

P-CL

III - 3286

(PHCl_2)₃ vapor ($\text{Z}_{\text{p-cl}}$; $\angle \text{Cl-PCl}$) 1943

Brockway L.O., Bright W.M.

J. Am. Chem. Soc. 1943, 65, 1551-4

"The structure of the ...

CA., 1943, 5629⁷

10

PCl_4^+ ; PCl_6^- (силов. пост., $\checkmark$) 1955

Gerding H., Moutgraaf H.,

Recueil trav. chim., 1955, 74, N 1,
5-14 (англ.)

Некоторые замечания о спектре
комбинационного рассеяния твердого
пятихлористого фосфора.

РХ., 1957, N 3, 7212

PCl_{5-n}F_n

1966

9 Б41. Связь в хлорофторидах пятивалентного фосфора. Voorn Peter C. Van Der, Drago Russell S. Bonding in phosphorus (V) chlorofluorides. «J. Amer. Chem. Soc.», 1966, 88, № 14, 3255—3260 (англ.)

расчеты

С целью объяснения конфигураций изомеров $\text{PCl}_{5-n}\text{F}_n$ ($n=0-5$) произведены ~~расчеты~~ этих молекул тремя различными способами в рамках хюккелевского приближения, включая варианты ω -техники и расширенного метода Хюккеля. Определены суммарные прочности связей (суммы интегралов перекрывания) и полные энергии, а также заселенность перекрывания. Найдено, что форма тригон. бипирамиды предпочтительнее тетрагон. пирамиды для всех изомеров, кроме PF_4Cl (в действительности этого исключения нет). Показано, что стабилизация определенных изомеров в основном обуслов-

Х. 1967. 9

лена характером σ -связей, а не образованием π -связей или участием d -орбит, хотя последние 2 фактора имеют некоторое значение. Экваториальные орбиты фосфора (sp^2) более электроотрицательны, чем его аксиальные орбиты (pd или p). Поэтому при одинаковых лигандах экваториальные связи оказываются более прочными, а при разных лигандах (но в отсутствие стерич. препятствий) электроположительные заместители предпочитают электроотрицательные (экваториальные) орбиты, а электроотрицательные заместители — аксиальные орбиты. На этой основе удастся правильно предсказать конфигурации изомеров. Критически обсуждены прежние теоретич. работы на эту тему.

Е. Шусторович

VII -3987

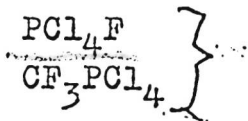
1964

PCl₃F₅ 4 gp. (cont. used.)

Brunvoll Y.,
Acta cheer. scand., 1967, 21,
N2, 473-80

M 2564

1907



(Vi, sil. post.)

Holmes R.R.

J.Chem. Phys, 1967, 46, N-10, 3724-29

Potential field and molecular vibrations of the trigonal bipyramidal model AX_3YZ : penta-coordinated molecules.

PJF, 1968, 3D110
J.

10

3

6 up 100

SPF₃, SPBr₃; OPF₂Cl; OPF₂Br 1964
OPF₂Br, OPF₂Cl; SPF₂Br (vi)

Mueller S., Krebs B., Nieuwe
XIII 435

Ruoff A.,

Ber. Bunsenges Phys. Chem.,
1964, 71(6), 571-77

to (CP)

Ca 1964

PX₂Y

J = Ce

J. F. (Di ~~crystal~~
center)

X = F, Ce, Pr, J

XIII 203 1968

As Cl₂ Pr, As Pr₂ Ce

Elvebredd J., Viz B., Cyvin S.,

Mueller A., Trebs B.,

J. dist. Struct., 1968, 2 (2),

158-60

(cp)

Ca 1968

10

1969

$\text{PCl}_n \text{F}_{5-n}$

Beatti J. R.,
Livingston K. M. S.

$n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$

J. Chem. Phys., 51 (10),
4269.

спектр

(coll. PF_5) I

сч. н. (PCl_4F , PCl_4CF_3 , 1970
XIII 796 $\text{PCl}_3(\text{CF}_3)_2$, PF_4Cl) 13 14
Ramaswamy K., Krishna R. B.,
Z. phys. Chem (DDR), 1970, 245, 13-4,
268-271 (англ).
Molecular constants of phosphorus
- halogen compounds.

Есть оригинал.

Ри Уил, 1971, 16562

10



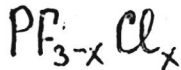
PCl_4F , PCl_4CF_3 ,
 $\text{PCl}_3(\text{CF}_3)_2$, PF_4Cl (curr. noem.) 13 1971
VIII 1971

Ramaswamy K., Rao B.K.,

Z. Phys. Chem., (Leipzig), 1971, 246,
N^o 5-6, 309-12 (ann.)

Molecular constants of phospho-
rus-halogen compounds. V.

copy ref to
21/10/71 (C) Pk CA, 1971, 75, N8, 53165h



1973

6 Д293. Спектры поглощения в вакуумной УФ-области фтор-хлоридов трехвалентного фосфора. Mc-Adams Mary Jane, Russell B. R. The vacuum ultraviolet spectra of fluorine chlorine substituted trivalent phosphorus. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 18, № 3, 402—404 (англ.)

(v:)
В области 1200—2400 Å изучены спектры поглощения молекул $PF_{3-x}Cl_x$ ($x=1; 2; 3$). Данные о полосах сведены в таблицу и сравнены с данными фотоионизации. По мере увеличения x основные полосы смещаются в сторону коротких волн и появляются новые, силы осцилляторов которых растут. Спектры молекул с $x > 0$ содержат полосу $48\,000\text{ см}^{-1}$, которая отнесена к переходу несвязывающего электрона хлора на σ^* -орбиталь.
В. Ф. П.

Ф. 1973. №6

1975
 PF_5 , AsF_5 , VF_5 , $SbCl_5$,
 $NbCl_5$, $PbCl_5$, PF_2Cl_2 (curr. noem.).

Nandi R.N., Ghosh D.K. KM-3127
Indian J. Phys., 1975, 49 (4),
257-68.

Comparative study of the
orbital valency force field...

1975, 83, 20. 168648e. 10 Φ 10

PF₅Cl⁻

1976

Горюхан М.М. и др.

(эл.
строки.)

Координаты. Хим. 1976, 2,
N7, 878-84

(all SiF₅Cl²⁻) III

PClF_4

1980

PCl_2F_3

PCl_3F_2

PCl_4F

/ 94: 20617a Centrifugal distortion constants of some phosphorus(V) chlorofluorides. Ramasamy, R.; Sabapathy, K.; Venkateswarlu, K. (Dep. Phys., P.S.G. Arts Coll., Coimbatore, 641 014 India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1980, 18(11), 912-13 (Eng). The centrifugal distortion consts. were calcd. of PClF_4 , PCl_2F_3 , PCl_3F_2 and PCl_4F .

ноч. уеаѣод.
рачѣне.

с.а. 1981. 24 N 4

PClF_3^-

1981

Wermer P., et al.

Vi

Inorg. Chem., 1981, 20,
N4, 970-973.

● (see PF_4^- ; III)

PF₃Cl

1983

Dhanalakshmi A.,
Kamala P.

Vi; Bull. cl. sci. Akad. roy.
Belg., 1983, 69, n^o 2, 110-116.

● (cm. CF₃H; III)

PClF_4

1986

7 8 Д109. Анализ колебаний молекулы монохлортетрафторида фосфора. Vibrational analysis of phosphorus monochlorotetra fluoride molecule. Mohan S., Gunasekaran S. «Acta phys. pol.», 1986, A69, № 2, 325—332 (англ.)

Из частот колебаний приближенным методом кинетич. констант, связывающим недиагональные силовые постоянные с диагональными, вычислены силовые постоянные, коэф. влияния, среднеквадратичные амплитуды колебаний, постоянные кориолисова взаимодействия и квартичного центробежного искажения молекулы PClF_4 .

М. Р. Алиев

(м.п.)

с/б. 1986, 18, N 8

H₃P_{III} HCl [Om. 27942] 1987

ab initio
pacrim

Alabart J.R., Catal-
ol R.,

Chem. Phys. Lett.,
1987, 141, N4, 384-338.

$\text{PCl}_3 \cdot \text{PH}_3$

1988

Machara N. P.,
Ault B. S.

ИК и УФ
спектры
в газовой фазе

J. Phys. Chem.
1988, 92 (1), 73-7.
(сер. ClF..., PH_3 ; III)

ClF ... PH₃

1988

108: 46064a Infrared and ultraviolet spectroscopic studies of the interaction of chlorine fluoride and chlorine with phosphorus(III) bases in argon matrices. Machara, Nicholas P.; Ault, Bruce S. (Dep. Chem., Univ. Cincinnati, Cincinnati, OH 45221 USA). *J. Phys. Chem.* 1988, 92(1), 73-7 (Eng). The matrix isolation technique were employed to study the interaction of the mol. halogens ClF and Cl₂ with PH₃, (CH₃)₃P, PF₃, and PCl₃. For the 1st 2 phosphines, IR and UV/vis spectral evidence suggested formation of very strongly bound mol. complexes. For example, the Cl-F stretching mode shifted from 768 cm⁻¹ for parent ClF to 406 cm⁻¹ in its complex with PH₃, and to 311 cm⁻¹ in its complex with (CH₃)₃P. These shifts are comparable to those of the ClF⁻ anion, suggesting substantial charge rearrangement in the mol. complex. For the most reactive halogen/trihalophosphine system, (PF₃/ClF) direct reaction was obsd. upon deposition, while for the PF₃/Cl₂ and PCl₃/Cl₂ systems reaction was obsd. after near-UV irradiation. The wavelength dependence of this photolysis provided indirect evidence for weak complex formation in these 2 systems.

UK u Yop
crekmpk &
slamplust

(73) ☒
C.A. 1988, 108, N 6

Cl₂ · PH₃,
PF₃ · PH₃, PCl₃ · PH₃

$\text{Cl}_2 \cdot \text{PH}_3$

1988

Machra N. P.,
Ault B. S.

Указаны
энергии в
электрон-вольт

J. Phys. Chem. 1988,
92 (1), 73-7.

(see $\text{ClF} \cdots \text{PH}_3$; III)

PCl_n
 $n = 1 \div 6$

Om 36810

1992

(смущения в
кислотных ж. растворах
 As , Do)

118: 27731f Study of the structure and stability of phosphorus chlorides, PCl_n ($n = 1-6$), and their anions by the density-functional method. Gutsev, G. L. (Inst. Khim. Fiz. Chernogolovka, Russia). Zh. Neorg. Khim. 1992, 37(10), 2160-73 (Russ). The structure, the lowest electronic states, electron affinities (of PCl_n), ionization potentials (of PCl_n^-), and dissocn. energies were calcd. for the title compds. using 3 versions of the d.-functional method including nonlocal gradient corrections in the exchange potential.

PCl_n (9)
(неоп. параметр)

C. A. 1993, 118, N 4

PCl_n

($n=1-6$)

PCl_n^-

структура,
стабильность

DM 36810

1992

3 Б1022. Исследование структуры и стабильности хлоридов фосфора PCl_n ($n=1-6$) и их анионов методом функционала плотности /Гуцев Г. Л. //Ж. неорганической химии. —1992. —37, № 10. —С. 2160—2173. —Рус.

Электронная и геометрич. структура основных и низколежащих возбужденных состояний хлоридов фосфора PCl_n ($n=1-6$) и их однократно заряженных отриц. ионов рассчитана методом функционала плотности. Использованы три варианта метода, в том числе с включением нелокальных градиентных коррекций в обменный потенциал. Рассчитаны вертикальное и адиабатич. сродство к электрону нейтр. хлоридов фосфора, первые потенциалы ионизации анионов и энергии диссоциации обоих рядов по различным каналам. Получено, что радикал PCl_6 нестабилен по отношению к диссоциации на PCl_4 и Cl_2 . Согласно результатам вычислений, все PCl_n ($n=1-4$) обладают, по крайней мере, одним возбужденным состоянием, стабильным как по отношению к отрыву электрона, так и к диссоциации. Большинство структурных параметров и электронных х-к нейтр. соедин. PCl_n и их анионов получено впервые. Библ. 56.

Х. 1993, № 3

1994

17 Б1018. Теоретическое изучение структуры и устойчивости PCl_n и PCl_n^- , $n=1-6$. A theoretical study on the structure and stability of the PCl_n and PCl_n^- series, $n=1-6$ /Gutsev G. L. //Chem. Phys. .—1994 .—179 ,№ 3 .—С. 325—339 .—Англ.

Методом функционала плотности рассчитана электронная и геометрич. структура основных и низколежащих возбужденных состояний PCl_n и PCl_n^- с $n=1-6$. Получены вертикальное и адиабатич. сродство к электрону для нейтр. молекул и первые потенциалы ионизации для анионов, а также для всех исследованных систем — энергии фрагментации, связанные с различными каналами распада. Показано, что PCl_n и PCl_n^- с $n=1-4$ устойчивы в газ. фазе, PCl_5 , PCl_5^- , PCl_6^- малоустойчивы и молекула PCl_6 очень неустойчива к диссоциации на $\text{PCl}_4 + \text{PCl}_2$. Все нейтр. молекулы имеют положит. адиабатич. сродство к электрону, анионы с $n=1-4$ имеют по крайней мере одно возбужденное состояние, к-рое устойчиво к потере дополнитель. электрона и диссоциации. Библ. 71.

Н. С.

PCl_n
 PCl_n^-
 ($n=1-6$)

М.П.

Х. 1994, N17.

PCl_n^-
 PCl_n^-

1994

$n = 1 \div 6$

теор. исследование
и расчетов.

120: 173874n A theoretical study on the structure and stability of the PCl_n and PCl_n^- series, $n = 1-6$. Gutsev, G. L. (Institute of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Moscow Region, Russia 142432). *Chem. Phys.* 1994, 179(3), 325-39 (Eng). The electronic and geometrical structure of the ground and low-lying excited states for the phosphorus chlorides PCl_n , $n = 1-6$, and their singly charged anions have been studied by an approx. d. functional theory. The vertical and adiabatic electron affinities of the neutrals, first ionization potentials of the anions and fragmentation energies of various decay channels of both series are evaluated. The neutral PCl_6 is found to be highly unstable towards dissocn. to $PCl_4 + PCl_2$ and the species PCl_5 , PCl_5^- , and PCl_6^- are near the stability threshold. According to the results of the calcns., all the neutrals considered possess the pos. adiabatic electron affinities. The PCl_n^- anions ($n = 1-4$) possess at least one excited state which is stable towards the loss of an extra electron and dissocn.

C.A. 1994, 120, N14

1996

F: P-Cl

P: 3

17B1282. Микроволновые спектры, неэмпирические расчеты и структура фторфосфана и хлорфосфана. Millimeter-wave spectra, ab initio calculations, and structures of fluorophosphane and chlorophosphane / Drean P., Paplewski M., Demaison J., Breidung J., Thiel W., Beckers H., Burger H. // Inorg. Chem. - 1996. - 35, 26. - С. 7671-7678. - Англ.

Место хранения ГПНТБ России

РМХ 1997

Кроуш Р

1998

Beillespie, R. J.; et al.,

(re, 4) Adv. Natl. Street.
Res. 1998, 4, 1-41.

(cell. Кроуш Be; III)

F: PCl_n

P: 3

131:248402 GAUSSIAN-2 calculations of the electron affinities of PCl_n and POCl_n. Miller, Thomas M.; Viggiano, A. A.; Morris, Robert A.; Stevens Miller, Amy E. Space Vehicles Directorate, Air Force Research Laboratory Hanscom Air Force Base, MA 01731-3010, USA J. Chem. Phys., 111(7), 3309-3310 (English) 1999

The results of GAUSSIAN-2 calcns. are presented for the total energies a zero-point energies of neutral and anionic PCl_n and POCl_n (n = 1-3), from adiabatic electron affinities (EA) are detd. for the ground-state neutral species. The calcns. show that EA(POCl₂) > EA(Cl), by 0.11 eV, and that EA(PCl₃) deduced from collisional ionization expts. is probably too low b eV.

1999