

P-4

1669-II; 1694-III

1658-

$\text{Z}_0$  (  $\text{Li}, \text{J}, \text{PH}_3\text{D}$  )

Pratt L., Richardson R.E.  
Trans. Faraday Soc., 1954, 50,  
p. 7, 670-674 ( same )  
Nuclear magnetic resonance  
spectra of phosphonium iodide  
and phosphonium bromide.

PL., 1955, II 5, 7026

10

III - 1695

DHy 3 }  
DHy 3 } (0i)

1957

Martinez J. V., Wagner E. L.

J. Chem. Phys., 1957, 27, n<sup>o</sup> 5, 1110-1113  
(au 24).

Корреляционные checkings и спектральная  
коэффициентов преобразования в низкочастотном  
спектре преобразований.

A-2

Proc. Amer. 1958, v. 12, 38645, 10-

$\text{PCl}_2\text{Y}$   $(\text{Y}_i)$   $\# - 1699$

1957

~~Schilling G.~~

C. r. Acad. sci., 1957, 245, № 26, 2499-2502 (opp.)

Данные спектров комбинационного  
расщепления от образования хлоридов  
брюсера при смещении  $\text{PCl}_3$  и  $\text{Py}_3$ .

РМН, 1959, № 3, 30196

1 + 2

PH43 (V<sub>D</sub>) 3 XIII 1807 1966

Rush J. J.

J. Clew. Plugs. (366, 64, 113, 18703, a.)

flow - frequency modulator and transmitter  
in 70-odd u.s. stations indicating

6 (A, 1366, 64, v) 13, 18703,

15 Б218. Низкочастотные движения и барьер вращения в йодиде фосфония. Rush J. J. Low-frequency motions and barrier to rotation in phosphonium iodide. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 4, 1722—1723 (англ.)

1966

В спектре рассеяния холодных нейтронов ( $E_n \leq 5 \cdot 10^{-3}$  эв) на PH<sub>4</sub>J обнаружены максимумы при 614, 335 и 110 см<sup>-1</sup>. Интенсивный пик 335 см<sup>-1</sup> отнесен к переходу 1→0 крутильного кол. иона PH<sub>4</sub><sup>+</sup> в решетке PH<sub>4</sub>J. Это хорошо согласуется со значением частоты этого колебания, полученным из составных полос ИК-спектра. Пик средней интенсивности 614 см<sup>-1</sup> отнесен к переходу 2→0 крутильного кол. Слабый пик 110 см<sup>-1</sup> отнесен к трансляционному кол. иона PH<sub>4</sub><sup>+</sup>. Вычислен барьер вращения иона PH<sub>4</sub><sup>+</sup> в решетке PH<sub>4</sub>J. Отмечается, что для PH<sub>4</sub>J величина барьера ( $v = 7,1 \pm 0,5$  кал/моль) значительно выше, чем в галогенидах аммония. Это позволяет объяснить тот факт, что в PH<sub>4</sub>J в отличие от галогенидов аммония отсутствуют фазовые переходы при  $t < 10^\circ$ .

Е. Матросов

PH<sub>4</sub>J

✓ VJ

✓ 808

✓ 1111

X. 1966

• 15

PH<sub>4</sub>I

XIII-1806

1966

(V<sub>0</sub>)

Low-frequency motions and barrier to rotation in phosphonium iodide. J. J. Rush (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 44(4), 1722-3(1966)(Eng). The neutron spectrum of polycryst. PH<sub>4</sub>I was obtained at 292°K. Three distinct inelastic scattering max. are observed at energy gains corresponding to 110, 335, and 614 cm.<sup>-1</sup>. The intense band peaked at 335 cm.<sup>-1</sup> is assigned to the 1 → 0 transitions of the torsional oscillations of PH<sub>4</sub><sup>+</sup> in the lattice. The less intense max. around 614 cm.<sup>-1</sup> is attributed to the 2 → 0 transitions of the torsional modes. The band peaked at 110 cm.<sup>-1</sup> is tentatively assigned to the translational optical vibrations of PH<sub>4</sub><sup>+</sup>. The barrier to rotation of PH<sub>4</sub><sup>+</sup> in the PH<sub>4</sub>I lattice, calcd. from the peak at 335 cm.<sup>-1</sup>, is 7.1 ± 0.5 kcal./mole.

BGJN

C.R.

187039

1966.64.13

1967

РН<sub>4</sub> Й

9 Б502. Водородная связь йодида фосфония. Нейтронографическое исследование. Sequeira A., Hamilton Walter C. Hydrogen bonding in phosphonium iodide: a neutron-diffraction study. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 5, 1818—1822 (англ.)

нейтроно-  
графия.  
исследование

Нейтронографически на основе трехмерных данных проведено исследование монокристаллов РН<sub>4</sub> Й. Подтверждено наличие слабых водородных связей Р—Н...Й в этой системе. Установлено, что каждый атом йода окружен четырьмя водородными атомами с межатомным расстоянием в 3,35 Å. Для четырех других водородных

Х. 1968. 9

связей это расстояние равно 2,87 Å. Длина связи Р—Н равна 1,414 Å, угол Р—Н...J 171,6°. Параметры теплового движения, полученные из дифракционных исследований, позволили предсказать собственную частоту  $246 \text{ см}^{-1}$  в сравнение с величиной  $335 \text{ см}^{-1}$ , полученной из данных неупругого рассеяния нейтронов (РЖХим, 1966, 15Б218). Результаты сопоставляются с проведенными расчетами энергии кристалла.

Р. Ф.

81014.1305  
Ch, Ph

$\text{PH}_4\text{J}$ ,  $\text{PD}_4\text{J}$ ,  $\text{Ph}_4^+$ ,  
 $\text{PD}_4^+ (\text{D}, \text{E})$  0892

1968  
XIII/1733

Durig J.R., Antion D.J., Baglin F.G.

Far-infrared and Raman spectra of  
phosphonium iodide and phosphonium  
iodide-d<sub>4</sub>.

"J. Chem. Phys.", 1968, 49, N 2, 686-694

6

10 лист ф.к. (англ.)

847 356

858 б гипуресивинити

$\text{PX}_2\text{Y}$

12

XIII 203

✓ 468

$X = \text{F, Cl, Br, I, } \text{Cl}_2$ ,  $Y = \text{Cl, Br, I, F}$  (Y<sub>i</sub>, Cryptocellag.  
 $\text{AsCl}_2\text{Br}_2$ ,  $\text{AsBr}_2\text{Cl}$ , Ammon. Kost.)

El Webredd J., Viz: B., Gyvius S.

Mueller A., Kiebs B. 20

F. Mol. Struct., 1968 2(2), 158-60

Mean amplitudes of vibration for  
 mixed halides of phosphorus and arsenic  
 CA, 1968, 69, w16, 63188n

10

PBr<sub>2</sub>Y A-1974 1968  
PF<sub>2</sub>Y u.g.p. (Vi, Tepuisogen. Q.-III)  
Müller A., Wiecke E., Krebs B.,  
Glemser O.  
Z. Naturforsch. , 1968, 23b, NS,  
588-594  
PBr<sub>2</sub>Y, PCl<sub>2</sub>Y,  
JO

13

XIII 436

(1968)

21; east side of the Pb-Zn, As-Bi, Cd,  
 Pb-Zn-Ag, Pb-Zn-Cd, Pb-Sb, Pb-Zn-Ag-Cd,  
 Pb-Zn-Ag, Pb-Zn-Cd, Pb-Sb, Pb-Zn-Ag-Cd,  
 Pb-Zn-Ag, Pb-Zn-Cd, Pb-Sb, Pb-Zn-Ag-Cd,

Hiller A., Krebs B., Berlebod I.,  
 Vizsnyi B., Cyrius S. J.

7 Mineral Street, 1968, 2, nr, 149-153  
 Force constants for mixed halides  
 of phosphosilicate and arsenite

Proc. Roy. Soc., 1972, 1560

60 191

1969

XIII-1202

РН<sub>4</sub>J

(криоген.)

РН<sub>4</sub>Cl

36

26

X. 1970. 9

9 Б313. Лазерные спектры комбинационного рассеяния PH<sub>4</sub>J, PH<sub>4</sub>Br и PH<sub>4</sub>Cl. Rush J. J., Melveger A. J., Lippincott E. R. Laser-Raman spectra of PH<sub>4</sub>J, PH<sub>4</sub>Br, and PH<sub>4</sub>Cl. «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 7, 2947—2955 (англ.)

Сняты спектры КР (возбуждение линий 6328 Å He—Ne) поликристаллич. образцов PH<sub>4</sub>J, PH<sub>4</sub>Br при 23° и PH<sub>4</sub>Cl при 5°. Предложено отнесение частот основных кол. иона фосфония PH<sub>4</sub><sup>+</sup>(D<sub>4</sub>): ν<sub>2</sub>(E<sub>g</sub>) область 2365—2395 см<sup>-1</sup>; ν<sub>1</sub>(A<sub>1g</sub>) 2299—2349 см<sup>-1</sup>; ν<sub>2</sub>(A<sub>1g</sub>, B<sub>1g</sub>) 1091—1133 см<sup>-1</sup>; ν<sub>4</sub>(E<sub>g</sub>) 924—955 см<sup>-1</sup>. Торзионные кол. кристаллич. решетки L<sub>2</sub>(E<sub>g</sub>) найдены равными 326, 343 и

$363 \text{ см}^{-1}$  для  $\text{RH}_4\text{J}$ ,  $\text{RH}_4\text{Br}$  и  $\text{RH}_4\text{Cl}$  и трансляционные  $T_1(A_{1g})$  55,5, 75 и  $112 \text{ см}^{-1}$  соотв. Барьеры внутреннего вращения, рассчитанные в предположении простого косинусоидального потенциала 4-го порядка, составляют соотв. 6,7, 7,4 и 8,2 ккал/моль. Результаты сравнены с имеющимися данными по оптич. и ЯМР-спектрам и нейтронографич. исследованиям как  $\text{RH}_4\text{X}$ , так и их аналогов  $\text{NH}_4\text{X}$ . Обсуждены различия между силовыми полями солей  $\text{RH}_4\text{X}$  и  $\text{NH}_4\text{X}$ .

Б: В. Рассадин

130493q Laser-Raman spectra of PH<sub>4</sub>I, PH<sub>4</sub>Br, and PH<sub>4</sub>Cl.  
Rush, John J.; Melveger, Alvin J.; Lippincott, E. R. (Center  
for Radiat. Res., Nat. Bur. of Stand., Washington, D.C.). J.  
Chem. Phys. 1969, 51(7), 2947-55 (Eng). Laser-Raman spectra  
have been measured at 23° for PH<sub>4</sub>I and PH<sub>4</sub>Br and at about 5°  
for PH<sub>4</sub>Cl. Peaks observed in the spectra of all the halides are  
assigned to "internal" PH<sub>4</sub><sup>+</sup> modes,  $\nu_1(A_{1g})$ ,  $\nu_2(A_{1g}, B_{1g})$ ,  $\nu_3(E_g)$ ,  
and  $\nu_4(E_g)$  and to torsional [L<sub>1</sub>(E<sub>g</sub>)] and translational [T<sub>1</sub>(A<sub>1g</sub>)]  
lattice modes. The torsional frequencies are 326, 343 and 363  
cm.<sup>-1</sup>, resp., for PH<sub>4</sub>I, PH<sub>4</sub>Br, and PH<sub>4</sub>Cl, while the translational  
mode is observed at 55.5, 75, and 112 cm.<sup>-1</sup>, resp. Barriers to  
rotation are calcd. from the torsional frequencies on the simple  
but unrealistic assumption of a 4-fold cosine-type potential for  
the PH<sub>4</sub><sup>+</sup> ions. The barriers obtained are 6.7, 7.4, and 8.2  
kcal./mole, resp., for PH<sub>4</sub>I, PH<sub>4</sub>Br, and PH<sub>4</sub>Cl. The spectral  
results and calcd. barriers are compared in some detail with  
previous optical, N.M.R., and neutron scattering results for both  
the phosphonium and ammonium halides. Suggested differences  
in force fields between the ammonium and phosphonium salts are  
discussed.

RCJQ

PH<sub>4</sub>IPH<sub>4</sub>BrPH<sub>4</sub>Cl

J.

S.

C.A. 19

69

71.26

PH<sub>4</sub>Br  
PH<sub>4</sub>Cl

1969

1970

PH<sub>4</sub>J

PD<sub>4</sub>J

1  
i

36474z Vibrational spectra and molecular dynamics of some phosphonium and ammonium salts. Antion, Daniel J. (Univ. of South Carolina, Columbia, S.C.). 1969, 140 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 70-9272. From *Diss. Abstr. Int. B* 1970, 30(12)(Pt. 1), 5446-7.

SNDC

(+3)

☒

C.A. 1970. 71. 34

JK снеги  
PH<sub>4</sub>J  
PD<sub>4</sub>J V.

JK снеги NH<sub>4</sub>F  
ND<sub>4</sub>F Di

JK снеги  
PH<sub>4</sub>Br  
PD<sub>4</sub>Br V.

NH<sub>4</sub>Cl Di

PBr<sub>5</sub>Cl

БР - 858-ХIII

1971

D 7 Д525. Исследование комплексов PBr<sub>5</sub>Cl методом комбинационного рассеяния. Dhamelincourt Paul, Grunelle-Cras Monique. Etude par spectroscopie Raman du complexe PBr<sub>5</sub>Cl. «С. г. Acad. sci.», 1971, 272, № 1, B50—B52 (франц.)

Исследован спектр комб. рас. кристаллич. PBr<sub>5</sub>Cl (I) при т-ре жидкого N<sub>2</sub>. В спектре наблюдаются полосы, характеристич. для иона PBr<sub>4</sub><sup>+</sup>, что подтверждает ионную структуру I. Дублеты (106,109 см<sup>-1</sup>), (146,150 см<sup>-1</sup>) и (202,205 см<sup>-1</sup>) отнесены к колебаниям иона BrJCl<sup>-</sup>. Приведены таблицы частот и дано отнесение полос к характеристич. колебаниям связей и групп. Библ. 5.

Э. В. Б.

оп. 1971-28



PBr<sub>5</sub>ICl

P-Hal, Br-858-XIII  
1971

11 Б219. Исследование спектра комбинационного рас-  
сения комплекса PBr<sub>5</sub>ICl. Dhamelincourt Paul,  
Grinelle-Cras Monique. Etude par spectroscopie  
Raman du complexe PBr<sub>5</sub>ICl. «С. г. Acad. sci.», 1971,  
272, № 1, B50—B52 (франц.)

Исследован спектр КР комплекса PBr<sub>5</sub>ICl, возбужден-  
ный Не—Не-лазером, при т-ре жидк. азота. Проведена  
интерпретация спектра и отнесение колебаний по фор-  
ме. Общий характер спектра согласуется с предположе-  
нием об ионном строении комплекса (PBr<sub>4</sub><sup>+</sup>, BrICl<sup>-</sup>) и  
ромбич. структуре кристалла. Я. М. Кимельфельд

КР-спектр

X-1971.

11

PF<sub>2</sub>J

1972

Cradock S; et al.

ФОТОДА.  
снекрп.

"J. Chem. Soc. Far. Trans"

1972, Part 2, 68, N6, 940-6.

(cell. PF<sub>2</sub>H, III)

1972

PF<sub>2</sub>F (u.n.; m.p.) XIII 2252.

Dean C.R.S., Finch A., Gates P.N.,

"J. Chem. Soc. Dalton Trans," 1972, N<sup>o</sup>3, 1384-87

Vibrational spectra and thermodynamic properties of difluoroiodophosphine.

Proc. R. Soc. 1973. 15227. 10

(P)

5

50106.7329  
Ch, Ph, TC

29862, 22  
PF<sub>2</sub> (dogy) (AP) #is-8018  
1974

XIII-2894

Dean Christopher R.S., Finch Arthur,  
Gardner Peter J., Payling David W.

Appearance and ionization potentials  
of ions produced by electron-impact on  
some phosphorus-fluorine compounds: the  
phosphorus-phosphorus bond dissociation  
energy in diphosphorus tetrafluoride.

"J.Chem.Soc.Faraday Trans.", 1974, Part I,  
70, N. 11, 1921-1925 (англ.)

(есл. P<sub>2</sub>F<sub>4</sub>) III 0275 ник винити  
254 255

$\text{YO}_2\text{PO}_2\text{F}_2$

1980

(8i)

литература соединений.

21 Б212. Получение новых дифтордиоксофосфатов из дифторокси фосфорила. Часть II. Реакции с иодноватой и ортоидной кислотами. Addou A., Vast P., Preparation de nouveaux difluorodioxophosphates à partir de l'oxyde de difluogure de phosphoryle. Partie II. Réactions sur les acides iodique et périodique. «J. Fluor. Chem.», 1980, 16, № 1, 89—96 (франц.; рез. англ.)

Получены новые соединения иодил- $\text{JO}_2\text{PO}_2\text{F}_2$  (I) и периодилдифтордиоксофосфат  $\text{JO}_3\text{PO}_2\text{F}_2$  (II) в результате реагирования иодноватой  $\text{HJO}_3$  и ортоидной  $\text{H}_5\text{JO}_6$  к-т с дифторфосфорилоксидом  $\text{P}_2\text{O}_3\text{F}_4$ ; полученные соединения представляют собой желтоватые гигроскопич. кристаллы, неустойчивые на воздухе. Измерены их спектр.

Х. 1980 № 21

ры КР ( $\text{Ar}^+$ -лазер,  $\lambda$  5245 Å) и предложено отнесение наблюдавшихся полос:  $\nu(\text{P—O})$  симм. I 1163  $\text{см}^{-1}$  с., II 1123 с.;  $\nu(\text{P—F})$  симм. I 918 о. с., II 891 с.;  $\nu(\text{JO}_2)$  антисимм. I 839 с., 799 с., II 797 о. с.;  $\nu(\text{J—O})$  симм. I 781 о. с., 737 с., 713 о. с., 637 о. с., II 717 с., 671 сп., 643 с.;  $\nu(\text{O—J—O})$  II 569 с., 473 с. с.;  $\delta(\text{JO}_2)$  I 373 о. с., 329 о. с., 323 о. с., 295 о. с., II 395 сл., 367 сл., 343 сл., 305 с., 269 о. с., 247 о. с. В низкочастотной области наблюдаются также полосы для I 219 с., 191 с., 163 сп. и для II 217 сл. (о. с. — очень сильная, с. — сильная, сп. — средняя, сл. — слабая полосы). Сделан вывод, что ионы  $\text{JO}_3^-$  в II имеют димерную структуру и ионы  $\text{JO}_2^-$  в I — мономерную. Ч. 1 см. «J. Fluor. Chem.», 1979, 14, 163.

Б. В. Дассалини

PJ<sub>3</sub>H

1983

Dhanalakshmi A.,  
Kamala P.

7i; Bull. cl. sci. Acad. Roy.  
Belg., 1983, 69, n<sup>o</sup> 2, 110-116.

(cres. CF<sub>3</sub>H; III)

PJ<sub>3</sub> Cl

1983

Dhanalakshmi A.,  
Kamala P.

Pi; Bull. cl. sci. Acad. roy.  
Belg., 1983, 69, N<sup>o</sup> 2, 110-116.

(Cu·CF<sub>3</sub>H; III)

PF<sub>3</sub>J

1983

Dhanalakshmi A.,  
Kamala P.

Pi; Bull. cl. sci. Acad. roy.  
Belg., 1983, 69, N<sup>o</sup> 2, 110-116.

(C<sub>60</sub> CF<sub>3</sub>H;  $\Sigma\Sigma$ )

PY<sub>3</sub>O

1983

Dhanalakshmi A.,  
Ramala P.

2i;

Bull. cl. sci. Acad. roy.  
Belg., 1983, 69, N<sup>o</sup> 2, 110-116.

(cu. CF<sub>3</sub>H; III)

$\text{PCl}_3\text{J}$

1983

Dhanalakshmi S.,  
Kamala P.

Pi; Bull. cl. sci. Acad. roy.  
Belg., 1983, 69, n°, 110-116.

( $\text{Cu} \cdot \text{CF}_3\text{H}$ ; III)

PBZ<sub>3</sub>T

1983

Dhanalakshmi A.,  
Kamala P.

Pi; Bull. cl. sci. Acad. Roy.  
Belg., 1983, 69, n<sup>o</sup> 2, 110-116.

(cu. CF<sub>3</sub>H; III)

РГБз2

[ом. 30981]

1988

Mohan S., Derais.,

постоян.

центробеж.

исследований

и корiolис.

постоян.,

расчет.

Proc. Indian Natn. Sci.

Acad. 1988, 54A, N1,

76-83.

PgF<sub>2</sub>

[Om. 30981]

1988

Mohai S., Durai S.,

ночной.

центробежн.

искалечн.

уровни.

ночной.

расчет.

Proc. Indian Natn. Sci.

Acad. 1988, 54A, N1,

76-83.

PBr<sub>3</sub>Y<sub>2</sub> (dm. 30981)

1988

Mohan S.,  
Dierai S.,

Proc. Indian Nat. Sci.

Vol. 54, Acad. A. 1988. No. 1,  
p. 76-83.

(catalyzed by PFCl<sub>2</sub>; III)

PF<sub>3</sub><sup>g</sup> (On 30/981) 1988

Mohan S., Durai S.,

Proc. Indian Nat. Sci.

Acad. A. 1988. 54, N<sup>o</sup> 1,  
p. 76-83.

(car. PFCl<sub>2</sub>;  $\overline{III}$ )

Pilla [om. 30981] 1988

Mohan S., Durai S.,

ночной.

центробеды.

Чеканки

Икорные.

ночной.

распр.

Proc. Indian Natn. Sci.

Acad. 1988, 54A, N 1,

76-83.

$\text{Z}_2 \text{P-PZ}_2$

(DM 34175)

1990

Stølevik R., Bakken P.,  
Heppenst., J. Mol. Struct. 1990, 220,  
269-277.

noceū. Conformational struc-  
tures and energies, rota-  
tional barrier heights and

~~for~~ torsional oscillations in tetrahalodiphosphines, tetra-halo hydrazines and  $X_2N-PX_2$  molecules.

$\text{PH}_3\text{HI}$

OM 36239

1991

114: 216932v Rotational spectrum of phosphonium iodide vapor. Howard, N. W.; Legon, A. C.; Luscombe, G. J. (Dep. Chem., Univ. Exeter, Exeter, UK EX4 4QD). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1991, 87(4), 507-12 (Eng). The ground-state rotational spectrum of the assocd. species ( $\text{PH}_3$ , HI) was obsd. in the vapor above solid phosphonium iodide by means of pulsed-nozzle Fourier-transform microwave spectroscopy. To fit the obsd. hyperfine frequencies of this sym.-top isotopomer it is necessary to allow for the variation of the iodine nuclear quadrupole coupling const. with  $J$  and  $K$  as well as to take into account iodine spin-rotation coupling. Interpretation of the spectroscopic consts. of the 3 isotopomers ( $\text{PH}_3$ , HI), ( $\text{PH}_3$ , DI) and ( $\text{PH}_2\text{D}$ , HI) leads to the conclusion that the obsd. species have nuclei in the order  $\text{H}_3\text{P} \dots \text{HI}$  and, for the first of the 3, that  $r(\text{P} \dots \text{I}) = 4.3822 \text{ \AA}$ . For the series HX the order of the electrophilicity is  $\text{F} > \text{Cl} > \text{CN} > \text{Br} > \text{I}$  while the order of the nucleophilicity is  $\text{HCN} > \text{HF} > \text{HCl} \approx \text{HI}$ .

CRAICNP,

M.N.

C.A. 1991, 114, N 22

РН<sub>3</sub>И й

ОМ 36239

1991

23 Б1322. Вращательный спектр паров иодида фосфония. Rotational spectrum of phosphonium iodide vapour / Howard N. W., Legon A. C., Luscombe G. J. // J. Chem. Soc. Faraday Trans.— 1991.— 87, № 4.— С. 507—512.— Англ.

В режиме импульсного пучка (дано описание источника) измерены (микроволновый фурье-спектрометр) вращат. спектры трех изотопомеров иодида фосфония,  $\text{PH}_3\cdot\text{HI}$ ;  $\text{PH}_3\cdot\text{DI}$  и  $\text{PH}_2\text{DHI}$ , в основном состоянии. Приведено положение и отнесение наблюдавшихся переходов. Анализ спектров выполнен с использованием модели полужесткого симм. волчка с учетом ядерного квадрупольного вз-вия и ядерного спин-вращат. вз-вия (по иоду). Учитывались только диагональные матричные элементы. Значения вращат. постоянных  $B_0$ ,  $D_J$ ,  $D_{JK}$ ,  $H_{JK}$ ; постоянных квадрупольного вз-вия  $\chi_R$ ,  $\chi_d$ ,  $\chi_J$ ,  $\chi_K$ ; постоянных спин-вращат. вз-вия  $C_N$ ,  $C_K$  для  $\text{PH}_3\text{HI}$  равны, соотв., 944,2020 МГц, 1,718 и 280,5 кГц, 11 Гц, —1461,022 МГц, 469 и —2,3 кГц, —1,30 МГц, 1,9 и 8 кГц. Аналогичные, но менее полные наборы

М.1

Х.1991, № 23

параметров приведены для двух др. изотопомеров. Для описания геометрич. структуры и внутр. динамики использованы следующие параметры:  $\langle R_{\text{ЦМ}}^2 \rangle^{1/2}$  — среднеквадратичное расстояние между центрами масс фрагментов  $\text{PH}_3$  и  $\text{HI}$ ,  $R(\text{P}\cdots\text{I})$  — среднее расстояние между атомами P и I,  $\alpha_{\text{ср}}$  — средний угол между осью  $C_3$  фрагмента  $\text{PH}_3$  и вектором  $R_{\text{ЦМ}}$ ,  $\beta_{\text{ср}}$  — средний угол между осью фрагмента  $\text{HI}$  и  $R_{\text{ЦМ}}$ ,  $k$  — силовая постоянная Н-связи. Значения этих параметров для  $\text{PH}_3\text{HI}$ : 4,4380 Å, 4,3822 Å,  $20^\circ$  (оценка),  $21,346^\circ$ , 3,409 Н/м (аналогичные данные приведены для  $\text{PD}_3\text{DI}$ ). Значения  $R(\text{P}\cdots\text{I})$  и  $K$  сопоставляются с данными по родственным молекулам  $\text{H}_3\text{P}\cdots\text{HX}$  ( $\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ ).

Б. М. Ковба

Институт  
химии  
да И

Pg 5

[om. 36909]

1992

zeolempus,  
Koedam.  
racemom1,  
UK unmete,  
cls. role,  
ab initio  
paerem.

Breidung J., Thiel W.,  
J. Comput. Chem., 1992,  
13, N2, 165-176.

*PH<sub>3</sub>I*

1995

123: 68904m Detection of short-lived PH<sub>3</sub>I by high-resolution infrared and millimeter-wave spectroscopy: the ground,  $\nu_3$ ,  $\nu_4$ , and  $\nu_6$  excited states. Beckers, H.; Buerger, H.; Demaison, J.; Drean, P.; Flaud, J.-M.; Paplewski, M. (Anorg. Chem., Univ.-Gesamthochschule, D 42097 Wuppertal, Germany). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 172(1), 78-90 (Eng). By low-resoln. IR spectroscopy the  $\nu_3$  and  $\nu_4$  fundamental vibrations of the hitherto unknown PH<sub>3</sub>I mol. were detected when P<sub>2</sub>H<sub>4</sub> was reacted with HI in the gas phase. At room temp. and a pressure of 1-4 mbar the half-life of PH<sub>3</sub>I was detd. to be ca. 30 s. High-resoln. IR spectra (resoln. ca.  $6 \times 10^{-3}$  cm<sup>-1</sup>) were recorded in the  $\nu_3$  and  $\nu_6$  regions near 750 and 340 cm<sup>-1</sup>. While rotational J, K lines of the near sym. top mol. were resolved in the  $\nu_3$  band, the  $\nu_4$  band revealed sharp (although unresolved) J clusters, which were also found for the hot bands  $2\nu_4 - \nu_4$  and  $3\nu_4 - 2\nu_4$ . Millimeter-wave spectra were recorded in the 350 to 460 GHz range, and ground state consts. detd. by merging  $\Delta K_a = 0$  pure rotational data with ground state combination differences. For A redn. and J representation the following consts. were detd.: A = B<sub>1</sub> 4.35(5), B = B<sub>2</sub> 0.104 876(3), and C = B<sub>3</sub> 0.104 646(3) cm<sup>-1</sup>. The anal. of the  $\nu_3$  band revealed a c-type Coriolis resonance of  $\nu_3$ ,  $\nu_0$  752.525 25(7) cm<sup>-1</sup>, with  $\nu_6$ ,  $\nu_0$  742.684(11) cm<sup>-1</sup>, and  $\xi_{3,6}^c$  (-)0.094 2(1). The  $\nu_4$  level  $\nu_0$  = 337.604 14(5) cm<sup>-1</sup>, and its overtones  $n\nu_4$ , n = 2 and 3, are apparently unperturbed. Very good consistency was found with ab initio predicted mol. parameters, of which several were adopted in our fits when exptl. data were not available.

*Pi, UK crew,  
Flaud, M.  
NO CNO eff.*

C.A.1995, 123, N6

OPg

1998

Boustani, Ihsan; et al.,

lik greeny

Vib. Spectrosc. 1908

as initio

16(2), 157-162.

racem

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>,

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>H<sub>2</sub>

Li

(all)



OPh; II)