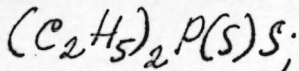
C.A. 1966. 64.4
 4469 ef

$\text{C}_3\text{P}_2\text{S}_2\text{H}_9$
 N1803

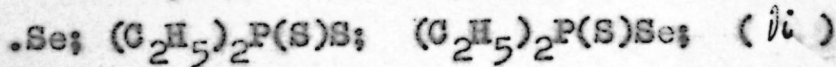
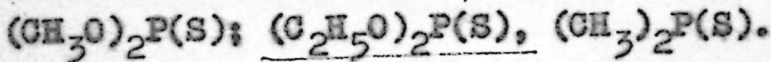
observed also in $\text{Me}_3\text{P}(\text{:S})$ but the 510-cm.^{-1} band was absent, thus establishing the 510-cm.^{-1} band as belonging to the P-P stretching vibration. By using Baudler's P-P force const. of 2.3×10^5 dynes/cm., the P-P vibrational frequency is calcd. to be 500 cm.^{-1} , providing an excellent check. The lowest frequency observed in each spectrum was $160\text{-}170\text{ cm.}^{-1}$; it was assigned to the P-P torsion vibration, which checks closely with the 161-cm.^{-1} band reported by Baudler for P_2H_4 . No corresponding band is found in this region in the $\text{Me}_3\text{P}(\text{:S})$ spectrum.

Ralph H. Steinberg

M-712



1968



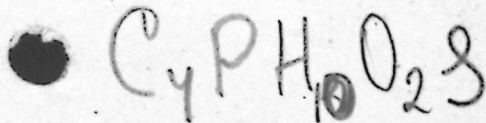
Husebye S.

Acta chem. scand., 1965, 19, N3,
774-776

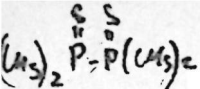
The P=S and P-S stretching ...

J

PX, 1966, 15156



1966



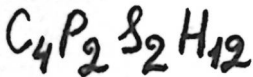
и др.

соед.

фосфора

5 Б150. Колебательные спектры и структура фосфорных соединений I. Дифосфиндисульфиды. Cowley A. H., White W. D. The vibrational spectra and structures of phosphorus compounds I. Diphosphine disulfides. «Spectrochim. acta», 1966, 22, № 8, 1431—1440 (англ.)

Исследованы ИК-спектры поглощения в области 250—1200 cm^{-1} 9 дифосфиндисульфидов вида $R_2P(S)P(S)R_2$



л. 1967.5

(I) в р-рах и тв. состоянии. Получены спектры КР тетраметил-, тетраэтил-, тетра-*n*-бутилпроизводных. Наиболее удовлетворительная интерпретация колебательных спектров всех исследованных соединений получена при предположении, что в тв. состоянии I имеют *транс*-конфигурацию, соотв-щую точечной группе симметрии C_{2h} . Показано, что зависимость от природы заместителей частоты антисимм. вал. кол. связей $P=S$ аналогична соотв-щей зависимости в третичных фосфиновых сульфидах.

Г. Кузьниц

M 1029

1966

CH_3P , CH_3SP , CH_3SeP ($\checkmark$)

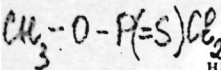
Heraïl F.

Compt. Rend., Ser.C, 1966, 262(21), 1493-
-6

Characteristic infrared absorption
bands of the CH_3P , CH_3SP and
 CH_3SeP groups

J

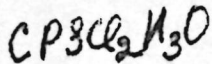
CA., 1966, 65, N6,
8195e



1966

12 Б157. Изучение инфракрасных спектров поглощения фосфорорганических соединений I. Поворотная изомерия и отнесения. Nuquist R. A., Muelder W. W. An infrared study of organophosphorus compounds. I. Rotational isomers and assignments. «Spectrochim. acta», 1966, 22, № 9, 1563—1569 (англ.)

Исследованы ИК-спектры поглощения в области 400—3800 см^{-1} $\text{CH}_3\text{--O--P(=S)Cl}_2$ (I), $\text{CD}_3\text{--O--P(=S)Cl}_2$ (II) и $\text{CH}_3\text{--O--P(=O)Cl}_2$ (III) в т-рном интервале от 25 до -100° . Каждая из молекул I, II и III имеет 21 нормальное колебание, из которых 9 связаны с метильной группой, а 12 со скелетом --C--O--P(=S)Cl_2 или --C--O--P(=O)Cl_2 . Из указанных нормальных колебаний 8 лежат в неисследованной области ниже 400 см^{-1} . Максим. симметрия для 4 возможных геометрич. конфи-



x. 1967. 12

гураций молекул I, II и III C₈. В соответствии с приведенным анализом проведено отнесение основных колебаний I, II, III. Подтверждено, что наблюдающаяся дублетная структура полос вал. кол. ν P=S и ν P=O, а также некоторых других, обусловлена наличием поворотных изомеров. На основании т-рных измерений проведено отнесение полос к различным поворотным изомерам.

Т. Кузьянец

CH₃OP(S)Cl₂ 2
УЗД140. Расчет частот и форм нормальных колебаний метилдихлортиофосфата CH₃OP(S)Cl₂ и диметилхлортиофосфата (CH₃O)₂P(S)Cl. Васильев А. Ф. «Ж. прикл. спектроскопии», 1966, 5, № 4, 524—531 (рез. англ.)

Вычислены частоты и формы норм. колебаний метилдихлортиофосфата и диметилхлортиофосфата. Показано, что согласование расчетных деформационных частот метоксильной группы с эксперим. частотами наблюдается только при изменении симметрии силового поля этой группы с C_{3v} на C_s. Исследована характеристичность колебаний C—O, P—O, P=S и P—Cl в этих молекулах. В ИК-спектрах трихлортиофосфата, метилдихлортиофосфата, диметилхлортиофосфата и триметилтиофосфата изучены интегр. интенсивности полос вышеперечисленных колебаний, а также деф. кол. метоксильной группы. Обсужден вопрос об уменьшении интегр. интенсивности полосы P=S с изменением формы колебаний в этом ряду молекул.

47. 1967. 32

2

1966

 CH_3OPSCl $(\text{CH}_3\text{O})_2$

60452w Calculation of frequencies and normal vibration modes of methyl dichlorothiophosphate $\text{CH}_3\text{OP}(\text{S})\text{Cl}_2$ and dimethyl chlorothiophosphate $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{P}(\text{S})\text{Cl}$. A. F. Vasil'ev. *Zh. Prikl. Spektrosk.* 5(4), 524-31(1966)(Russ). Calcns. are made on the basis of a proposed conformation of $(\text{MeO})\text{Cl}_2\text{PS}$ (I) and $(\text{MeO})_2\text{ClPS}$ (II). The agreement between calcd. and exptl.

detd. frequencies is good only if the proposed conformation in C_s symmetry is used for the calcn. The bond lengths, P:S 1.94, PO 1.80, CO 1.44, PCl 2.02, and CH 1.09 Å., were taken. Tables give (a) the list of mol. coordinates with values of corresponding force consts., (b) the comparison of measured and calcd. frequencies of I and II bands between 170 and 3000 cm^{-1} , and (c) the integral intensities of P:S, PO, CO, and PCl bands (stretching

C.A. 1967. 66. 14

and deformation). The values of integral intensities of methoxyl bands at 1452 and 1458 cm^{-1} obey the additivity rule. The methoxyl groups are isolated from the influence of the P atom in I and II. On the other hand, the increasing no. of methoxyls in the mol. changes the characteristics of the P:S vibration and thus causes a decrease of the integral intensity of the P:S band.

H. Parizkova

1967

$(\text{CH}_3)_2\text{PSCl}$
 $(\text{CH}_3)_2\text{PSBr}$
 $(\text{CH}_3)_2\text{POCl}$

10 Б225. Колебательные спектры фосфорорганических соединений. III. Инфракрасные спектры и спектры комбинационного рассеяния $(\text{CH}_3)_2\text{PSCl}$, $(\text{CH}_3)_2\text{PSBr}$ и $(\text{CH}_3)_2\text{POCl}$. Durig J. R., Wertz D. W., Mitchell B. R., Block F., Greene J. M. Vibrational spectra of organophosphorus compounds. III. Infrared and Raman spectra of $(\text{CH}_3)_2\text{PSCl}$, $(\text{CH}_3)_2\text{PSBr}$, and $(\text{CH}_3)_2\text{POCl}$. «J. Phys. Chem.», 1967, 71, № 12, 3815—3823 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ($4000\text{—}33\text{ см}^{-1}$) и КР-спектры Me_2PSCl , Me_2PSBr и Me_2POCl . Приведены спектры всех исследованных в-в, а также данные по положению, относительной интенсивности и поляризации (в случае КР-спектров), и дано отнесение полос. В колебательных спектрах Me_2POCl полосы колебаний скелета молекулы

ж. 1968-10

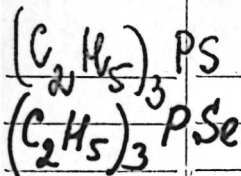
71



отнесены следующим образом (последовательно в ИК- и КР-спектрах, см^{-1}): вал. кол. $\text{P}=\text{O}$ 1246, 1243, асим. вал. кол. $\text{P}-\text{C}_2$ 751,760, сим. вал. кол. PC_2 696,700, вал. кол. $\text{P}-\text{Cl}$ 488,487, внеплоскост. деф. кол. $\text{O}=\text{P}-\text{C}$ 367,370, плоскост. деф. кол. $\text{O}=\text{P}-\text{Cl}$ 334,335, веерн. кол. PC_2 298,297, крутильн. кол. PC_2 237,234. Приведено также полное отнесение колебаний метильных групп и различных комбинаций. В спектрах соединений Me_2PSX отнесены следующие полосы колебаний скелета (последовательно для $\text{X}=\text{Cl}$ и Br , см^{-1}): вал. кол. $\text{P}=\text{S}$ 608,601, вал. кол. PC_2 750,746, вал. кол. $\text{P}-\text{X}$ 455,368. Полосы в спектрах Me_2PSCl и Me_2PSBr , соответственно, при 278 и 263 см^{-1} являются наложением плоскостн. деф. кол. $\text{S}=\text{P}-\text{X}$ и веерн. кол. PC_2 . Наличие только одной полосы вал. кол. группировки PC_2 в спектрах серусодержащих производных, по мнению авторов, связано с сильным отталкиванием двух уровней симметричных колебаний (вал. кол. $\text{P}=\text{S}$ и сим. вал. кол. PC_2), что приводит к высокочастотному сдвигу вал. кол. PC_2 типа A' и перекрыванию его с полосой колебания типа A'' , а также к понижению частоты вал. кол. $\text{P}=\text{S}$ по сравнению со спектрами других соединений, содержащих эту группу ($\sim 675 \text{ см}^{-1}$). Полосы колебаний метильных групп в спектре Me_2PSCl по положению близки к аналогичным полосам в спектре Me_2POCl . В то же время в спектре Me_2PSBr ряд полос колебаний метильной группы расщеплен (асим. вал. кол. $\text{C}-\text{H}$, асим. и сим. деф. кол. CH_3) вследствие снятия вырождения колебаний двух групп, соединенных с атомом. Сообщ. II см. РЖХим, 13Б229.

Ю. В. Киссин

1968



$$\nu_i$$

11625b Vibrational spectra and structure of organophosphorus compounds. V. Infrared and Raman spectra of triethylphosphine sulfide and triethylphosphine selenide. Durig, J. R.; DiYorio, J. S.; Wertz, D. W. (Univ. of South Carolina, Columbia, S.C.). *J. Mol. Spectrosc.* 1968, 28(4), 444-53 (Eng). The ir and Raman spectra of Et_3PS and Et_3PSe were recorded. An assignment of 60 of the 63 fundamental vibrations is given and is discussed. An extremely strong interaction was observed between $\nu(P=S)$ and $\nu(PC_2)$ whereas no significant interaction was apparent between $\nu(P=Se)$ and $\nu(PC_2)$. The lack of any factor group splitting for the skeletal fundamentals is consistent with either a disordered crystal system or very weak intermol. forces in the crystal. Therefore, it was not possible to distinguish from the intramol. fundamental vibrations between the 2 possible crystal systems for these mols. RCKP

C.A. 1968.69.26

$(CH_3)_2PSCl$

1907

ν_i

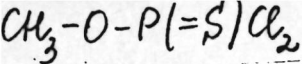
+2

C.A. 1968. 68.4

17234f Vibrational spectra of organophosphorus compounds. III. Infrared and Raman spectra of $(CH_3)_2PSCl$, $(CH_3)_2PSBr$, and $(CH_3)_2POCl$. J. R. Durig, D. W. Wertz, B. R. Mitchell, F. Block, and J. M. Greene (Univ. of South Carolina, Columbia). *J. Phys. Chem.* 71(12), 3815-23(1967)(Eng); cf. *CA* 65: 17912f. The ir spectra of liquid $(CH_3)_2PSCl$ and $(CH_3)_2PSBr$ have been measured from 4000 to 33 cm^{-1} . The ir spectrum of $(CH_3)_2POCl$ dissolved in various solvents has also been measured over the same frequency range. The Raman spectra of S-contg. compds. in the liquid state have been recorded and depolarization values measured. The Raman spectrum of $(CH_3)_2POCl$ was measured both on the pure solid and as a soln. in benzene. Assignment of the fundamental vibrations based on depolarization data and position of the absorption bands is given and discussed. An alternative explanation is presented for the origin of one of the two bands of the proposed doublet for the P:S stretching vibration. 17 references. RCKG

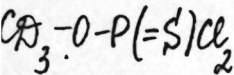
(L)

X



C-P-Si Hal

1967



vi

22 Б133. ИК-спектры и спектры комбинационного рассеяния фосфорорганических соединений. II. Колебательные спектры и отнесения. Nyquist R. A. An infrared and Raman study of organophosphorus compounds. II. Vibrational spectra and assignments. «Spectrochim. acta», 1967, 23 A, № 5, 1499—1507 (англ.)

Изучены ИК-спектры и спектры КР (35—3800 см^{-1}) $\text{CH}_3\text{-O-P(=S)Cl}_2$ и $\text{CD}_3\text{-O-P(=S)Cl}_2$ в жидком состоянии и р-рах в гексане при т-рах 25—66° в сравнении со спектрами твердых в-в. Выполнено отнесение всех нормальных колебательных частот. Сделан вывод о существовании у рассмотренных молекул двух поворотных изомеров как в чистой жидкости, так и в р-ре, в отличие от твердого состояния, где имеется только одна молекулярная конфигурация. Сообщ. I см. РЖХим, 1967, 12Б157. С. Б.

x. 1967. 22

$SP(CH_3)_3$
 $SP(C_2H_5)_3$

спектр

XIV-3047 1968

Гаубман Ф., Көттген Д.

Ф. аоргани. иуд алгем.
Chem., 360, IV 3-4, 182.

Косебейтмелмне спектр
ряда. $SP(CH_3)_3 - SPCl_3$ и
их шйр прейауд.

(см. $SPCl_3$) III

$SPCl_2(CH_3)$
 $SPCl(CH_3)_2$

спектр

XIV-3047 1968

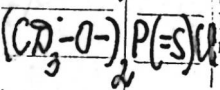
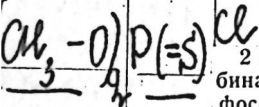
Гаврилов Г., Көттген Д.

З. анал. и алгеб.
Хим., 360, № 3-4, 182.

Косебай. спектр руга
 $SP(CH_3)_3 - SPCl_3$ и их
интерпретация.

(см. $SPCl_3$) III

1968



ν_i ,
структура

2 Б198. Спектры инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния О,О-диметил- и О,О-диметил- d_6 -фосфортиоатхлорида. Nyquist R. A., Muelder W. W. Infrared and Raman study of O,O-dimethyl and O,O-dimethyl- d_6 phosphorochloridothioate. «Spectrochim. acta», 1968, A 24, № 2, 187—201 (англ.)

Исследованы спектры ИК-поглощения ($400-3800 \text{ см}^{-1}$) и КР $(\text{CH}_3-\text{O})_2\text{P}(=\text{S})\text{Cl}$ (I) и $(\text{CD}_3-\text{O}-)_2\text{P}(=\text{S})\text{Cl}$ (II), измерена степень деполяризации линии спектра КР. Приведена интерпретация колебательного спектра исследованных молекул. Замена CH_3 -группы на CD_3 -группу понижает частоты практически всех колебаний. Это сви-

X. 1969. 2

детельствует о значительном смещении форм колебаний. Полагают, что в жидком состоянии и в р-рах I и II существуют в виде двух поворотных изомеров. Однако в интервале т-р $+25$ — -100° не удалось однозначно определить, какие полосы ИК-спектра относятся к тому или иному изомеру. Наличие в спектре КР поляризованных и деполаризованных линий позволяет сделать вывод, что оба поворотных изомера имеют плоское строение.

Резюме

CH₃OPSF₂

инк.

15 Б354. Колебательные спектры и строение фосфор-органических соединений. VI. Инфракрасные спектры и спектры комбинационного рассеяния CH₃OPSF₂ и CD₃OPSF₂. Durig James R., Clark James W. Vibrational spectra and structure of organophosphorus compounds. VI. Infrared and Raman spectra of CH₃OPSF₂ and CD₃OPSF₂. «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 1, 107—119 (англ.)

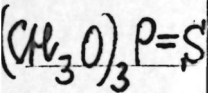
1969

В интервале 4000—33 см⁻¹ сняты ИК-спектры поглощения газ. CH₃OPSF₂ (I) и CD₃OPSF₂ (II) и их р-ров в CS₂ (до 200 см⁻¹); измерены также спектры КР обоих соединений в жидк. и тв. (—150°) состояниях и определены коэф. деполяризации линий. Предложено отнесение частот колебаний. В спектрах обнаружено по одной частоте, отвечающей сильно смешанным крут. кол. метильной группы и Р—О—Р (192 см⁻¹ для I и 176 см⁻¹ для II) и, возможно, взаимодействующим с низкочастотными колебаниями скелета. Полоса вал кол. Р=S

х. 1969. 15

имеет дублетную структуру (676 и 645 см^{-1} для I и 663 и 638 см^{-1} для II), высокочастотная компонента которой исчезает в спектрах КР в тв. фазе. Расщепление $\nu(\text{P}=\text{S})$ указывает на существование энергетически равноценных поворотных изомеров (как следует из т-рой зависимости), один из к-рых обладает плоскостью симметрии. Результаты сравнены с известными для соединений сходного строения CH_3OPCl_2 и $\text{CH}_3\text{OPSCl}_2$. Пред. сообщ. см. РЖХим, 1969, 2Б201. Б. В. Рассадин

1969



ИК-спектр

16 Б189. Колебательные спектры и структура фосфорорганических соединений. VII. Инфракрасные спектры и спектры комбинационного рассеяния $(\text{CH}_3\text{O})_3\text{P}-\text{S}$. Durig J. R., Diyorio J. S. Vibrational spectra and structure of organophosphorus compounds. VII. IR and Raman spectra of $(\text{CH}_3\text{O})_3\text{P}-\text{S}$. «J. Molec. Struct.», 1969, 3, № 3, 179—190 (англ.)

Исследован ИК-спектр в области $4000-33 \text{ см}^{-1}$ жидк. триметилтиофосфата (I) и спектр КР I в жидк. и тв. виде. Дано отнесение основных частот колебаний. Отмечено, что в спектре КР жидк. I в области колебаний $\text{P}-\text{S}$ имеется дублет 621 и 600 см^{-1} . При переходе к спектру КР тв. I сохраняется только низкочастотная компонента дублета. Это дает основание предполагать, что дублетная форма полос колебаний $\text{P}-\text{S}$ обусловлена наличием в жидк. I двух поворотных изомеров примерно равной энергии. Для изомера в тв. I спектральные данные позволяют предполагать симметрию C_3 .

x. 1969.

16

В спектре КР жидк. диметилхлортофосфата наблюдается дублетная форма полос колебаний $P-Cl$ 527 и 493 cm^{-1} , к-рая исчезает в спектре тв. образца, где имеется только одна полоса при 485 cm^{-1} . Здесь также предполагают наличие двух поворотных изомеров. Сообщ. VI см. РЖХим, 1969, 15Б354. Е. Матросов

C-P-S-соед

1970

КР-спектр;

сил. конст.

11 Б240. Колебательные спектры и силовые постоянные молекул переходных рядов $\text{OPCl}_3\text{—OP}(\text{SCH}_3)_3$ и $\text{SPCl}_3\text{—SP}(\text{SCH}_3)_3$. Aboul Wafa O., Lentz A., Goubeau J. Die Schwingungsspektren und Kraftkonstanten der Übergangsreihen $\text{OPCl}_3\text{—OP}(\text{SCH}_3)_3$ und $\text{SPCl}_3\text{—SP}(\text{SCH}_3)_3$. «Z. anorgan. und allg. Chem.», 1970, № 3, 273—282 (нем.; рез. англ.)

Синтезированы соединения $\text{OPCl}_2(\text{SMe})$ (I), $\text{OPCl}(\text{SMe})_2$ (II), $\text{OP}(\text{SMe})_3$ (III), SPCl_2SMe (IV), $\text{SPCl}(\text{SMe})_2$ (V) и $\text{SP}(\text{SMe})_3$ (VI) и измерены их ИК- и КР-спектры в области $30\text{—}3500\text{ см}^{-1}$. Проведен анализ нормальных колебаний, используя точечные группы симметрии C_{3v} для молекул типа $\text{XP}(\text{SR})_3$ и C_s для молекул типа XPY_2Z . Для молекул I—III полосы 1264, 1234 и 1202 см^{-1} отнесены к вал. кол. $\text{O}=\text{P} \begin{smallmatrix} \diagup \\ \diagdown \end{smallmatrix}$, а для моле-

X. 1971. 11

кул IV—VI к вал. кол. $S=P$ $\angle$ отнесены полосы 728, 711 и 700 см^{-1} соотв. Отмечено понижение частот вал. кол. $X=P$ $\angle$ при замене у атома фосфора хлора на меркапто-группу, а также при переходе от кислородсодержащих соединений Р к серусодержащим соединениям. Указано на неизменность частоты вал. кол. $S-Me$ в рядах I—III и IV—VI. На основе проделанного отнесения проведен расчет силовых постоянных молекул I—VI. Силовые постоянные в рядах I—III и IV—VI уменьшаются симбатно уменьшению электроотрицательности заместителя при атоме Р, что согласуется с выводами, сделанными на основе анализа колебательных спектров.

А. П. Курбакова

OPCl_{3-n}(SCH₃)_n C-P-S-calg. 1970

n = 1, 2, 3

v_i
cul. v.

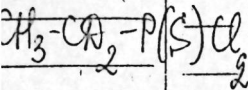
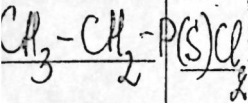
26367s Vibration spectra and force constants in the transition from phosphoryl chloride to S,S', S''-trimethyl trithiophosphate and from thiophosphoryl chloride to trimethyl tetrathiophosphate. Aboul Wafa, Ombarek; Lentz, Axel; Goubeau, J. (Inst. Anorg. Chem., Univ. Stuttgart, Stuttgart, Ger.). *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1970, 378(3), 273-82 (Ger). The ir and Raman spectra of XPCl_{3-n}(SMe)_n (X = O, S; n = 1, 2, 3) are reported, assigned, and the force const. calcd. The bond lengths involved with the P atom decrease when Cl is replaced by the SMe moiety and O by S.

CJJG

C.A. 1971.74.6

C-P-S-соед.

1970



спектр

X. 1970. 19

19 Б156. Изучение колебательных спектров О-этил, О-этил-1,1- d_2 и О-этил-2,2,2- d_3 -дихлортнотрифосфата. Nyquist R. A., Muelder W. W., Wass M. N. Vibrational spectra of O-ethyl, O-ethyl-1,1- d_2 and O-ethyl-2,2,2- d_3 phosphorodichloridodithioate. «Spectrochim. acta», 1970, A26, № 4, 769—780 (англ.)

Исследованы ИК-спектры и спектры КР $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{P}(\text{S})\text{Cl}_2$, $\text{CH}_3-\text{CD}_2-\text{P}(\text{S})\text{Cl}_2$ и $\text{CD}_3-\text{CH}_2-\text{P}(\text{S})\text{Cl}_2$. Многие полосы в спектрах исследованных соединений имеют дублетную структуру. Интенсивности полос дублета в ИК-спектрах изменяются с изменением т-ры. Полагают, что дублетная структура полос связана с наличием ряда поворотных изомеров как в жидк. состоянии, так и в р-ре. Отмечается, что поглощение в области 805—775 cm^{-1} связано с вал. кол. P—O—C₂ групп, а не с вал. кол. P=S групп, полосы к-рых отсутствуют в спектрах соотв-щих фосфатов. Е. Матросов

C-P-S-соед.
св. на об.

Vi,
св. нос.

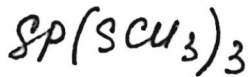
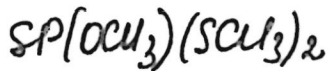
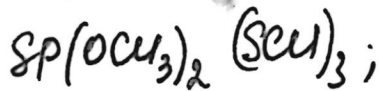
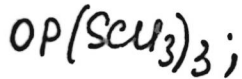
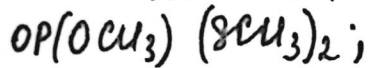
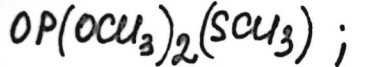
About W.O., et al.

1971

Z. anorg. und
allg. Chem., 1971,
380, n 2, 128.



(C_u. C-P-H-O) III



$(C_2H_5)_3PS$

$(C_2H_5)_4P_2S_2$

2.

(AP);

X. 1941. 17

17 Б96. Органические производные элементов V—VII групп. XVIII. Энергия сопряжения в связи P—P. Масс-спектры фосфинсульфидов. Боголюбов Г. М., Гришин Н. Н., Петров А. А. «Ж. общ. химии», 1971, 41, № 4, 811—815

Получены масс-спектры и определены потенциалы появления (ПП) ионов триэтилфосфинсульфида (I) и тетраэтилдифосфиндисульфида (II). В масс-спектре I довольно интенсивен пик молек. иона M^+ , в то время как в масс-спектре II основным является пик иона $(M/2)^+$. Из ПП иона $(M/2)^+$ в II (m/e 121, 13,3 эв) и ПП α -иона в I (m/e 121, 13,5 эв) найдена энергия связи P—P в II, равная $2,6 \pm 0,3$ эв, в то время как энергия связи P—P в тетраэтилдифосфине равна $3,7 \pm 0,3$ эв. Разница в 1,1 эв (~ 25 ккал/моль) составляет энергию сопряжения в связи P—P II, атомы P в молекуле к-рого обладают неподеленными электронными парами. Масс-спектры получены при энергии ионизирующих электронов 70 эв. Сообщ. XVII см. пред. реферат. Б. С. С.

192

C-P-S-Hal

$(CF_3)_2PSH$

$(CF_3)_2PSD$

ИК-спектр;
брас.
номер

Dobbie R.C.,
Straughan B.P.

1971

Spectrochim. acta,
1971, A27, ~ 2, 255.



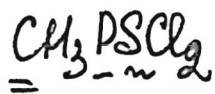
$(\text{Сел. C-P-F})_{III}$

CH₃OPSClF (120s)

1974

Vi
(12757p) Vibrational spectra and structure of organophosphorus compounds. 2. IX. Infrared and Raman spectra of CH₃OPSClF and CD₃OPSClF. Durig, James R.; Clark, James W. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, S.C.). *J. Cryst. Mol. Struct.* 1971, 1(1), 43-54 (Eng). The ir spectra of both MeOPSClF and CD₃OPSClF in the vapor phase were recorded from 4000 to 33 cm⁻¹. The Raman spectra of the liqs. were recorded and a temp. study of the CD₃OPSClF spectrum was completed. Two isomeric configurations are indicated from the low-temp. Raman spectra. The doublet due to the P:S stretching vibration has a sepn. of only 15 cm⁻¹. From the variation in the relative intensity of the doublet, an energy difference of -450 cal/mole was obtained for the 2 isomers. The fundamental vibrations are assigned on the basis of the band positions and isotopic shift factors. The assignments are compared to those previously given for the MeOPSCl₂ and MeOPSiF₂ mols.

C.A. 1974. 752.



Aurig J. R.
Casper J. M.

1941

Vi,
50

J. Phys. Chem. 1941, 45, 13,
1956-1963



C-M-P-S

1971

24 Б102. Органические производные элементов V—VII групп. XX. Точный состав ионов в масс-спектрах алкилфосфинсульфидов и прочность $P=S$ связи. Фридлянский Г. В., Павленко В. А., Виноградов Б. А., Гришин Н. Н., Боголюбов Г. М., Петров А. А. «Ж. общ. химии», 1971, 41, № 8, 1707—1709

Получены масс-спектры высокого разрешения триэтилфосфинсульфида (I) и тетраэтилдифосфиндисульфида (II). Из энергетич. схемы и соотв-щего цикла для иона $(C_2H_5PH_2)^+$ в масс-спектре I определена энергия диссоциации связи $P=S$, равная 3,7 эв (85 ккал/моль). В масс-спектре II ион $(M-32)^+$ обусловлен не потерей

 $D_0(P=S)$

X. 1971. 24

атома S, а разрушением углеводородных заместителей, пик иона ($M-61$)⁺ разрешился в дублет, причем интенсивность иона с двумя атомами S больше, чем с одним, а для иона ($M-89$)⁺ различить осколки с одним и двумя атомами S не удалось. Определение точного состава ионов в масс-спектрах I и II выявляет устойчивость связи P=S к действию электронного удара, что объясняется возможностью дополнительного связывания между атомами элементов V, VI групп при наличии у этих атомов неподеленных электронных пар. Масс-спектры получены при энергии ионизирующих электронов 70 эв. Сообщ. XIX см. РЖХим, 1971, 22Ж21.

В. С. Смоляков

1971

 $P(SCH_3)Cl_2$

11 Б233. Колебательные спектры и силовые постоянные в ряду соединений при переходе от PCl_3 к $P(SCH_3)_3$. Fritzowsky N., Lentz A., Goubert J. Schwingungsspektren und Kraftkonstanten der Übergangsreihe $PCl_3-P(SCH_3)_3$. «Z. anorg. und allg. Chem.», 1971, 386, № 1, 67—72 (нем.; рез. англ.)

Исследованы ИК-спектры и спектры КР $P(SCH_3)Cl_2$, $P(SCH_3)_2Cl$ и $P(SCH_3)_3$. Проведено отнесение частот колебаний, к-рое использовано затем для расчета вал. силовых постоянных изученного ряда соединений. В случае вал. силовых постоянных связей $P-Cl$ и $P-S$ отмечается, что они на 19% ниже соотв-щих величин в аналогично замещенных соединений 5-валентного фосфора.

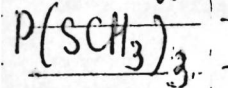
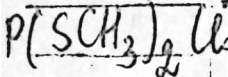
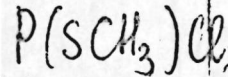
Е. Матросов

(+2)



X. 1972. 11

1971



52141k Vibrational spectra and force constants of transition series $PCl_x(SMe)_{3-x}$ ($n = 0, 1, 2$). Fritzowsky, N.; Lentz, A.; Goubeau, J. (Stuttgart, Ger.). *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1971, 386(1), 67-72 (Ger). No inductive effect is evident in the vibrational spectra of the P(III) compds. $P(SMe)Cl_2$, $P(SMe)_2Cl$, and $P(SMe)_3$. The P-Cl and P-S force consts. are approx. 19% lower than in the analogous P(V) compds. The ir and Raman spectra of the above compds. were recorded. Fundamental vibrational assignments were made. All valence force consts. were calcd. with a simplified valence force field.

v₁

Coul. h.

C.A. 1972, 76, 10

C-P-S, Se

$(CH_3O)_3P=S; (Se)$

$(CH_3O)_2P(=S)Cl_3;$

$(CH_3O)_2P(=O)SCl_3;$

$(Cl_3S)_2P(=S)Cl_3$

Калед.

спектр

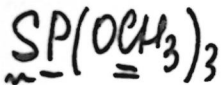
Max sault - Herail F. 1971

J. Chim. phys. et.

phys. - chim. liol., 1971,

68, n 2, 274.

$[Cl_3.(CH_3O)_3PO]_{III}$



Hornung v., et al. 1971

Di,
cell.
norm.

Z. Anorg. Allg. Chem.,
1941, 380, 2, 137.



$(CH_3)_3CPSCl_2$

Holmes R. R.,
Fild M.

1971

7i

Spectrochim. acta,
1971, A24, ~ 9, 1537.



(Cu. C-p. Cl) III

$(CH_3)_3CPSF_2$

Holmes R.R.,
Fild M.

1971

ν_i

Spectrochim. acta,
1971, A24, ~9, 1525.

● (Cur. C-P-F) III

C-P-S-соед

Норменг В., et al 1971

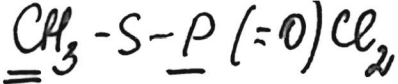
соед. н.;
кол. спектр

Ж. анал. и орг. хим.
Chem., 1971, 380, n 2,
137.

(Cu-C-P-Cl)III

$SP(OCu_3)_2 Cl$

$SP(OCu_3) Cl_2$



XIV-373

1971

19 Б210. Изучение методом колебательной спектроскопии S-метил дихлоридотиоата фосфора. Nyquist R. A. Vibrational spectroscopic study of S-methyl phosphorodichloridothioate. «Spectrochim. acta», 1971, A27, № 5, 697—703 (англ.)

Измерены ИК-спектры (жидкость, р-ры в CCl_4 , Cl_2 и *n*-гексане) и спектр КР жидкого S-метил дихлоридотиоата фосфора Me-S-P(=O)Cl_2 (I) при t -рах 30 и 75° в области $100\text{--}4000\text{ см}^{-1}$. Измерена степень деполаризации линий КР. Проведено отнесение наблюдаемых частот I к различным типам колебаний, используя сравнение ИК- и КР-спектров I со спектрами молекул

Vi.

X. 1971. 19

$\text{O}=\text{PCl}_3$ и $\text{Me}-\text{S}-\text{C}(=\text{O})\text{Cl}$. Отмечено, что в колебательных спектрах полосы, относящиеся к основным колебаниям расщепляются и проявляются как дублетные полосы ($\nu_{\text{P}=\text{O}}$ 1275 и 1266 см^{-1} , $\nu_{\text{C}-\text{S}}$ 732 и 689 см^{-1} ; $\nu_{\text{асим}}\text{PCl}_2\text{S}$ 593 и 579 см^{-1} ; $\nu_{\text{сим}}\text{PCl}_2\text{S}$ 471 и 450 см^{-1}). Сделан вывод, что молекула I существует в виде двух геометрич. изомеров, наличие к-рых обусловлено вращением группы $\text{Me}-\text{S}$ вокруг связи $\text{S}-\text{P}$.

А. П. Курбакова

PF₂NCS

1972

Cradock S.; et al.

фотосп.
спектр

"J. Chem. Soc. Far. Trans"
1972, Part 2, 68, N6, 940-6.

● (ср. PF₂H; III)

$\text{CH}_2\text{ClP(=S)Cl}$

16 Б99. Поворотная изомерия вокруг связи РС в $\text{CH}_2\text{ClP(=S)Cl}_2$. Хайкин Л. С., Вилков Л. В., Васильев А. Ф., Мельников Н. Н., Тулякова Т. Ф., Анакин М. Г. «Докл. АН СССР», 1972, 203, № 5, 1090—1093

Электроннографическое исследование и ИК-спектры (при различных t -рах) паров $\text{CH}_2\text{ClP(=S)Cl}_2$ (I), а также ИК-спектры I в р-рителях различной полярности, свидетельствуют о существовании в рассматриваемых условиях смесей двух конформеров: транс-(симметрия C_s) и гош-(симметрия C_1). Определены основные геометрич. параметры $\text{CH}_2\text{ClP(=S)Cl}_2$ (в скобках приводятся среднеквадратичные амплитуды колебаний): $r(\text{PCl})$ $2,088 \pm 0,005$ ($0,060 \pm 0,006$) А; $r(\text{P=S})$ $1,888 \pm 0,010$ ($0,060 \pm 0,012$) А; $r(\text{PC})$ $1,760 \pm 0,025$ ($0,07 \pm 0,03$) А; $r(\text{CCl})$ $1,735 \pm 0,025$ ($0,05 \pm 0,03$) А; ClPCl $101,0 \pm 1,0^\circ$, ClP=S $114,5 \pm 1,5^\circ$, CP=S $113,5 \pm 2,5^\circ$, PCCl $113,5 \pm 3,0^\circ$.

Автореферат.

Хайкин.

Стр. ра.

X. 1972

16

P-S-C-H-F

1972

Röttgen D.,
Stoll H., Pantzer R., u. gp.

(суд. хим.)

"Z. anorg. und allg. Chem.",
1972, 389, N 3, 269-279.

1/4 см O-P-CF-H
в III карт./
OPF₃-OP(CH₃)₃

$N_3P_3Cl_4(NCS)_2$

15 В91. Геминальная молекулярная структура соединения $N_3P_3Cl_4(NCS)_2$. Dieck Ronald L., Moeller Therald. The geminal molecular structure of the compound $N_3P_3Cl_4(NCS)_2$. «J. Inorg. and Nucl. Chem.», 1973, 35, № 1, 75—82 (англ.)

1973

модель.
спирит

Смесь тримерного фосфонитрилхлорида и NH_4NCS , взятых в мол. отношении 1:2, перемешивают в ац. при 0° в течение 5 час., отфильтровывают NH_4Cl , фильтрат упаривают, а затем охлаждают смесью сухой лед+ац. Выделившиеся желтые кристаллы промывают быстро, несколько раз ац., охлажденным до -78° , а затем перекристаллизацией из н-гептана получают белое крист. соединение $N_3P_3Cl_4(NCS)_2$ (I). Кипячением I в сухом MeOH или EtOH или р-цией I с изопропиламином в эф. получены $N_3P_3Cl_4[NHC(R)S]_2$, где $R=OMe$ (II), OEt (III), $NHCH(Me)_2$ (IV), т. пл. I 57—8, II 133, III 166, IV 104° . Полосы 1192 и 880 см^{-1} в ИК-спектре I указывают на присутствие шестичленного цикла N_3P_3 и связи $P-Cl$ соотв. Сильная полоса 528 см^{-1} , отнесенная к связи $P-NCS$, полосы 2010 и 1080 см^{-1} , обусловленные асимм. и симм. вал. кол. группы $N=C=S$, свидетельствуют о том, что группа NCS связана с атомом P кольца через атом N. В ИК-спектрах II—IV также отмечены сильные полосы в области $\sim 1200\text{ см}^{-1}$, что

X. 1973
N15

обусловлено присутствием цикла N_3P_3 в молекуле. В спектрах II—IV отсутствуют полосы 2010 см^{-1} и проявляются полосы $3200\text{—}3400\text{ см}^{-1}$, отнесенные к $\nu(N-H)$. Эти данные указывают, на протекание р-ции присоединения по двойной связи $N=C$, на присутствие изороданидной группы, и на связь атома N группы NCS с атомом H. На основании масс-спектроскопич. изучения I показано, что в молекуле I присутствуют как атомы Cl так и группы NCS. В спектре ЯМР (P^{31}) р-ра I в хлф. проявляются дублет $-22,0$ млн. д. от группы PCl_2 и триплет $+31,5$ млн. д. от группы $P(NCS)_2$ относительно 85%-ной H_3PO_4 как внешнего стандарта. Отношение площадей дублета и триплета равно 2:1. Константа спин-спинового взаимодействия $J_{P-P}=72,9$ гц. На основании спектроскопич. данных сделан вывод, что в I присутствуют две группы PCl_2 и одна группа $P(NCS)_2$ и что I имеет гемминальную молек. структуру. Аналогичное строение предположено для II и III, т. к. в спектрах ЯМР (P^{31}) этих соединений также проявляются дублеты $-24,3$ и $-24,0$ соотв. и триплеты $+10,8$ и $+12,0$ млн. д. соотв. В спектре ЯМР (P^{31}) IV проявляется только мультиплетный сигнал $-18,5$ млн. д., однако для IV также предположена гемминальная молек. структура.

В. Р. Бердников

$C_2H_2ClP.S_3$

1973

Нагуль В. А.
Семанко В. Н.; вв гр.

геом.

"Же. структур. химии"
1973, 14, N 5, 787-90.

(см. $C_2H_2ClPO_3$; III)

C-P-S-O
Соединен.

1973

14 В206. Колебательные спектры и силовые коэф-
фициенты в рядах $OP(CH_3)_3-OP(SCH_3)_3$ и $SP(CH_3)_3-SP(SCH_3)_3$. Pantzer R., Schmidt W., Goubeau J.
Schwingungsspektren und Kraftkonstanten der Über-
gangsreihen $OP(CH_3)_3-OP(SCH_3)_3$ und $SP(CH_3)_3-SP(SCH_3)_3$. «Z. anorg. und allg. Chem.», 1973, 395,
№ 2-3, 262-272 (нем.; рез. англ.)

Исследованы колебательные спектры $OP(CH_3)_2(SCH_3)$,
 $OP(CH_3)(SCH_3)_2$, $SP(CH_3)_2(SCH_3)$ и $SP(CH_3)(SCH_3)_2$. Проведено отнесение основных колебаний исследованных
молекул. Выполнен расчет нормальных колебаний в
простом валентном приближении. Силовые коэф. связей
 $P-CH_3$ и $P-SCH_3$ практически постоянны в исследо-
ванных рядах. Напротив, силовые коэф. связей $O=P$ и
 $S=P$ при замене CH_3 -групп на SCH_3 -группы увеличи-
ваются.

Резюме

(с.н)

V:

Х. 1973 № 14

1973

/ 7 Д384. ИК-спектр и спектр комбинационного рассеяния 3,4-дихлор-1,2,5-тиадиазола. Richardson A. W. The infrared and Raman spectra of 3,4-dichloro-1,2,5-thiadiazole. «Can. J. Chem.», 1973, 51, № 5, 680—686 (англ.; рез. франц.)

(Vi)

Исследованы колебательные спектры 3,4-дихлор-1,2,5-тиадиазола (I) в газообразном и жидком состоянии. Идентифицированы 15 основных колебаний в предположении типа симметрии C_{2v} молекулы I. Проведен сравнительный анализ спектров I и 3-хлор-1,2,5-тиадиазола и 1,2,5-тиадиазола. Приведены спектры и таблицы частот с их отнесением. Э. В. Б.

Ф. 1973 № 7

41018.6811

Ex-C, Ch, Ph, TO

 $(CF_3)_2P_2S$

96615

02

1974

X-4-6957

Dobbie R.C., Hopkinson M.J., Straughan
B.P. Vibrational spectra of fluorocar-
bon-group V derivatives. Part IV. The
bis-phosphines $(CF_3)_2P_2E$ where
 $E=O, S, \text{ or } Se$. "J. Mol. Struct.", 1974,
23, N 1, 141-143 (англ.)

186 187

0207

0215 ПИВНИТИ

40729.717

Ch, Ex-C, TC

 $\text{SPF}_2(\text{OCH}_3)_3$
 48536

 $\text{SPF}(\text{OCH}_3)_2$

1974

2264

Köttgen D., Stoll H., Pantzer R., Goubeau J. Schwingungsspektren und Kraftkonstanten der Übergangsreihen $\text{OPF}_3\text{-CP}(\text{OCH}_3)_3$ und $\text{SPF}_3\text{-SP}(\text{OCH}_3)_3$. "Z. anorg. und allg. Chem.", 1974, 405, N3, 1275-285
 (нем., рез. англ.)

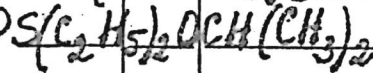
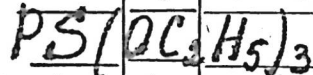
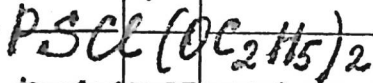
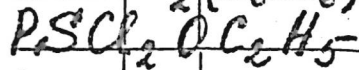
136 136

= 1 41

0155

ВИНИТИ

1974.



(фото-1. спектры)

Бобка В.И.

Лопаткин С.Н.

и др.

«Датчик и спектрометр»

1974, 36 N1, 173-78.

(см. H₂O; III)

$C_2H_5P(S)Cl_2$

1975

Fishman A. I.

nomens.

крупнее

(Di)

Opt. Spektrosk 1975,
38(5) 858-60 (Russ)

(cm CH_2ClPCl_2 ; III)

60115.6618

Ch, TC

96615

1975

 $(CH_3O)_2P=S\dot{C}l \times 45-11158$

K p. N 60115.6617

Oberhammer Heinz. Molecular structures
 of phosphorous compounds. III. Rotatio-
 nal isomeres of O,O-dimethyl phosphoro-
 chloridothioate $(CH_3O)_2P(=S)Cl$. "J. Mol.
 Struct.", 1975, 29, ³ N2, 375-378

(8H11A.)

8543 "8H11A"

509 511

535

1975

$(CH_3)_3 PS$

Wilkins C. J. et al

J. Amer. Chem. Soc., 1975,

номер. 97, no 22, 6352-6358.

X. 1976. no 5



$Cu(CH_3)_3 PO ; III$

XIV-7327

1976

вом. стр. (C2P/S) OCH3)

Беззубов В.М., Наумов В.А.

М. структурн. химии, 1976, 17, N1,

98-102

72105.1886

Ex-C, Ph, TC, Ch

$(CH_3)_3P$; $(CH_3)_3PS$
29848
 $(CH_3)_3PO$

1976

* 4-16113

Elbel Susanne, Dieck Heindirk tom.

Photoelectron spectra of group 5 compounds. Part IV. A study of the E-X bond in R_3EX compounds ($R = Me$ or F ; $E = N$ or P ; $X = O$ or S).

"J. Chem. Soc. Dalton Trans.", 1976, N 18,
1757-1762 (англ.) 0785 пмк

733 743

77

ВИНИТИ

70105.1887

TC, Ph, Ex-c, Ch

 $(CH_3)_3P(S)Cl$

29848

1976

* 9-16114

к р. N 70105.1886

Elbel Susanne, Dieck Heindirk tom.

Photoelectron spectra of group 5 compounds.

Part V. Phosphorus halides, $R_2P(X)Y$ and
 $RP(X)Y_2$ ($R = Me$ or F ; $X = O, S$, or Se ; $Y = Cl$ or Br)."J. Chem. Soc. Dalton Trans.", 1976, N 18,
1762-1768 (англ.)

07.85

733 743

777

ВИНИТИ

60426.8414:

31603

1976

Ch, Ph, TC, MGU

 $(CH_3)_3PS$

* 4-12663

Rojhantalab Hossein, Nibler Joseph W., Wilkins C.J. Raman Spectra and torsional barriers for multitop molecules: trimethylphosphine, trimethylphosphine oxide, trimethylphosphine sulfide and trimethylphosphine selenide. "Spectrochim. acta", 1976, A32, N3, 519-533 (англ.)

584. 587 6 0 0609 ЛАН. ЭИНИТИ

$(CH_3)_3 PS$

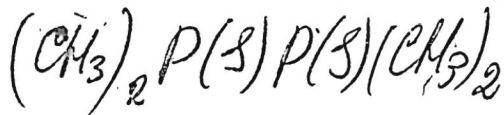
1977

Andreucci M. D. et al

(y)

Atti Accad. naz. Lincei.
Rend. Cl. sci. fis., mat. e natur.
1977, 62, n1, 71-80 (univ)

coll. F₃ PS - III



[OTF. 5157] 1977

(кор.
сукр.)

Mc Quillan G. P. et al.
Spectrochimica Acta
1977, 33A, 233-8.

1977

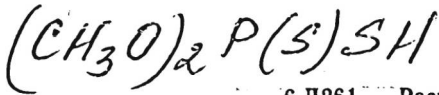
 $\text{Cl}_2\text{P}(\text{S})\text{CHCl}_2$

2 Б188. Пространственная структура дихлорангидрида дихлорметилтиофосфоновой кислоты. Мумжиева Н. Г., Александрова Н. А., Верещагин А. Н., Раевский О. А. «Изв. АН СССР. Сер. хим.», 1977, № 10, 2355—2358

Методами колебательной спектроскопии, дипольных моментов и эффекта Керра исследована пространственная структура дихлорангидрида дихлорметилтиофосфоновой к-ты $\text{Cl}_2\text{P}(\text{S})\text{CHCl}_2$. Показано наличие термодинамич. равновесия двух конформеров с гош-гош- (А) и гош-транс-ориентацией (Б) связей $\text{C}-\text{Cl}$ и $\text{P}=\text{S}$ в жидкости и р-рах. В крист. фазе стабилизирован гош-транс-конформер. Термодинамич. параметры равновесия: $\Delta H_{\text{Б}-\text{А}} = 0,1 \pm 0,2$ ккал/моль, $\Delta S_{\text{Б}-\text{А}} = 1,3 \pm 0,5$ кал/моль·град, $\Delta F = -0,3 \pm 0,2$ ккал/моль. Рассчитанные электр. параметры конформеров: $\mu_{\text{А}} = 2,86 \pm 0,10 \text{ D}$, $\mu_{\text{Б}} = 1,78 \pm 0,10 \text{ D}$, $\text{KK}_{\text{А}} = (157 \pm 20) \cdot 10^{-12}$, $\text{KK}_{\text{Б}} = (2 \pm 20) \cdot 10^{-12}$. Эксперим. значения: $\mu_{\text{эксп}} = 2,14 \pm 0,05 \text{ D}$, $\text{KK}_{\text{эксп}} = (66 \pm 10) \cdot 10^{-12}$, и данные ИК-спектров соответствуют содержанию в равновесии конформера Б в кол-ве $65 \pm 10\%$.

Автореферат

20, 1978, №2



1979

6 Д261. Расчет нормальных колебаний и конформации молекулы $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{P}(\text{S})\text{SH}$. Булгакова Р. А., Шагидуллин Р. Р. «Изв. АН СССР. Сер. хим.», 1979, № 2, 363—365

Проведен расчет частот и форм норм. колебаний шести моделей молекулы $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{P}(\text{S})\text{SH}$. Найдено, что т. наз. $\text{P}-\text{S}$ и $\text{P}=\text{S}$ колебания не локализованы на этих связях, а происходят с участием ближайшего окружения. Колебание ν_{S} -н характеристично по частоте и форме. Показано, что экспериментально наблюдаемые расщепления частот $\langle \nu_{\text{P}-\text{S}} \rangle$ и $\langle \nu_{\text{P}=\text{S}} \rangle$ согласуются с расчетным для разных поворотных изомеров. Частота ν_{S} -н согласно расчету не зависит от внутреннего вращения в молекуле, и ее расщепление в эксперименте должно быть отнесено к различию силовых полей соответствующих конформеров. В качестве преимущественных конформеров выбраны по отношению к $\text{P}=\text{S}$ -связи с транс-гош- и гош-гош-расположением $\text{O}-\text{CH}_3$ -группировок.

Автореферат

Ф. 1979, № 6

$(\text{CH}_3\text{O})_2\text{P}(\text{S})\text{SH}$

1979

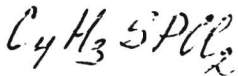
11 Б69. Расчет нормальных колебаний и конформации молекулы $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{P}(\text{S})\text{SH}$. Булгакова Р. А., Шагидуллин Р. Р. — Изв. АН СССР. Сер. хим., 1979, № 2, 363—365

(ν_s)

Проведен расчет частот и форм нормальных колебаний шести моделей молекулы $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{P}(\text{S})\text{SH}$. Найдено, что так называемые «P—S» и «P=S»-колебания не локализованы на этих связях, а происходят с участием ближайшего окружения. Колебание $\nu_{\text{P-S}}$ характеристично по частоте и форме. Показано, что опытно наблюдаемые расщепления частот « $\nu_{\text{P-S}}$ » и « $\nu_{\text{P=S}}$ » согласуются с расчетными для разных поворотных изомеров. Частота $\nu_{\text{S-H}}$ согласно расчету, не зависит от внутреннего вращения в молекуле и ее расщепление в эксперименте должно быть отнесено к различию силовых полей соотв-щих конформеров. В кач-ве преимущественных выбраны конформеры с транс-гош и гош-гош расположением группировок $\text{O}-\text{CH}_3$ по отношению к связи $\text{P}=\text{S}$. В каждом из них, в свою очередь, возможно образование доп. поворотных изомеров за счет вращения группы SH.

Автореферат

x.1979, N 11



молекула
структура

20.10.82.113

3 Б81. Электронографическое исследование строения молекулы 2-тиенилдилхлорфосфина. Шаидулин С. А., Наумов В. А. «Ж. структур. химии», 1979, 20, № 4, 728—732

Методом газовой электронографии при 40° исследовано строение молекулы $C_4H_3SPCl_2$. Получены след. значения межъядерных расстояний (А) и углов (град): $r_a(C-H)=1,075$ (принято); $r_a(C-C)=1,437(23)$; $r_a(C=C)=1,379(11)$; $r_a(S-C)=1,739(11)$; $r_a(P-C)=1,776(25)$; $r_a(P-Cl)=2,059(3)$; $S-C-P=128,7(9)$; $C-S-C=93,4(1,1)$; $C-P-Cl=99,2(1,1)$; $Cl-P-Cl=97,6(6)$; $C_P-C-C=113,3$; $S-C_P-C=110,3$; $P-C-C=121,4$; $SC_P-PCl_1=0$; $SC_P-PCl_2=98,9$; угол поворота группы PCl_2 относительно тиофенового кольца $\varphi=47,9(3,4)$ ($\varphi=0$, если плоскость тиофенового кольца копланарна с биссектрисой угла $Cl-P-Cl$ и группа PCl_2 находится в син-положении по отношению к атому серы). Расчет невалентных взаимодействий по Хиллу приводит к двум устойчивым конформациям: при $\varphi=0^\circ$ (более устойчива) и $\varphi=180^\circ$. Неблагоприятное с учетом стерич. факторов взаимное расположение группы PCl_2 и тиофенового кольца ($\varphi=47,9^\circ$) объясняется кулоновским взаимодействием положительно заряженного атома серы и отриц. заряженного атома хлора.

Г. В. Гиричев

$(CH_3)_3PS$

Commu 8369 / 1979

Watarai F., et al.

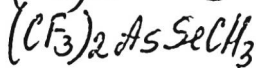
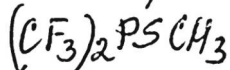
Суд. нмер.

J. Mol. Struct., 1979

и.к., Радан
смер

55, 169-176

116222. Колебательный спектр. (CF₃)₂EXCH₃ [E=P, As; X=S, Se]. 980
мар. и. координатный анализ. (CF₃)₂EXCH₃ [E=P, As; X=S, Se].



(X=S, Se). Dehnert P., Demuth R., Grobe J. Schwingungsspektren und Normalkoordinatenanalyse von (CF₃)₂EXCH₃ — Verbindungen (E=P, As; X=S, Se). «Spectrochim. acta», 1980, A36, № 1, 3—6 (нем.; р. англ.)

Измерены ИК-(4000—250 см⁻¹) и КР-спектры соединений (CF₃)₂EXCH₃ (E=P, As; X=S, Se) в газ. и жидк. состояниях. Дано отнесение колебаний (симметрия C_s) на основании интенсивностей ИК- и КР-полос, степени деполяризации линий КР и сравнения со спектрами соединений CH₃XH и (CF₃)₂EY (Y=Cl, Br, J). Проведен расчет частот и форм нормальных колебаний и вычислены силовые постоянные в модифицированном валентно-силовом поле. В расчете группу CH₃ считали точечной массой, структурные параметры были взяты из (CF₃)₃E и (CH₃)₂X, начальные силовые постоянные для нулевого приближения — из HCF₃, (CF₃)₂EY и CH₃XH. При переходе от соединений с E=P к E=As наблюдается тенденция к некому снижению величины K(C—F); величины K(C—X) и K(E—X) понижаются при переходе от X=S к X=Se, тогда как замена P на As практически не сказывается на K(X—C).

Е. Разумова

и.к. КР -
-спектр

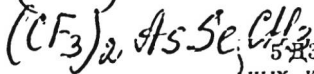
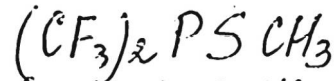


2. 1980. 11

116 - 9111
XIV - 11X

1980

XIV-9111

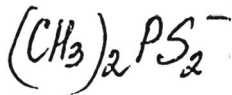


5-Д370. Колебательные спектры и анализ нормальных колебаний соединений $(\text{CF}_3)_2\text{EXCH}_3$ ($\text{E}=\text{P}, \text{As}$; $\text{X}=\text{S}, \text{Se}$). Schwingungsspektren und Normalkoordinatenanalyse von $(\text{CF}_3)_2\text{EXCH}_3$ — Verbindungen ($\text{E}=\text{P}, \text{As}$; $\text{X}=\text{S}, \text{Se}$). Dehnert P., Demuth R., Grobe J. «Spectrochim. acta», 1980, A36, № 1, 3—6 (нем.)

(9)

Получены ИК-спектры поглощения $(\text{CF}_3)_2\text{EXCH}_3$ ($\text{E}=\text{P}, \text{As}$; $\text{X}=\text{S}, \text{Se}$) в области $4000\text{--}250\text{ см}^{-1}$ в газообразном состоянии. Также получены спектры комб. рас. в жидком состоянии при возбуждении излучением Ar^+ -лазера ($\lambda=488,0\text{ нм}$, $P=0,5\text{ Вт}$). Дано отнесение колебаний в предположении локальной симметрии C_s . Проведен анализ норм. колебаний. Измерена степень деполяризации линий комб. рас. Библ. 13. К. Э. М.

ф. 1980 № 5

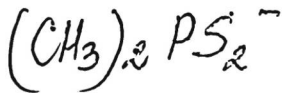


И.Р. Спектр,
Сил. пост.

5 Б258. Инфракрасный спектр аниона диметилдитиофосфината, $(\text{CH}_3)_2\text{PS}_2^-$. Расчет частот и форм нормальных колебаний и силового поля. Юри—Бредли. Silaghi-Dumitrescu I., Haiduc I. The infrared spectrum of dimethyldithiophosphinato anion $(\text{CH}_3)_2\text{PS}_2^-$. Normal coordinate analysis and Urey-Bradley force field calculation. «Rev. roum. chim.», 1980, 25, № 6, 815—821 (англ.)

Измерен ИК-спектр ($4000-400 \text{ см}^{-1}$) $\text{NaS}_2\text{P}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Проведен расчет частот и форм нормальных колебаний аниона $(\text{CH}_3)_2\text{PS}_2^-$ и вычислены силовые постоянные в модифицированном поле Юри—Бредли. Вал. кол. P—C лежат при 726 (симм.) и 740 (анти-симм.) см^{-1} , вал. кол. P—S— при 495 и 600 см^{-1} . Симм. вал. кол. P—C смешано с симм. вал. кол. P—S и деф. кол. CPC. Силовая постоянная $K(\text{P—C}) = 3,08 \text{ мдин/А}$, т. е. практически не отличается от соответствующей величины в триметилфосфине. Силовая постоянная P—S является почти средним значением между величинами $K(\text{P—C})$ и $K(\text{P—S})$, что свидетельствует о делокализации π -электронной плотности в PS_2^- .
Е. Разумова

Х.1981. N5



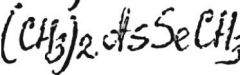
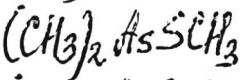
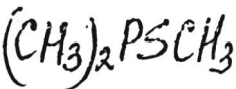
1980

93: 194886g The infrared spectrum of dimethyldithio-
phosphinato anion $(\text{CH}_3)_2\text{PS}_2^-$. Normal coordinate analysis
and Urey-Bradley force field calculation. Silaghi-Dumitrescu,
Ioan; Haiduc, Ionel (Chem. Dep., Babes-Bolyai Univ., R-3400
Cluj-Napoca, Rom.). *Rev. Roum. Chim.* 1980, 25(6), 815-21
(Eng). Normal coordinate anal. was carried out for a simplified
model of the Me_2PS_2^- anion in the Urey-Bradley force field
approxn. The force consts. were refined by the least squares
procedure. The best set of force consts. was then used for the
automatic assignment of the obsd. IR active frequencies. The
data show that the P-S and P-C sym. stretching vibrations are
coupled to a considerable extent. The P-S force consts. in the
compd. investigated lies between those of fp:s (double bond) and
 fp-s (single bond) suggesting π bond delocalization in the anion.

Jc
C.A. 1980

C.A. 1980, 13 N 20

1981



фотомон.
спектр

(3)

(+1) ☒

X. 1981, N 19

19 Б159. Фотоэлектронные спектры с возбуждением He-I соединений $(\text{CH}_3)_2\text{PSCH}_3$, $(\text{CH}_3)_2\text{AsSCH}_3$, $(\text{CH}_3)_2\text{AsSeCH}_3$ и $(\text{CH}_3)_2\text{PSeCH}_3$. Böhm Michael C., Eckert-Maksić Mirjana, Gleiter Rolf, Grobe Joseph, Le Van Duc. Die He(I)-Photoelektronenspektren von $(\text{CH}_3)_2\text{PSCH}_3$, $(\text{CH}_3)_2\text{AsSCH}_3$, $(\text{CH}_3)_2\text{AsSeCH}_3$ und $(\text{CH}_3)_2\text{PSeCH}_3$. «Chem. Ber.», 1981, 114, № 6, 2300—2308 (нем.; рез. англ.)

Измерены фотоэлектронные спектры, возбужденные излучением He-I, соединений $(\text{CH}_3)_2\text{PSCH}_3$ (I), $(\text{CH}_3)_2\text{AsSCH}_3$ (II), $(\text{CH}_3)_2\text{AsSeCH}_3$ (III) и $(\text{CH}_3)_2\text{PSeCH}_3$ (IV). Отнесение пяти первых ионизационных полос сделано по аналогии с исследованными ранее спектрами $(\text{CH}_3)_3\text{X}$, $(\text{CH}_3)_2\text{XX}(\text{CH}_3)_2$ ($\text{X}=\text{P}, \text{As}$) и $(\text{CH}_3)_2\text{Y}$, CH_3YYCH_3 ($\text{Y}=\text{S}, \text{Se}$) и на основании квантовохимических расчетов методом МО ЛКАО в приближениях ППДП, ЧПДП и МПДП. Два первых Пт ионизации относятся к орбиталям, являющимся симм. и антисимм. комбинациями неподеленных пар гетероатомов. Они имеют след. значения (эВ): I 8,6, 9,2; II 8,5, 9,2; III 8,2, 9,0; IV 8,3, 9,1. В. Фаустов

$\text{PClS}(\text{OC}_2\text{H}_5)_2$

1981.

Chattopadhyay S.,
et al.

фототектр.
спектр.

J. Electron Spectrosc.
and Relat. Phenom.
1981, 24, N1, 27-36.

(см. PCl_3 ; III)

$P(SH)S(OC_2H_5)_2$

1981

Chattopadhyay S.,
et al.

фотоэлектр.
спект.

J. Electron Spectrosc.
and Relat. Phenom.,
1981, 24, N1, 27-36.

(см. PCl_3 ; III)

$[(CH_3)_3P]$

гетероциклическая
молекула

x.1981.N11

1981
11 Б90. Исследование строения молекулы триметил-
фосфита методом газовой электронографии. Ту-
зова Л. Л., Наумов В. А., Галиакбе-
ров Р. М., Офицеров Е. Н., Пудовик А. Н.
«Докл. АН СССР», 1981, 256, № 4, 891—894

Электронограммы получены при расстояниях сопло-
испарителя — фотопластинка 185 и 364 мм и т-ре 80° С.
Обработка эксперим. кривой рассеяния от 3,25 до
25,25 Å⁻¹ дала след. длины связей (r_a), валентные углы
и основные амплитуды колебания: P—S 2,115(0,004),
S—C 1,183(0,007), C—H 1,150(0,030) Å, SPS

$94,0(0,6)$, PSC $115,3(0,7)$, SCH $107,2(3,4^\circ)$, $[l_{P-S}$
 $0,049(0,004)$, l_{C-S} $0,046(0,008)$, l_{C-H} $0,090(0,023)$,
 $l_{P...C}$ $0,072(0,015)$, $l_{S_2...S_2}$ $0,135(0,012)$, $l_{S_2...C_6}$ $0,134(0,060)$,
 $l_{S_2...C_7}$ $0,128(0,043)$, $l_{S_3...C_5}$ $0,134(0,060)$, $l_{S_3...C_7}$ $0,128$
 $0,043)$, $l_{S_4...C_5}$ $0,163(0,076)$, $l_{C_4...C_7}$ $0,163(0,076)$,
 $l_{C_5...C_6}$ $0,211(0,174)$, $l_{C_5...C_7}$ $0,140(0,137)]$ А. Основным
 конформером является цис-цис-транс-конформер сим-
 метрии C_s с углами вращения $\varphi_1 = -5,6(4,8)$, $\varphi_2 =$
 $= 5,6(4,8)$, $\varphi_3 = 180^\circ$. Возможна также примесь
 (20—30%) цис-конформера симметрии C_{3v} ($\varphi_1 = \varphi_2 =$
 $= \varphi_3 \simeq 0^\circ$). По резюме

Ummuck 14982!

1982

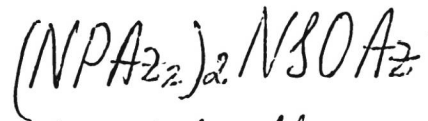


Cotton F.A., Li-
ess J.G., et al.,

Смесь

Inorg. Chem., 1982,
21, N 8, 3123-3126.

Dmmuck 149351 1982



Раман. и
иК спектры,
Di

Mangait M., Alix A.P.,
et al.,

γ. Raman. Spectrosc.,
1982, 13, N1,
44-52.

[Omnux 15499]

1982



Rankin D.W.H., Todd M.R.
et al.,

монитор.
структура

J. Chem. Soc. Dalton
Trans., 1982, N10, 2079-
2083. ●

$\text{PF}_2(\text{SCH}_3)$

1983

Arnold David E. J.,
Gundersen Grete.,
et al.

структурн.
параметры,
электромо-
мент.

J. Chem. Soc., Dalton
Trans. 1983, (9), 1989-
1994.

(соед. $\text{Se}(\text{PF}_2)_2$; III)

CH_3PSCl_2

1983

12 Б1185. Спектры и строение фосфорорганических соединений. 22. Микроволновые, инфракрасные, спектры комбинационного рассеяния, структура, отнесение колебаний и анализ нормальных координат метилфосфонотиодифторида. Spectra and structure of organophosphorus compounds. 22. Microwave, infrared, and Raman spectra, structure, vibrational assignment, and normal-coordinate analysis of methylphosphonothioic difluoride. Durig J. R., Meadows J. A., Li Y. S., Stanley A. E. «Inorg. Chem.», 1983, 22, № 26, 4134—4141 (англ.)

М.п., ИИ.ЛОСН.
Ри;

Получены МВ-спектры низкого разрешения метилфосфонотиодифторида (I) CH_3PSCl_2 в диапазоне 18,5—39,0 ГГц. Наблюдались переходы α - и β -типов, проведено отнесение R -ветвей для основного колебательного состояния. Для него получены и вращательные постоянные: $A=4366,24\pm 0,03$; $B=2596,38\pm 0,01$ и $C=2496,86\pm 0,01$ МГц. Подбором по методу наименьших

Х. 1984, 19, N 12

квадратов с учетом структурных параметров для Ме-группы и валентных углов получено: $r(\text{P—C}) = 1,809 \pm 0,004$ А, $r(\text{P—F}) = 1,547 \pm 0,003$ А, $r(\text{P—S}) = 1,878 \pm 0,003$ А. Расщепление в спектре, связанное с вращением Ме-группы, не наблюдалось. ИК-спектры ($3500\text{—}40$ см $^{-1}$) и КР-спектры ($3500\text{—}10$ см $^{-1}$) получены для газа и для тв. I. КР-спектры жидкости сняты с поляризацией, качественно получены степени деполяризации полос. Полосы 956 и 926 см $^{-1}$ отнесены к симм. и антисимм. вал. кол. PF_2 , предложены в качестве характеристич. групповых частот. Все нормальные колебания отнесены с учетом деполяризации и групповых частот. Проведен анализ нормальных координат, используя модифицированное валентное силовое поле, вычислены частоты и распределение потенциальной энергии. Барьер внутреннего вращения в мол-ле I равен $3,82$ ккал/моль. Пред. сообщ. см. «J. Mol. Struct.» 1982, 78, 247.

А. Л. Сидельковский

Me SPCl₂
и гр.

1983

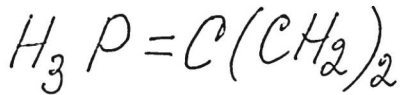
8 Б1083. Электронографическое изучение структуры тиофосфитов. Катаева О. Н., Синяшин О. Г. «2 Всес. конф. мол. учен. по физ. химии, Москва, 10—14 окт., 1983». М., 1983, 94—95

Методом газовой электронографии определено геометрич. строение молекул MeSPCl₂ (I), MeSPBr₂ (II) и (MeS)₂PCl (III). С учетом спектроскопич. данных установлено, что для III из трех возможных конформаций, характеризующихся цис-, гош- и транс-ориентацией метильной группы относительно неподделенной электронной пары фосфора, в газовой фазе реализуется смесь гош- и транс-форм. С использованием метода силового поля для I проведен расчет среднеквадратичных амплитуд колебаний. Для II эксперим. данным в равной степени соответствуют гош- и транс-модели, а также их смеси. Найдены след. значения геометрич. параметров молекул: для I $r(\text{C—S})$ 1,795А, $r(\text{S—P})$ 2,082 А, $r(\text{P—X})$ 2,038А, CSP 98,8°, SPX 100,7°, XPX 99,6°, для II $r(\text{C—S})$ 1,829А, $r(\text{S—P})$ 2,116А, $r(\text{P—X})$ 2,244А, CSP 99,3°, SPX 101,3°, XPX 100,6°, для III $r(\text{C—S})$ 1,810А, $r(\text{S—P})$, 2,110А, $r(\text{P—Cl})$ 2,043А.

Е. Розенберг

кометр., струк.

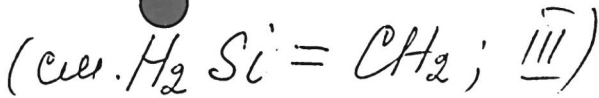
X. 1984, 19,
N 8



1983

распредел.
свойств.
исслед.

Osamura Y., Yamaguchi Y., Saxe P., et al
J. Mol. Struct., 1983, 103,
Suppl. Theorchem, 12, 183-
- 196.



CH_3SPb_2

и др.

1984

Катаева О.Н.,

Автореферат диссертации
на соискание ученой степе-
ни К.Х.Н., Казань, 1984.

структура

Электроннографическое исследова-
ние структуры молекул некоторых
фосфинов и тиофосфитов

$(\text{CH}_3)_3\text{PS}$ Алексеевко Л.Н., 1985
Торчаков В.В. и др.

Электрон. тез. докл. 8 Всес. Конгр. по
структ. химии фосфорорганич. сое-
дин., посвящ. 80-летию
реакции А.Е. Арбузова, Казань,
13-16 мая, 1985. Ч. I. Казань,
1985, 117.

(ср. H_3PO ; III)

$(CH_3)_2DPS(2u)$

1985

103: 131469c Vibrational spectra of deuterated dimethylphosphine sulfide. Popova, I. A.; Sarukhanov, M. A.; Kharitonov, Yu. Ya. (Mosk. Khim.-Tekhnol. Inst., Moscow, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1985, 30(7), 1645-9. (Russ). The IR absorption (200-4000 cm^{-1}) and laser Raman spectra were studied of $(CH_3)_2DPS$ in the liq. state. On the basis of exptl. data an assignment was made of the valence and deformation vibrations of the PH and PD groups. An anal. of normal vibrations was conducted.

(lik cherkmp)

C. A. 1985, 103, N 16.

$(CH_3)_2 DPS$

1985

11 Л180. Колебательные спектры дейтеропроизводного диметилфосфинсульфида. Попова П. А., Саруханов М. А., Харитонов Ю. Я. «Ж. неорганической химии», 1985, 30, № 7, 1645—1649

Изучены ИК-спектры поглощения ($200-4000\text{ см}^{-1}$) и лазерный спектр КР дейтерированного диметилфосфинсульфида $(CH_3)_2DPS$ в жидком состоянии. На основании эксперим. данных проведено отнесение валентного и деф. кол. РН- и РD-групп. Проведен анализ нормальных колебаний моделей молекул диметилфосфинсульфида и его дейтероаналога, уточнено силовое поле, исследована характеристичность колебаний по частоте и форме.

Резюме

спектр, ν_i ,
м.п., см.п.

ср. 1985, 18, N 11

$\text{ClCH}_2\text{P}(\text{S})\text{F}_2$

Om 24847 1986

105: 123209u Spectra and structure of organophosphorus compounds. XXIX. Low-resolution microwave, infrared, and Raman spectra, conformational stability, vibrational assignment, and normal coordinate calculations for (chloromethyl)phosphonothioic difluoride. Van der Veken, B. J.; Coppens, P.; Johnson, R. D.; Durig, J. R. (Cent. Antwerpen, Rijksuniv., 2020 Antwerp, Belg.). *J. Phys. Chem.* 1986, 90(19), 4537-44 (Eng). The low-resoln. microwave spectrum of $\text{ClCH}_2\text{P}(\text{S})\text{F}_2$ was studied at 26.5-39 GHz. From the spacing of the central transitions for the near-prolate top, the values of 2224 MHz, for $B + C$, for the ^{35}Cl isotope and 2167 MHz for the ^{37}Cl isotope are consistent with the conformer that has the CCl bond trans to the PS bond. The IR (40-3500 cm^{-1}) and Raman (20-3500 cm^{-1}) spectra of the gas and solid were recorded. The Raman spectrum of the liq. was recorded, and qual. depolarization values were obtained. Both the trans and gauche conformers were identified in the vibrational spectra of the fluid phases. From a temp. study of the Raman spectrum of the liq. phase, the enthalpy difference between the trans and gauche conformers was $149 \pm 31 \text{ cm}^{-1}$ ($426 \pm 89 \text{ cal/mol}$), with the trans conformer being thermodyn. preferred. Band contour simulation of

(48 caxmp,
V₀)

C.A. 1986, 105, N 14

the IR gas-phase bands shows that the trans conformer is dominant in this phase. Upon crystn., only the trans conformer remains in the solid state. The asym. torsion for the trans conformer was obsd. as a series of closely spaced Q branches, beginning at 80.11 cm^{-1} and falling to lower frequency, with the corresponding transitions for the gauche conformer beginning at 69.31 cm^{-1} . These transitions were to obtain the potential consts. for the asym. torsion and an enthalpy difference of $206 \pm 24\text{ cm}^{-1}$ ($584 \pm 69\text{ cal/mol}$), with the trans conformer more stable. All of the normal modes were assigned based on IR band contours, depolarization values, and group frequencies. A normal coordinate calcn. was carried out, utilizing a modified valence force field, to calc. the frequencies and the potential energy distribution. These results are compared to the corresponding quantities of some similar compds.





1986

Durig J.R., Hizer T.J.,

J. Mol. Struct., 1986;
145, N 1-2, 15-31.

спектр,
 силовые
 константы,
 структура



1987

(Om. 27382)

$\text{C}_2\text{H}_5\text{S}^+\text{P}^-\text{Cl}_2$
 $(\text{C}_2\text{H}_5\text{S})_3\text{P}$
колеб.-
спектры

Филиппова Е.А., Казюба С.А.,
и др.,

Дл. волн. спектроскопии,
1987, 46, N 5, 761-766.

$(MeS)_3P$ [am. 27690]

1987

Kamaeva O.H., Karymov B.A.,

структура Ал. структур. химии,
(электро- 1987, 28, N 5, 153-155.
нография)

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{P}(\text{S})\text{F}_2$

От 30 191 1988

24 Б1407. Спектры и структура органофосфорных соединений. XXXIII. Микроволновый, инфракрасный и комбинационного рассеяния спектры, структура, конформационная стабильность и отнесение колебательных частот для этилфосфониодифторида. Spectra and structure of organophosphorus compounds. XXXIII. Microwave, infrared, and Raman spectra, structure, conformational stability, and vibrational assignment for ethylphosphonothioic difluoride. Durig J. R., Johnson R. D., Nanaie H., Hizer T. J. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 12, 7317—7330 (англ.)

М.П.

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 26,5—39,5 ГГц измерены вращат. спектры гош- и транс-конформеров девяти изотопич. образцов этилфосфониодифторида, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{P}(\text{S})\text{F}_2$ (I) и D-, ^{13}C -, ^{34}S -изотопозамещенных, в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен в

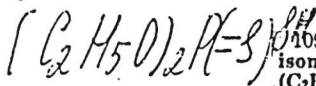
X. 1988, N 24

приближении полужесткой модели асимм. волчка. Вращат. постоянные для гош-**I** и транс-**I**, соотв., равны в МГц $A=2711,62(2)$, и $3873,71(22)$, $B=2117,69(1)$ и $1664,09(0)$, $C=1625,27(1)$ и $1564,37(0)$. При ряде допущений определена возможная структура конформеров. Из измерений ИК- и КР-спектров в области частот $20-3500\text{ см}^{-1}$ для **I** и $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{P(S)F}_2$ в газовой и тв. фазах определен барьер внутреннего вращения метильной группы для транс-**I** $2,31\text{ ккал/моль}$ и установлено, что транс-конформер на $180(106)\text{ ккал/моль}$ более стабилен, чем гош-конформер. Сообщ. XXXII см. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, 2769.

С. Н. Мурзин



1988



109: 239590y. Vibrational spectra, force fields, and rotation isomers of the dithiophosphoric acids $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{P}(=\text{S})\text{SH}$ and $(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_2\text{P}(=\text{S})\text{SH}$. Filippova, E. A.; Katsyuba, S. A.; Shagidullin, R. R.; Shegeda, V. N. (USSR). *Zh. Prikl. Spektrosk.* 1988, 49(3), 454-60 (Russ). Vibration spectra and force fields of $(\text{MeO})_2\text{P}(=\text{S})\text{SH}$ and $(\text{EtO})_2\text{P}(=\text{S})\text{SH}$ were studied. Both compds. are conformationally inhomogeneous in a liq. phase. Both trans- and gauche-conformation of MeO groups were obsd. in $(\text{MeO})_2\text{P}(=\text{S})\text{SH}$ mols. The $(\text{MeO})_2\text{P}(=\text{S})\text{SH}$ mols. have mainly gauche oriented OC-bonds. Both dithio acids exist in 2 cryst. modifications. For $(\text{MeO})_2\text{P}(=\text{S})\text{SH}$ there is a different ratio of amts. of tTG+ and gTG- conformers for these 2 modifications, while for $(\text{EtO})_2\text{P}(=\text{S})\text{SH}$, the cryst. modifications differ by the amts. of nonassocd. and H-bonded SH-groups. At least 3 conformers with different orientation of MeO group exist in a liq. and solns. of $(\text{MeO})_2\text{P}(=\text{S})\text{SH}$. The effective enthalpy difference of these conformers is $3500 \pm 400 \text{ J/mol}$.

chem. norm.

ICK, Stz H KOK

ФОРМУЛА

C.A. 1988, 109, 426

C₂H₅PSF₂

Om. 30 191

1988

109:101036r Spectra and structure of organophosphorus compounds. XXXIII. Microwave, infrared, and Raman spectra, structure, conformational stability, and vibrational assignment for ethylphosphonothiole difluoride. Durig, J. R.; Johnson, R. D.; Nanaie, H.; Hizer, T. J. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, SC 29208 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(12), 7317-30 (Eng). The microwave spectra of EtP(S)F₂ and 8 isotopic species were investigated at 26.5-39.5 GHz. Only *a*-type transitions were obsd. and *R*-branch assignments were made for all the isotopic species in the ground vibrational state for both the gauche and trans (Me group trans to the P=S bond) conformers from which the rotational consts. were detd. From these data, the complete structural parameters were detd. for the conformers. The IR (40-3500 cm⁻¹) and Raman (20-3500 cm⁻¹) spectra of the gaseous and solid EtP(S)F₂ and CD₃CD₂P(S)F₂ and the Raman spectrum of the liq. were recorded. Both trans and gauche conformers were identified in the vibrational spectra of the fluid phases, but only the trans conformer remains in the solid state and a complete vibrational assignment is proposed for the trans conformer. The barrier to Me rotation for the trans conformer was 808 cm⁻¹ (2.31 kcal/mol).

Me cncmp

M-N.

C.A. 1988, 109, 14 12.

CH₃PS

(DM-30949)

1988

Schneider W., Thiel W.
et al.,

ab initio
pccrsm,
cud. rocm.

J. Phys. Chem. 1988, 92,
N 20, 5611-5619.

$(CH_3)_3 P_1 S$ (Om. 30 949) 1988

Schneider W.,

ab initio Komornicki A., et al.

paràm J. Phys. Chem., 1988,
cui. nocu., 92(), 5611-19.

Vi;

(cui.  $H_3 PO$; III)

$(CH_3)_3PS$
и деутероза-
мезен.

мб спектр,
структурн.
парам., ν ,
см. по см.

С.А. 1989, 110,
N 8

1989

110: 65918q Spectra and structure of organophosphorus molecules. 39. Microwave, Raman, and infrared spectra of trimethylphosphine sulfide and three deuteriated species. Durig, J. R.; Chatterjee, K. K. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, SC 29208 USA). *Inorg. Chem.* 1989, 28(2), 298-304 (Eng). Microwave spectra at 26.5-39.0 GHz of Me_3PS , $Me_2(CD_3)PS$, $Me(CD_3)_2PS$, $(CD_3)_3PS$, and $Me_3P^{34}S$ were measured at ambient temp., and the obsd. transitions were assigned for the ground vibrational states for each mol. From a diagnostic least-squares adjustment to fit nine independent rotational const., the following structural parameters were obtained: $r(P:S) = 1.937 \pm 0.003$ Å, $r(P-C) = 1.813 \pm 0.002$ Å, $r(C-H) = 1.095 \pm 0.004$ Å, $\angle CPS = 114.31 \pm 0.12^\circ$, $\angle CHC = 109.53 \pm 0.04^\circ$, and Me tilt angle of $4.2 \pm 1.6^\circ$. The bond length for the P:S bond lies close to the value expected for a double bond, and it is in agreement with the previously reported value for this bond from an electron diffraction study. The low-temp. mid-IR spectra ($500-3200$ cm^{-1}) and the Raman spectra ($50-3200$ cm^{-1}) at ambient temp. were recorded for the solid states of all 5 isotopic species. The far-IR spectra of the d_0 and d_3 species were measured as Nujol mulls. Assignments of the fundamental vibrations have been made by assuming an effective C_{3v} symmetry for Me_3PS and $(CD_3)_3PS$ and C_s symmetry for $Me_2(CD_3)PS$ and $Me(CD_3)_2PS$. The proposed assignment of the normal modes is supported by a normal coordinate calc. using a simple valence force field to calc. the fundamental frequencies and the potential energy distribution. These results were compared to corresponding quantities for some similar mols.

$(CH_3)_3PS$

1989

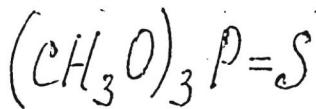
МЗ, см.рук
направлен

110: 143897y Spectra and structure of organophosphorus molecules. 39. Microwave, Raman, and infrared spectra of trimethylphosphine sulfide and three deuteriated species. Durig, J. R.; Chatterjee, K. K. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, SC 29208 USA). *Inorg. Chem.* 1989, 28(2), 298-304 (Eng). Correction of CA 110: 65918q. Microwave spectra at 26.5-39.0 GHz of Me_3PS , $Me_2(CD_3)PS$, $Mw(CD_3)_2PS$, $(CD_3)_3PS$, and Me_3P^34S were measured at ambient temp., and the obsd. transitions were assigned for the ground vibrational states for each mol. From diagnostic least-squares adjustment to fit nine independent rotational consts., the following r^0 structural parameters were obtained: $r(P:S) = 1.936 \pm 0.003$ Å, $r(P-C) = 1.814 \pm 0.001$ Å, $r(C-H) = 1.094 \pm 0.003$ Å, $\angle CPS = 114.36 \pm 0.09^\circ$, $\angle HCH = 109.52 \pm 0.04^\circ$, and Me tilt angle of $3.7 \pm 1.3^\circ$. The bond length for the P:S bond ties close to the value expected for a double bond, and it is in agreement with the previously reported value for this bond from an electron diffraction study. The low-temp. mid-IR spectra ($500-3200$ cm^{-1}) and the Raman spectra ($50-3200$ cm^{-1}) at ambient temp. were recorded for the solid states of all 5 isotopic species. The far-IR spectra of the do

C.A. 1989, 110, N 16

and d_9 species were measured, as Nujol mulls. Assignments of the fundamental vibrations have been made by assuming an effective C_{3v} symmetry for Me_3PS and $(CD_3)_3PS$ and C_s synnetry for the $Me_2(CD_3)PS$ and $Me(CD_3)_2PS$. The proposed assignment of the normal modes is supported by a normal coordinate calcn. using a simple valence force field to calc. the fundamental frequencies and the potential energy distribution. These results were compared to corresponding quantities for some similar mols.





1990

Jing X. Y., Miao Z. S., Oyang T. M.
et al.

12th Int. Conf. Raman Spec-
trosc.: Proc., Columbia, S. C.,
13-17 Aug., 1990. Chichester etc.,
1990. Chichester etc., 1990. C.

126-127.

(cur.  $\text{Cl}_3\text{P}=\text{S}; \text{III}$)

Li. n.

$(CH_3)_3PS$

1991

Slivko S. A.,
Sazukhanov M. A.

Селерукотура, Zh. Neorg. Khim.
 $\Delta fH, \gamma, J, Vi,$ 1991, 36 (10), 2676-
суд. носий.,
(теор. расчёт)

● -81
(суд. $(CH_3)_3PO$; III)