

P-H

3590-III 1964

PH_3 (J, A, P)

P_2H_4 (J), A.P.

P_2H_3^+ ; PH_3^+ ; PH_2^+ ;

~~Wada~~ Y., Kiser R.W.

Inorgan. Chem., 1964, 3, 174-177

Mass spectrometric study of ...

J

P_2H_3

Wada G.

1965

D-5

(7) Mass spectrometric
investigations of some inor-
ganic and organic phos-
phorus compounds.
(Dissert.)

Kansas State Univ.

65-6866.

PH_n

1966

Calculation of PH_n (n=1-4) molecules by an extended M.O.-L.C.A.O. method. K. Issleib and W. Gruendler (Univ. Halle, Ger.). *Theoret. Chim. Acta* 6(1), 64-72(1966)(Ger). The electronic structure of the mols. PH, PH₂⁻, PH₃, and PH₄⁺ was calcd. by an extended M.O.-L.C.A.O. method, taking into account the values 90°, 109.5°, and 120° for the bond angles of PH₂⁻ and PH₃. The expected bond angles for PH₂⁻ and PH₃ are obtained and the bond energies agree well with the results calcd. by other authors (Jordan, *et al.*, CA 58, 9703a; Lohr and Lipscomb, CA 58, 10855i; Hoffmann, CA 61, 2597e). Use of suitable defined energy parameters enables a judgement of the strength of a PH-bond and leads to an appreciation of possible reactions of the mols.

RCTC

C.A. 1966-65. 11
16076h

PX_3

$X = H, A, T$

Strey G.

1967

J. Molec. Spectrosc., 24,
N1, 87.

Экстремальные ν -ва
сильных полярных
г. т.

(см. H_2O) III

BP - XIII - 213

1968

P₃H₅

(15278r) Preparation and mass spectrometry of triphosphine-5. Fehner, T. P. (Univ. of Notre Dame, Notre Dame, Indiana). *J. Amer. Chem. Soc.* 1968, 90(22), 6062-6 (Eng). A convenient photochem. method for the prepn. of triphosphine-5, P₃H₅, is described. The purification and the detn. of some of the phys. properties of this unstable compd. are reported. The fragmentation pattern and appearance potentials of selected ions have been detd. by using a mass spectrometer with mol. beam sampling. The latter results allow the P-H and P-P bond energies and the proton affinity of phosphine to be estd. This compd., which is an intermediate in the thermal decompn. of diphosphine-4, thermally decomp. at 300°K. to yield diphosphine-4 and tetraphosphine-6. This reaction is the prototype for a generalized chain growth step in the net polymn. of diphosphine-4. RCJC

nonisecy.

nonisecy.

nonisecy.

C.A. 1969:70:4

Ingush P

BP-XIII-305 1968

is. exp. p. 1968

54355n) M.O.-L.C.A.O. calculation of chain- and ring-shaped phosphorus hydrides. Issleib, K.; Gruendler, W. (Martin-Luther-Univ., Halle/Saale, Ger.). *Theor. Chim. Acta* 1968, 11(2), 107-18 (Eng). The electronic structure was calcd. of the mols. P_nH_n , P_nH_{n+2} ($n = 2, 3, 4$), P_2 , and P_4 by an extended M.O.-L.C.A.O. method. The relation between the bond energies of these mols. and the electron distributions is discussed. The resulting mol. diagrams and the ordering of energy levels explain the existence of stable anions of cyclic P hydrides and permit to deal with a reaction mechanism of the cleavage of bi-phosphines. The bonds in P_4 almost exclusively consist of $P3p$ -functions, and bent bonds are present in the cyclic P hydrides. In agreement with exptl. results the cis-configuration of P_2H_4 is more stable than the trans-configuration. RCTC

C, A. 1968. 69. 14

P-H(2)

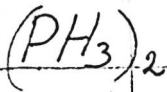
1969

Радимович И. Б.,
Улейников Б. Г.

Δ E

Росии. АН СССР, 188 (1),
124.

(Сек. Li - K) III

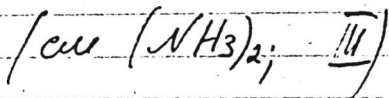


1974

Торр W. C. et. al.

ΔH димериз.
кв. мех. распада
структ.
сим. поет.

J. Am Chem Soc 1974,
96(16) 5291-3 (eng)



$(\text{PH}_3)_2$

Allen L.C.

1975

гидрирование
кв. мех.
расчет

J. Am. Chem. Soc.,
1945, 67 (24), 6921-40.

$\text{Cu}(\text{NH}_3)_2$; III)

PH_x

Sewar Michael 1975-
J. S.

(наблюдения
результаты)

5)

"J. Amer. Chem Soc."
1975, 97, 1311-1318
(am)

(cm, Si H_x; III)

$H(\underline{I}) - P(\underline{I})$

1975

85: 83561n Atomic Energy Levels and Grotrian Diagrams,
Vol. 1: Hydrogen 1-Phosphorus 15. Bashkin, Stanley;
Stoner, John O., Jr. (Elsevier: New York, N. Y.). 1975. 615 pp.
\$59.95.

(ϵ_i)

C.A. 1976 85 N12

P_3H_5

1977

(Di; exp)

Baudler, M. et al
Z. Anorg. Allg. Chem 1977,
437, 78-86 (Ger.)

Chem. P_2H_4 - III

P_4H_6

(Vi;exp)

Baessler et. et al
 Z. Anorg. Allg. Chem. 1944,
 437, 78-86 (Ger.)

all. P_2H_4 - III

$PH_3 - P\bar{D}_3$

$PH_3 - P\bar{T}_3$

$P\bar{D}_3 - P\bar{T}_3$

(coll. uocm.)

[ORT. 5077] 1977

Vallamattam A. J. et al
Indian J. Pure Appl.
Phys. 1977. 15, 49-51

содержащая часть
Р... H-P

1977

КБ.мех.
расчет

Weller.T.

Int.J. Quantum Chem.

1977, 12(5), 805-811.

см. N... H-S -III

PH_2^+

Omura 7230

1978.

PH_2^-

Ball J.R., et al.

PH_2

дент.

сфукс.

вв. сек.

расет

Int. J. Quant. Chem.
1978, 14, 39-53.

PH_n
 $n = 2 \div 6$

Hall M.

1978

Inorg. Chem., 1978, 17, n 8,
2261-2263.

поиск
кривые

(см. Ветт^{IV})

Фосфин

1978

3 Б43. Потенциалы ионизации и геометрии фосфинов. Зверев В. В., Бельский В. Е. «Докл. АН СССР», 1978, 241, № 6, 1367—1370

Установлено линейное соотношение между первым вертикальным потенциалом ионизации (ПИ) фосфинов и валентным углом при атоме фосфора: $PI = 39,7 - 0,314\alpha$. Показано, что около трети экспериментально наблюдаемого изменения ПИ является следствием изменения гибридизации орбиталей гетероатома. Для интерпретации потенциалов ионизации фосфинов предложено использовать валентное состояние $P(d^2_{неп.}, p_x, p_y, d)$, отвечающее симметрии C_3 . Автореферат

(7)

А. М.

Геометрия

2-1979, N3

P_4H^+

1979

Fluck E. et al.

rv. met.
p. 100.

Phosphorus Sulfur 1079,
6(3), 469-74.

cell. $P_4 - III$

PH₆³⁻

Lommen 10606 | 1980.

Blidewell cb.

gum.
elsga,
fabriab.
verucifus
Cust. nov.

J. Mol. Struct.,
1980, 67, 121-132

РМ₆⁻

1981

Булдурев А. И. и др.

Тез. докл. 14^{то} Всес. Чуга-
евского совещ. по химии
комплексов. создан., 1981,

Ч. 2. Иванова, 1981, 655

● (M. BeH₃⁻; III)

Кб. мех.
раств.,
равновесн.
темпер.

P_4H^+

Lammick 12853 | 1981

Wedig U., et al.

$A(\bar{H})$
(γ)
u.n.

Chem. Phys., 1981, 61,
117 - 123

Pseudopotentials ...



(see P2; III)

PH₂ PH₂

1982

Chandra Singh U.,
et al.

потому.
Кривые

J. Mol. Struct., 1982,
87, N2, Suppl; Theo-
Chem, 4, N2, 125-132.

(сер. H₂O₂; III)

PH_n

Baird N. Colin.

1983

во время,
смысл.

Can. J. Chem., 1983,

61, N 7, 1567-1572.

(с. В. Н. ; III)

P₃ Hs

1983

Bews James R., Glidewell Christopher.

pacraew
Ei;

J. Mol. Struct., 1983,
94, N3-4, Suppl.: Theo-
chem, 11, N3-4, 305-318.

(see. PH₃; III)



1983

2 Б1033. Трехэлектронные связи. III. σ^* -катион-радикалы фосфора и хлора. Three-electron bonds. III. Phosphorus and chlorine σ^* radical cations. Clark Timothy. «J. Comput. Chem.», 1983, 4, № 3, 404—409 (англ.) .

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 4—31 ГФ с учетом корреляции валентных электронов по теории возмущений Меллера—Плессета 2-го порядка (MP2/4—31 ГФ), проведены расчеты σ^* -катион-радикалов $\text{H}_3\text{PRPH}_3^+$ (I), H_3PSH_2^+ (II), H_3PClH^+ (III) и HCl—ClH^+ (IV) с оптимизацией геометрии. Вычисленные значения длин трехэлектронных связей P—P, P—S, P—Cl и Cl—Cl в I—IV равны 2,881, 2,846 3,030 (3,188 для поворотного изомера) и 2,688 Å. Соотв-щие энергии диссоциации D , характеризующие процесс $\text{AB}^{+\cdot} \rightarrow \text{A} + \text{B}^{+\cdot}$, 30,2, 21,8, 7,3 и 29,5 ккал/моль, коррелируют с энергиями (ΔE) процесса $\text{A}^{+\cdot} + \text{B} \rightleftharpoons \text{A} + \text{B}^{+\cdot}$ по соотношению $D = \exp(3,41 - \Delta E/53,6)$ ккал/моль. Вычисленные для систем $\text{A}^{+\cdot}/\text{B}$ значения ΔE , $\text{PH}_3^{+\cdot}/\text{SH}_2$ 18,6, $\text{PH}_3^{+\cdot}/\text{ClH}$ 72,1, $\text{H}_2^{+\cdot}/\text{ClH}$ 53,5 ккал/моль, удовлетворительно согласуются с эксперим. данными (5,8, 58,6, 52,8 ккал/моль).

Э. Герман

м.п.

43

X. 1984, 19;
N 2

$H_3PPH_3^+$

1983

ab initio
param Do,
компьютер

99:128595j Three-electron bonds. III. Phosphorus and chlorine σ^* radical cations. Clark, Timothy (Inst. Org. Chem., Friedrich-Alexander-Univ. Erlangen-Nuernberg, D-8520 Erlangen, Fed. Rep. Ger.). *J. Comput. Chem.* 1983, 4(3), 404-9 (Eng). The radical cations $H_3PPH_3^+$, $H_3PSH_2^+$, H_3PClH^+ , and $HClClH^+$ were studied by ab initio MO theory. An increasing tendency to adopt trigonal bipyramidal (TBP) geometries is obsd. for the P radicals with S and Cl ligands. The three-electron bond dissociation energies are calcd. to be between 7 and 31 kcal mol⁻¹. The dependence of these bond energies on the ionization potentials for the neutral hydrides is illustrated, and the deformation of P σ^* radicals towards TBP structures is discussed.

(43) ☒

C.A. 1983, 99, N16

$\text{PH}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{PH}_3 + \text{H}$ [Om. 17733] 1983

ab initio
pacem

Gordon M.S., Caro D.K.,
et al.,
J. Amer. Chem. Soc.,
1983, 105, N18, 5771-
- 5775.

HPH₂

1983

Mendewerk Monica L.,
Frey Regina, et al.

Ap;

J. Phys. Chem., 1983, 87,
N 12, 2026-2032.

( *cer.* HNH₂; III)

$HP=PH$

1983

23 Б31. Теоретическое моделирование дифосфенового лиганда ($HP=PH$). Theoretical modeling of the diphosphene ($HP=PH$) ligand. Lee Jung-Goo, Cowley Alan H., James E. Boggs. «Inorg. Chim. Acta», 1983, 77, № 2, L61—L62 (англ.)

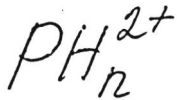
Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 44—31 ГФ проведены расчеты геометр. структуры, молек. орбиталей и силовых постоянных молекулы $HP=PH$ (I), служащей моделью лигандов более общего типа $RP=PR$. Показано, что в пренебрежении конфигурац. взаимодействием (KB) транс-изомер I на 2,7 ккал/моль стабильнее цис-изомера. Вычисленные геометр. параметры транс- и цис-изомеров равны соотв.: $r_{P-P}=2,121$ и $2,122$ А, $r_{P-H}=1,444$ и $1,445$ А и $\angle HPH=95,4$ и $100,4^\circ$. Учет KB (7262 конфигураций) приводит лишь к незначительному повышению разности энергий транс-цис до 2,77 ккал/моль. Две высших заня-

геометрия,
структура,
сис. П., М.П.

Х. 1983, 19, № 23

тых МО транс-изомера $2a_u$ ($-9,23$ эВ) и $7a_g$ ($-9,52$ эВ) соответствуют π -связи Р—Р и свободной паре электронов Р. МО $2b_g$ ($0,26$ эВ) является в основном низшей незаполненной π^* -орбиталью Р—Р в согласии с эксперим. данными для родственного соединения. Вычисленные значения силовых постоянных вал. кол. Р—Р и Р—Н транс-изомера равны соотв. $3,66$ и $2,86$ мдин/А.

Э. Герман



$n=1-4$

1983

Pope S. A., Millier H.,
et al.

расчёт
с.н.,
геометр.,
спектр.

Chem. Phys. Lett.,
1983, 95, N3, 247-249.

●
(см. NH_n^{2+} ; III)

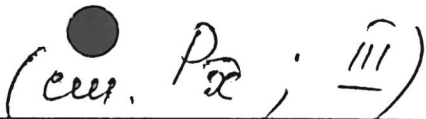
издряды
фосфора

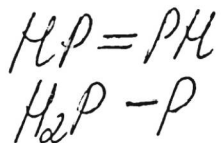
1984

Baird N. Colin.

расчёт
электрон.
состояния

Can. J. Chem., 1984,
62, N2, 341 - 347.





1984

19 Б1041. Дифосфен ($\text{HP}=\text{PH}$) и фосфино-фосфиниден ($\text{H}_2\text{P}-\text{P}$): неэмпирическое исследование стабильности и электронной структуры методами ССП и КВ. Diphosphene ($\text{HP}=\text{PH}$) and phosphino-phosphinidene ($\text{H}_2\text{P}-\text{P}$): an ab initio SCF and CI study of stability and electronic structure. На Tae-Kyu, Nguyen Minh Tho, Ruelle, Paul. «Chem. Phys.», 1984, 87, № 1, 23—29 (англ.)

Методом ССП в пяти различных базисах, наиболее полный из к-рых — двухэкспонентный с поляризац. функциями (ДЭ+П), выполнены неэмпирич. расчеты геометр. параметров транс-дифосфена (C_{2h}) (I), цис-дифосфена (C_{2v}) (II), синглетной (III) и триплетной (IV) структур $\text{H}_2\text{P}-\text{P}$ (C_{2v}). Относит. энергии ΔE и дипольные моменты уточнены в расчетах методом КВ в базисе ДЭ+П. Получены следующие значения ΔE (ккал/моль): I 0,0; II 3,0; III 29,1; IV 47,0. Вычисления энергетич. барьеров для процесса цис-транс-изо-

кометрии,
структура

Х. 1984, 19, № 19

меризации дифосгена показали, что внутреннее вращение более выгодно, чем перегруппировка с промежуточной линейной конфигурацией. Результаты расчетов сопоставлены с данными пред. теор. исследований молекул N_2H_2 и NPH_2 .

В. Г. Соломоник

PH₆⁻

[Om. 19956]

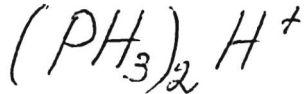
1984

Trinquier G., Daudrey J.,
et al.,

сложность,
сложность,
ab initio
расчет.

J. Amer. Chem. Soc.,
1984, 106, N17,

● 4794-4799.



1985

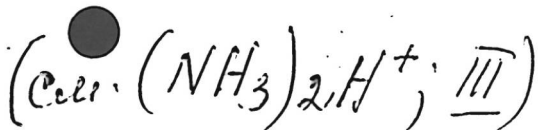
Del Bene Janet E.,

Frisch Michael J., et al.

J. Phys. Chem., 1985,

89, N17, 3669-3674.

map.
vacuum



$P_2 H_7^+$

1985

Del Bene Janet E.,

Frisch Michael J., et al.

сверхмасса,

теор. расчет,

J. Phys. Chem. 1985,

89 (17); 3669-74.

$V_{\text{св}}$.

(Cell. $N_2 H_7^+$, III)

$(PH_3)_2$

(om. 22451)

1985

Frisch M. J., Pople J. A.,
et al.

теорет.
расчет
энергии,
Vi;

J. Phys. Chem., 1985,
89, N 17, 3664-3669.

$P_2H_6^+$

[OM. 20 996]

1985

Glidewell Ch,

расчет
геометр.,
структур

Inorg. Chim. Acta,
1985, 97, 173-178.

ΔH_f°



OM. 22693

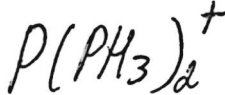
1985

104: 174915h Bonding in the $P(PH_3)_2$ and $N(PH_3)_2$ cations. An ab initio study. Schoeller, Wolfgang W. (Fak. Chem., Univ. Bielefeld, D-4800 Bielefeld, 1 Fed. Rep. Ger.). *Z. Naturforsch., B: Anorg. Chem., Org. Chem.* 1985, 40B(9), 1149-51 (Eng). Ab initio SCF calcs. at a double- ξ level were performed on the cations $N(PH_3)_2^+$ and $P(PH_3)_2^+$. Although both structures are isoelectronic, their bonding situation is different. The latter corresponds to a dipolar structure (phosphide) with considerable neg. charge at the central P atom. The d-orbitals contribute to bonding as polarization functions rather than participate in hybridization.

ab initio
program



C.A. 1986, 104, N20.



Om. 22693

1985

6 Б1037. Неэмпирическое исследование химической связи в катионах $P(PH_3)_2^+$ и $N(PH_3)_2^+$. Bonding in the $P(PH_3)_2$ and $N(PH_3)_2$ cations. An ab initio study.

Schoeller Wolfgang W. «Z. Naturforsch.», 1985, B40, № 9, 1149—1151 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в 2-экспонентном гауссовом базисе, дополненном d -функциями на тяжелых атомах, проведены расчеты изоэлектронных катионов $P(PH_3)_2^+$ (I) и $N(PH_3)_2^+$ (II). Найдено, что центральный атом Р и I несет значит. отриц. заряд. В I и в меньшей мере в II d -орбитали скорее играют роль поляризац. функций, чем участвуют в гибридизации. Наблюдаемое экспериментально заметное укорочение связей N—Р и Р—Р в II и I по сравнению с простыми связями N—Р и Р—Р объяснено значит. вкладом резонансных структур.

Э. Д. Герман

расчет М.П.,
структуры

(H) [X]



X. 1986, 19, 26.

$(PH)_n$
($n=2-6$)

ab initio
pacem

[Ommux 21396] 1985

Yoshifuji M., Inamo-
to N., Ito K., et al.,

Chem. Lett., 1985,
N4, 437-440.

P_4H_6

1986

15 Б1331. Химия фосфора. 168. Об изомерах тетрафосфана(6), P_4H_6 . Beiträge zur Chemie des Phosphors. 168. Zur Kenntnis der Isomere von Tetraphosphan(6), P_4H_6 . Baudler M., Riekehof-Böhmer R., Krause U. M. «Z. anorg. and allg. Chem.», 1986, 543, № 12, 45—48 (нем.; рез. англ.)

Методом ЯМР ^{31}P изучены фосфаны *d,l*- и мезо- $n-P_4H_6$, а также изо- $P_4H_6[(PH_2)_3P]$. На основе различий КССВ определено соотношение изомеров в смеси. Часть 167 см. М. Baudler и др. «Z. Anorg. allg. Chem.», 1986, 543, 35. И. Э. Зельцер.

М.П.

х. 1987, 19, № 15

Lucerna

[OM-25395]

1986

P-H_n Berkowitz J., Gibson S.T.,
Greene J.P. et al.,

Croat. Chem. acta,
1986, 59, N3, 513-
-526.

D₀(P-H)
D₀(HP-H)
D₀(H₂P-H)



[077. 27027]

1987

22 Б1077. Геометрия и энергетика Н-связанных димеров $\text{H}^+(\text{PH}_3)_2$, $\text{H}^+(\text{H}_2\text{S})_2$ и $\text{H}^+(\text{HCl})_2$. Geometries and energetics in the proton-bound dimers: $\text{H}^+(\text{PH}_3)_2$, $\text{H}^+(\text{H}_2\text{S})_2$, and $\text{H}^+(\text{HCl})_2$. Ikuta Shigeru. «J. Mol. Struct. Theochem.», 1987, 152, № 1—2, 89—100 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП в базисе 6-31ГФ* с учетом электронной корреляции по теории возмущений Меллера — Плессета (МП) 2-го порядка оптимизирована геометрия Н-связанных димеров $\text{H}^+(\text{PH}_3)_2$ (I), $\text{H}^+(\text{H}_2\text{S})_2$ (II) и $\text{H}^+(\text{HCl})_2$ (III). Энергетич. и I—III рассчитаны по теории возмущений МП в базисах DZ+P и 6-31++(d, p) с учетом однократных, двойных и четверных (ОДЧ) возбуждений для оптимизированной геометрии МП2/6-31ГФ*. Колебат. частоты вычислены с использованием аналитич 2 производных энергии, найденных методом ССП в базисе 6-31*. Расчет димера I проведен также в базисе $[6s5p2d(\text{P})/2s2p(\text{H})]$. Показано, что расчет МП2/6-31* приводит к увеличению длины связи X—H (X=P, S и Cl), к

М.А.

⊗ (+2)

X. 1987, 19, 222

уменьшению длины связи $X-X$ и к увеличению энергии H -связи по сравнению с методом ССП в том же базисе. Энергия H -связи (E_H) в I составляет $\sim 7,5$ ккал/моль (расчеты МП40ДЧ/DZ+P и МП2/[6s5p2d(P)/2s-2p(H)]), что на 4 ккал/моль ниже эксперим. значения. Сделан вывод о необходимости новой эксперим. проверки E_H . Эффект корреляции электронов в II и III больше, чем в I.

Э. Д. Герман

$H^+ (PH_3)_2$

[am. 27027]

1987

11 Д49. Геометрические и энергетические параметры димеров с протонной связью: $H^+(PH_3)_2$, $H^+(H_2S)_2$ и $H^+(HCl)_2$. Geometries and energetics in the proton-bound dimers: $H^+(PH_3)_2$, $H^+(H_2S)_2$, and $H^+(HCl)_2$. Ikuta Shigeru. «J. Mol. Struct. Theochem.», 1987, 152, № 1—2, 89—100 (англ.)

Метод ССП и теория возмущений Меллера—Плессета (ТВМП) второго порядка применены к определению геометрич. параметров димеров $H^+(PH_3)_2$, $H^+(H_2S)_2$ и $H^+(HCl)_2$. Расчет проводился в базисе 6-31 ГФ*. Отмечено, что корреляц. эффекты увеличивают длины связей $X-H$ ($X=P, S, Cl$) и уменьшают расстояния $X-X$. Энергии диссоциации димеров уточнены на основании расчетов в четвертом порядке ТВМП с учетом одно-, двух- и четырехкратных возбуждений невозмущенной ф-ции с использованием орбитального базиса 6-31+ +ГФ (d, p) или двухэкспонентного базиса Даннинга. Полученные величины согласуются с экспериментальными для $X=S, Cl$; расхождение для $X=P$ считается обусловленным ошибкой эксперимента. На уровне ССП оценены частоты норм. колебаний димеров.

А. В. Зайцевский

М.Л.

⊗

(+2)

ф. 1987, 18, № 11

H_3PP^+

1987

4 17 Б1026. Протонирование дифосфена ($HP \equiv PH$) и фосфинофосфинидена (H_2P-P): неэмпирическое исследование. The protonation of diphosphene ($HP \equiv PH$) and phosphinophosphinidene (H_2P-P): an ab initio study. Nguyen Minh Tho. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 135, № 1—2, 73—77 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП с полной оптимизацией геометрии в базисе 3—21 ГФ* и уточнением энергии стационарных точек в базисе 6—31++ГФ* с учетом электронной корреляции по теории возмущений Меллера—Плессета 4-го порядка рассчитаны протонированные формы дифосфена и его изомера фосфинофосфинидена, а также переходные состояния синглетной и триплетной внутримолек. перегруппировок этих форм. Продукт протонирования дифосфена, фосфинофосфениевый катион H_2P-PH^+ , может переходить в фосфинидениевый катион H_3PP^+ , образование к-рого возможно при

М.А.

Х. 1987, 19, № 17

²протонировании $\text{H}_2\text{P}-\text{P}$. Найдено, что в синглетном состоянии H_2PPH^+ на 41,2 ккал/моль более устойчив, чем H_2PP^+ , тогда как в триплетном состоянии, наоборот, H_3PP^+ на 17,3 ккал/моль более устойчив. Барьеры для синглетной и триплетной перегруппировок составляют 8,4 и 46,7 ккал/моль соотв. Н. В. Харчерникова

PH_n

lom. 27559

1987

Pople John A.,
Curtiss Larry A.

ab initio
calculations,
J. Phys. Chem. 1987,
91(13), 3637-9.

(Curt. CH_n; III)

1987

$(PH_3)_2$ Spackman Mark A,

empyrm., J. Phys. Chem. 1987,
meop. 91 (12), 3179-86.
pacrim.

(Ccr. $\bullet (HF)_2$; III)

PH_n
($n \leq 3$)

Berkowitz Y.

1988

масс-
спектр
 $Y, Te, a^4\Sigma^-$

J. Chem. Phys. 1988,
89(12), 7065-76.

Do;

●
(see ASM; III)

1988

$(PH_3)_2$

Gill Peter M.W.,
Radom Leo.

ab initio
peerem

J. Am. Chem. Soc.
1988, 110 (15), 4931-41.

(cer. He_2 ; III)

$H_2P^+(PH_2^+)$ [om. 30490] 1988

Lacox M. E.,

Ti, Vi; g. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 282.

$H_2P(PH_2)$ [om. 30490]

1988

Jacox M.E.,

Ti,

Vi;

J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 283.

РН_n
n=0-4

от 31405

P

1988

9 Б1053. Вычисление электронного сродства атома фосфора и гидридов РН_n ($n=0-4$). Calculations on the electron affinities of the phosphorus atom and its hydrides (РН_n, $n=0-4$) / Nguyen M. T. // J. Mol. Struct. Theochem.— 1988.— 180.— С. 23—29.— Англ.

Неэмпирическими методами ССП и теории возмущений Меллера — Плессета (МП) 2-го, 3-го и 4-го порядков (спин-неограниченный вариант) в базисах ГФ двух- и трехэкспонентного кач-ва, включающих диффузные и поляризац. ф-ции, проведены расчеты электронного сродства ЕА атома Р и гидридов РН_n ($n=0-4$). Для Р и гидридов РН_n наименьшие расхождения теории и эксперимента ($\sim 0,2$ эВ) достигнуты (расчет МП4) только при включении в базис нескольких поляризац. ф-ций. При одинаковом числе поляризац. ф-ций трехэкспонентный базис приводит к лучше-

Ае

х. 1989, №9

уже рассмотрено

му согласию ЕА атома Р с экспериментом. Радикал PH_3^- нестабилен. Предсказанное ЕА для PH_4 равно $0,6 \pm 0,5$ эВ. Сделан вывод, что включение в базис большого числа ф-ций с высшими угловыми моментами позволит сократить число *sp*-ф-ций базиса, к-рые слабо влияют на ЕА.

Э. Д. Герман

PH_x

P

P

от 31405 1988

$x = 0-4$

Ac;

75 Д123. Расчеты сродства к электрону атома фосфора и его гидридов (PH_n , $n=0-4$). Calculations on the electron affinities of the phosphorus atom and its hydrides (PH_n , $n=0-4$) / Nguyen Minh Tho // J. Mol. Struct. Theochem.— 1988.— 180.— С. 23—29.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в рамках неограниченного хартри-фоковского подхода с учетом корреляции электронов в четвертом порядке теории возмущений Меллера—Плессета в нескольких базисах гауссовых ф-ций от $6-31+\text{ГФ}$ (d, p) до трехэкспонентного с включением поляризационных ф-ций до f -типа для Р и $6-31\text{ГФ}$ и $\text{Г}-311\text{ГФ}$ для Н рассчитаны значения сродства к электрону (для систем PH_x , $x=0-4$). Наилучшие полученные значения равны для Р 0,497 эВ (эксперим. значение 0,74), для РН 0,812 (1,028), для PH_2 1,162 (1,271), для PH_4 $0,60 \pm 0,05$. Анион-радикал PH_3 нестабилен по отношению к отщеплению электрона. Отмечено, что учет большего числа типов поляризационных ф-ций важнее расширения sp -базиса.

В. Л. Лебедев

ср. 1989, № 5

$\text{PH}, \text{PH}_2, \text{PH}_3, \text{PH}_4$

$[HP_2]^+$

DM 29357 1988

109: 80115y A theoretical study of the hydrodiphosphorus(1+) ($[HP_2]^+$) cation and dihydrodiphosphorus(2+) ($[H_2P_2]^{2+}$) dications: stable bridged structures. Nguyen, Minh Tho; Fitzpatrick, Noel J. (Dep. Org. Chem., Univ. Groningen, 9747 AG Groningen, Neth.). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 146(6), 524-30 (Eng). Structures and stabilities of the $[HP_2]^+$ and $[H_2P_2]^{2+}$ ions are studied in their singlet ground state employing ab initio calcs. Geometries of stationary points were detd. at the MP2/6-31G(d,p) level while relative energies were estd. using MPn calcs. with various basis sets (up to 6-31++G(2df,p)). The bridged structure (C_{2v}) is found to be the only min. on the $[HP_2]^+$ surface, lying about 8-9 kcal/mol below the linear structure. The proton affinity of P_2 is estd. to be 158 ± 3 kcal/mol. Analogous to $[H_2Si_2]$, the non-planar doubly bridged structure represents the global min. lying a few kcal/mol below the planar $[H_2P-P]^{2+}$ species. The two dication isomers are sepd. by a barrier of 10-16 kcal/mol. The planar-bridged structure is a transition structure for autoconversion of the bent-bridged form while the linear structure is a second-order saddle point. The fragmentation $[H_2P_2]^{2+} \rightarrow [HP_2]^+ + H^+$ is exothermic ($\Delta H_f = -9$ kcal/mol). Coupled with the large barriers for deprotonation, this suggests that the bridged $[H_2P_2]^{2+}$ dication might be obsd. in mass spectroscopic expts. The unusual structural feature of the ions may be understood from a simple orbital picture.

no pen.
pracem

109

C.A. 1988, 109, N10.

$[H_2P_2]^{2+}$

HP_2^+

М.П.

29357
ОМ.

41

ср. 1988, 18, N10.

1988

10 Д64. Теоретическое исследование катиона $[HP_2]^+$ и дикатионов $[H_2P_2]^{2+}$: стабильные мостиковые структуры. A theoretical study of the $[HP_2]^+$ cation and $[H_2P_2]^{2+}$ dications: stable bridged structures. Nguyen Minh Tho, Fitzpatrick Noel J. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 146, № 6, 524—530 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в больших базисах сгруппированных гауссовых ф-ций с включением поляризационных ф-ций с учетом корреляции электронов по теории возмущений Меллера—Плессета до четвертого порядка исследовано электронное строение различных структур HP_2^+ (I) и $H_2P_2^{2+}$ (II). Приведены равновесная геометрия, сродство к протону P_2 . Обнаружено, что для I минимуму на поверхности потенциальной энергии (ППЭ) отвечает только мостиковая структура. Сродство к протону P_2 оценено в 158 ± 3 ккал/моль. Для II, аналогично H_2Si_2 , глобальному минимуму ППЭ отвечает дважды мостиковая структура. Реакция отщепления протона от II является экзотермической (теплота 9 ккал/моль) и характеризуется большим барьером, что дает основание предположить обнаружение II в масс-спектрах.

В. Л. Лебедев

PH_n

1988

Pople John A., Schleyer
Paerl von Rague, et al.
Chem. Phys. Lett., 1988,
145, N 5, 359-364.

He;

( LiH_n; III)

FR_2^+

(DM-30719)

1988

Яковсом В.В., Зюбина Т.С.,
Чаркина О.,

эксперим.,
теорет.
расчет

Ж. Неорг. хим. СССР,
1988, 33, N 12, 2997-3000.



PH_n

n = 5, 4, 3, 2

ab initio

reaction comp.,
 $\Delta_f H$, $\Delta_f S$;

☒

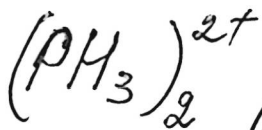
(+5)

C.A. 1989, 110, N12

1989

110: 102046b Ab initio studies of molecular structures and energetics. 2. Energies and stabilities of PH_n, SH_n, and ClH_n compounds. Ewig, Carl S.; Van Wazer, John R. (Dep. Chem., Vanderbilt Univ., Nashville, TN 37235 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1989, 111(5), 1552-8 (Eng). The energies and mol. structures of the highly coordinated species PH₅, SH₄, SH₆, ClH₃, and ClH₅ have been derived by ab initio computations. All structure optimizations employed the MP2 approxn., and energies were computed at the SCF, MP2, and MP4 levels and in two quite different basis sets, in each case with polarization functions on H and the heavy atom. Of particular interest are ClH₃, which is of C_{2v} symmetry, and ClH₅, which is C_{4v}. MP2 vibrational frequencies were detd. for each species. Each was found to be structurally stable (i.e., exhibiting no imaginary vibrational frequencies), although a similar treatment of ClH₇ found it to be unstable. The values of enthalpy and entropy, ΔH_{298}° and ΔG_{298}° , were computed for each of the hydrogenation reactions and the analogous reactions for adding two H atoms. In all cases the products are higher energy than reactants except for the addn. of at. hydrogen to PH₃, SH₂, and SH₄. The energy difference is largest for addn. of H₂ to the Cl compds., ΔH_{298}° being 477 and

503 kJ/mol for formation of ClH_3 and ClH_5 , resp., at the MP4 level. The energy of each species was analyzed by use of the ab initio multicenter energy resoln., a method of anal. that was found to be an esp. powerful way of elucidating the nature of its bonding and hence the origins and degree of its structural stabilities. This anal. demonstrates that three-center bonding stabilizes the Cl species more than the others, while increasing three-center repulsions between neighboring H atoms destabilize all the higher coordinations and lead to the instability of ClH_7 .



1989

Gill M.W., Radom L.

J. Amer. Chem. Soc. 1989.

u.n. 111, N 13. C. 4613-4622.



$H_2PPH_3^+$

1989

Коркеев А. А.,
Цветков Е. Н.

и. н.

Ж. морган. химии.
1989. 34, N2, с. 290-294.

(см. NH_3 ; III)

MP_2^+

(DM. 32479)

1989

Яковсом В.В., Яковима Т. С.
и др.,

структура,
теорет.
расчет

Же. структур. химии,
1989, 30, №4, 164-167.



$H_3P_2^+$

(от 32479)

1989

Яковсом В.В., Зюбина.

Т.С. и др.,

структура,
теорет.
расчет

Же. структур. химии,
1989, 30, №, 164-167.



HP_2^+

1989

Yakovson V. V., Zyubina
T. S. et al.

срук-
тура,
распре-
деление

Zh. Strukt. Khim.

1989, 30(4), 164-7.

(сеч. LiP_2^+ ; III)

$H_3 P_2^+$

1989

Яковенко В. В.,

Злобина Т. С. и др.

теор.
расчёт

Ж. Структур. Хе-
мии. 1989, № 6.
164-167.

(сер. $Li P_2^+$; III)

PH_6^-

1991

Boldyrev A.I., Von
Niessen W.

(7)

Chem. Phys. 1991, 155

(1); 71-8.

неоп.
раств.

(see.  LiH_2^- ; III)

MP₄ -

[Lit 35 936] 1991

1 Б1079. Теоретическое исследование иона HP_4 . A theoretical study of the HP_4 ion / Dewar Michael J. S., Zheng Ya—Jun // Inorg. Chem.— 1991.— 30, № 17.— С. 3361—3362.— Англ.

Полуэмпирическим методом ССП в приближении AM1 проведены расчеты электронного и геометрич. строения возможных изомеров аниона HP_4^- (I) и изучены взаимопревращения между син- и анти-изомерами. Показано, что хотя метод AM1 и завышает энергии напряжения и калиброван только для орг. соединений фосфора, однако он вполне приемлем для исследования особенностей строения неорганич. молекул и анионов. Найдено, что син-изомер на 11,5 ккал/моль более стабилен, чем анти-изомер, а барьер взаимопревращения между ними равен всего 2,2 ккал/моль. В связи с интерпретацией эксперимента для натриевой соли I проанализировано также строение ионной пары $\text{M}^+ \dots \text{I}$, M^+ при этом моделировали положит. зарядом, к-рый

М.А.

X. 1992, n1

помещали вблизи отрицат. заряженного атома Р в I. Найдено, что миграция атома водорода в ионной паре при неподвижном заряде сильно эндотермична ($\Delta H = 13$ ккал/моль). Сделан вывод, что в р-ре син-изомер медленно перегруппировывается в анти-изомер благодаря присутствию рядом с I катиона металла.

И. Н. Сенченя



Згуріґа Р

1991

Klobukowski Mariusz.

и.и. Chem. Phys. Lett. 1991.
183, N5. C. 417-422.

(с.а. ● Згуріґа N; III)

$P_3 H$

1992

Чабан Т. М.,

Кымышев Н. М. и др.

Ж. Морган. Химия.

М. П.

1992. 37, N 1. С. 191 - 198.

(сч. $N_3 H$; III)

РН₆

1992

3 Б1018. Теоретическое исследование относительной стабильности структур тригональной призмы и октаэдра у гексакоординационных соединений MX_6 /Зюбин А. С., Мусаев Д. Г., Чаркин О. П. //Ж. неорган. химии.—1992.—37, № 10.—С. 2345—2354.—Рус.

На примере модельных гексагидридных систем MgH_6^{4-} , AlH_6^{3-} , SiH_6^{2-} , PH_6^- , SH_6 , ClH_6^+ , ScH_6^{3-} , TiH_6^{2-} , TiH_6^+ , VH_6^- , CrH_6 , MnH_6^+ рассмотрен механизм внутримолек. перегруппировки $\text{O}_h \rightarrow \text{D}_{3h}$ в гексакоординац. системах с двенадцатью валентными электронами типа MX_6 , где X — σ -лиганд. Расчеты выполнены на ССП-уровне с валентно-двухэкспонентными базисами, энергии отдельных точек уточнены с более широкими базисными наборами и с учетом электронной корреляции в рамках третьего порядка теории возмущений по схеме Меллера—Плессета (МП3). Найдено, что в системах с непереходным центральным атомом М октаэдрич. конфигурация стабильнее призматич., причем энергетич. разница ΔE между ними быстро растет вдоль периода. В гидридах d-металлов тенденция оказывается противоположной, и в конце периода призматич. структура оказывается стабильнее ок-

М.П.



X, 1993, №3

таэдрич. На модельном уровне обсуждается механизм влияния природы центрального атома и электроотрицательности лигандов на соотношение стабильности конфигураций O_h и D_{3h} . На основе предложенной модели предсказывается, что для гексалигандных соедин. d-металлов V—VII групп возможно сближение октаэдрич. и призматич. структур на энергетич. шкале, а для лигандов — слабых акцепторов электронной плотности (типа CH_3) — и их инверсия, сопровождающаяся изменением порядка уровней валентных МО.



PH_n

PH_n⁺

$$n = 1 \div 3$$

смысл

красивые
& красивые

красивые. CO_2 ; VO (теор.  пар)

© A. 1993, 119, № 8

Am 38 431a"

1993

119: 80717c Geometries and bond energies of phosphorus hydrides and their monocationic ions (PH_n and PH_n⁺ (n = 1-3)). Balasubramanian, K.; Chung, Young Sir; Glaunsinger, William S. (Dep. Chem. Biochem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). J. Chem. Phys. 1993, 98(11), 8859-69 (Eng). All-electron complete active space SCF followed by full second-order CI calcns. which included up to 1.7 million configurations were made on several electronic state of PH_n and PH_n⁺ (n=1-3). A comparison is made of the results of several basis sets up to the largest set, namely, the (13s10p3d2 flg/7s6p3d2 flg) basis set for P and a (10s5p1d, 5s4p1d) basis set for the H atom. Relativistic effective core potentials MRCI computations were also carried out. The calcd. inversion barrier of PH₃ is 34.6 kcal/mol, whereas the corresponding inversion barrier of PH₃⁺ is only 2.5 kcal/mol. The bond energies of PH_n and PH_n⁺ as well as adiabatic ionization energies of PH_n are computed and compared with exptl. results. The core-valence and core-external correlation effects are also computed for the diat. PH mol.

P_3H_5

P_4H_6

P_5H_3 и др.

1994

122: 223382q Structural rules of phosphorus: verification and rationalization. Haeser, Marco (Inst. Phys. Chem., Univ. Karlsruhe, D-76128 Karlsruhe, Germany). *Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem.* 1994, 93-94(1-4), 235-9 (Eng). The structural rules of phosphorus as formulated by Baudler and Haeser apply to covalently linked networks of phosphorus atoms in the absence of perturbing factors. Here these rules are systematically verified by ab initio calcns., and justified in terms of more basic chem. concepts. Possible structures and conformers of the phosphanes P_3H_5 , P_4H_6 , P_5H_3 , P_5H_5 , P_5H_7 , P_6H_6 , P_8H_6 , $P_{10}H_6$, $P_{13}H_3$, and $P_{13}H_3$ are discussed.

физикохимия
сложных
веществ

С.А. 1995, 122, N 18

$P_{10}H_2$
 P_7H

1994

121: 92378x **Structural Rules of Phosphorus.** Haeser, Marco (Institut fuer Physikalische Chemie, Universitaet Karlsruhe, D-76128 Karlsruhe, Germany). *J. Am. Chem. Soc.* 1994, 116(15), 6925-6 (Eng). A concise chem. heuristic and nomenclature is introduced for the systematic deduction and classification of covalent partial structures of phosphorus in polycyclic phosphanes and other PP covalency dominated phosphorus compds. Structural predictions with respect to the known, but structurally uncharacterized phosphanes $P_{10}H_2$ and P_7H are tested by state-of-the-art ab initio calcns.

Структурн.
параметры

C. A. 1994, 121, N 8.

МР₄⁻

1994

20 Б1036. Неэмпирическое исследование методом МО периодических тенденций в структурах и энергиях гипervalентных соединений. Четырехкоординированные анионы XH_4^- и XF_4^- , содержащие центральный атом 15-й группы ($\text{X}=\text{P}, \text{As}, \text{Sb}, \text{Bi}$). Ab initio MO study on the periodic trends in structures and energies of hypervalent compounds: Four-coordinated XH_4^- and XF_4^- anions containing a group 15 central atom ($\text{X}=\text{P}, \text{As}, \text{Sb}, \text{Bi}$) /Moc Jerzy, Morokuma Keiji //Inorg. Chem. .—1994 .—33, № 3 .—С. 551—560 .—Англ.

М.П.

(+7) 17

MAz_4^- , MSb_4^- , MBi_4^- , PF_4^- ,
 AsF_4^- , SbF_4^- ,
 BiF_4^-

Х. 1994, № 20

P₂H₂

1995

F: P₂H₂

P: 3

05.Д.0092. Кривые потенциальной энергии для геометрической изомеризации и термического разложения дифосфена HP=PH в основном и возбужденных электронных состояниях. Potential energy profiles of the geometric isomerization and the thermal decomposition of diphosphene HP=HP in the ground and excited electronic states / Fueno Takayuki, Akagi Hiroshi // Theor. chim. acta. - 1995. - 92, N 1. - С. 1-12. - Англ. эмпирическим методом ССП МО ЛКАО в полном активном пространстве, а также с учетом электронной корреляции по КВ изучены изомеризация и дегидрирование HP=PH в основном и некоторых низлежащих возбужденных состояниях. Барьеры транс-цис-изомеризации путем плоскостной инверсии и вращения в основном состоянии оценены в 265 и 144 кДж/моль (последнее значение меньше энергий диссоциации связей PH и PP - 304 и 271 кДж/моль).

X.1996, N 5.

P_4H^+

1996

(Apj)

124: 156536u A New Bond from an Old Molecule: Formation, Stability, and Structure of P_4H^+ . Abboud, J.-L. M.; Herreros, M.; Notario, R.; Esseffar, M.; Mo, O.; Yanez, M. (Instituto Rocasolano, C.S.I.C., Madrid, Spain E-28006). *J. Am. Chem. Soc.* 1996, 118(5), 1126-30 (Eng). The hitherto unknown gas-phase basicity of the tetraphosphorus mol., P_4 , was detd. by means of Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry using proton transfer equil. techniques. A quantum mech. treatment of P_4 and P_4H^+ in the framework of the G2 level of theory leads to a proton affinity agreeing nicely with the exptl. value and, most important, reveals the existence of a novel kind of chem. bond in P_4H^+ : the sym. and essentially covalent (P-H-P) linkage.

C. A. 1996, 124, N12.

P₃H₅

1996

126: 191201u Ab initio studies on the structure and stability of P₃H₅. Ding, Fu Jiang; Zhang, Liang Fu (Chengdu Institute Organic Chem., Academia Sinica, Chengdu, Peop. Rep. China 610041). *THEOCHEM* 1996, 369, 167-172 (Eng), Elsevier. Ab initio studies applying the 3-21G, 6-31G, 6-31G* and 6-31G** basis sets, and also including MP2 corrections were carried out on four conformations of triphosphine. First, the geometry of the four mols. was optimized using the theor. methods mentioned in the Hartree-Fock (HF) scheme. The energies of the mols. at stationary points corresponding to HF/6-31G** geometries were subsequently calcd. including electron correlation effects on the level of the second-order Moller-Plesset (MP2) perturbation theory. Other physicochem. characteristics of the hydrides, such as vibrational frequencies, dipole moments, net charges, and energies of the lowest unoccupied and highest occupied MOs were obtained from theor. calcns. The results of our ab initio calcns. indicate that the gauche conformer between adjacent lone electron pairs and between P-H bonds with adjacent P-P bonds is the most stable conformer.

См. кн. 1996
и см. в кн. 1997
Мног. факт

C.A. 1997, 126, N 14

P_3H_5

1996

23Б143. Неэмпирическое изучение структуры и устойчивости P_3H_5 . Ab initio studies on the structure and stability of P_3H_5 / Ding Fu Jiang, Zhang Liang Fu // J. Mol. Struct. Theochem.— 1996.— 369.— С. 167-172.— Англ.

Неэмпирическими методами ХФ и МП2 в базисах 3-21 ГФ, 6-31 ГФ, 6-31 ГФ* и 6-31 ГФ** исследованы четыре конформации P_3H_5 и установлена наиболее устойчивая изомерная форма.

Н. С.

М.П.

Х. 1997, № 23

P3H5

[Dm. 38525]

1996

струк-
тура,

Fu Liang Ding[†],
Liang Fu Zhang,

стабильн, *J. Mol. Struct. (Theochem)*,
ab initio
paper 1996, 369, 167-172

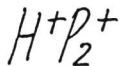
P₅H

1996

125: 68284a Pentaphosphole: An Aromatic Ring with a Planar σ^3 -Phosphorus. Nyulaszi, Laszlo (Department of Inorganic Chemistry, Technical University of Budapest, H-1521 Budapest, Hung.). *Inorg. Chem.* 1996, 35(16), 4690-4693 (Eng). Correlated ab initio calcns. show that pentaphosphole (P_5H) is a planar five-membered heterocycle at all levels of theory investigated here. The HP out of plane bending potential, however, is rather shallow. All the PP bond lengths are nearly equal, indicating significant arom. character. The Bird index is 77, a value that is among the largest for the five-membered heterocycles. The av. of the double bond characters is 59.6% that is smaller than the 67% for benzene. The stabilization as measured by an isodesmic reaction is comparable to the value for thiophene. In spite of the arom. stabilization the inherent instability of the P:P-P:P linkage indicates that the ring is rather unstable. Several dimeric products ($P_{10}H_2$) were found, however, which were more stable than two P_5H mols. by 28-35 kcal/mol. Since in case of P_5R there is no possibility for kinetic stabilization by bulky substituents, it is questionable that the compd. can be synthesized.

неопрем.
наил
открыта,
см. докл. Н.

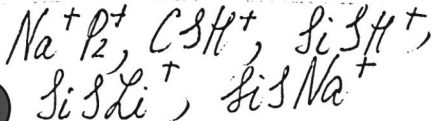
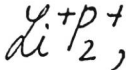
C. A. 1996, 125, N 6



1996

125: 257526s H^+ , Li^+ , and Na^+ affinity study of N_2 , P_2 , and their isoelectronic species. Su, Yu-Nung; Tsai, Ming-Sung; Chu, San-Yan (Dep. Chemistry, National Tsing Hua Univ., Taichung, Peop. Rep. China). *Int. J. Quantum Chem.* 1996, 59(6), 487-493 (Eng). The authors performed ab initio calcns. for protonated P_2 , N_2 , NP , and their isoelectronic species, i.e., CO , CS , SiO , and SiS . The proton affinities at different sites were examd. to characterize special properties of the second-row elements. To tune the acid strength, they also studied the Li^+ and Na^+ affinities for comparison. These systems are isovalent to acetylene and disilyne; their structural features such as linear or bent is of special interest. All calcns. were performed by the GAUSSIAN 92 program using the 6-31G** basis set and the basis set at the Hartree-Fock and MP2(full) levels. Bent structures were found for XP_2^+ , CSH^+ , and $SiSX$ ($X = H^+$, Li^+ , Na^+).

смыкка
уорхитал
неоп. павет



C. A. 1996, 125, N 20

РН⁶ и др.

1997

Мос, Jerzy, et al,

стр-ра,
статистик,
мод.
расчет

г. Мст. Стркт.
1997, 436-437, 401-418

(ан. PF₅; ● III)

1998

PH_n ,
 PH_n^+
 PH_n^-
 PH_n

Ricca, Alessandra
et al.,

Chem. Phys. Lett., 1998,
285 (5, 6), 455-458

(Di,
cmp-pa)

(all. PH_n ; I)

F: PHn

P: 3

131:189874 Energies of ground state for XHn (X = Si, P, S) molecules with single-center spherical symmetry approximation. Wang, Ya-Hong; Zang, Shu- Zhang, Jing-Wei; Zhang, Yu-Chang (Mathematics and physics Teeahing Dinisi Dalian Inst. of Light Ind., Dalian 116034, Peop. Rep. China). Dalian Qin

Xueyuan Xuebao, 18(2), 174-177 (Chinese) 1999 The authors simplify the multi-center mol. equation into a single-center atom, approximated by a single-center spherical symmetry model. The ener the ground state of these mols. have been calcd. according to the SCF the applied to atoms. Our results are better than those of other methods, an process has been simplified greatly.

1999