

PCl_4F



Р Cl₄ F
спектр

1964
9 Б120. Молекулярная структура PCl_4F , PCl_3F_2 , PCl_2F_3 и PF_5 : инфракрасные спектры и низкотемпературные спектры комбинационного рассеяния. Griffiths James E., Carter Richard P., Jr, Holmes Robert R. Molecular structures of PCl_4F , PCl_3F_2 , PCl_2F_3 , and PF_5 : infrared and low-temperature Raman vibrational spectra. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 3, 863—876 (англ.)

Исследованы в области $2000\text{—}250\text{ см}^{-1}$ при $t_{\text{ре}} 25^\circ$ спектры поглощения газообразных PCl_4F (I), PCl_3F_2 (II), PCl_2F_3 (III), PF_5 (IV) и спектры комб. расс. в области $50\text{—}1200\text{ см}^{-1}$ этих же в-в, находящихся в жидкой фазе при $t_{\text{рах}} -40$ (I—III) и -86° (IV). Дана полная интерпретация спектров. Рассмотрение числа и активности основных колебаний приводит к выводу, что молекулы всех в-в имеют тригон. бипирамидальное строение. В зависимости от взаимного расположения атомов F и Cl молекулы обладают симметрией C_{3v} (I) с атомом F, лежащем на оси симметрии, D_{3h} (II) с двумя атомами F на оси, C_{2v} (III) с одним атомом F на оси, D_{3h} (IV). Для II, IV и PCl_5 вычислены термодинамич. характеристики для $t_{\text{р}} 150\text{—}1000^\circ\text{ К}$. А. Станевич

х. 1965. 9



1964

Molecular structures of PCl_4F , PCl_3F_2 , PCl_2F_3 , and PF_5 : infrared and low-temperature Raman vibrational spectra. James E. Griffiths, Richard P. Carter, Jr., and Robert R. Holmes (Bell Telephone Lab., Inc., Murray Hill, N.J.). *J. Chem. Phys.* 41 (3), 863-76 (1964). Mol. structures of PCl_4F , PCl_3F_2 , PCl_2F_3 , and PF_5 are derived from vapor-state infrared spectra (2000-250 cm^{-1}) and low-temp. liquid-state Raman displacements ($\Delta\nu$ - 50-1200 cm^{-1}) together with qual. polarization measurements. All of the compds. appear to have a basic trigonal bipyramidal framework. The spectra of PCl_4F are best interpreted in terms of a C_{3v} structure in which the F atom occupies an axial site; in PCl_3F_2 (D_{3h} point group) the F atoms also assume axial positions. For PCl_2F_3 , the sym. D_{3h} structure is incorrect. Available evidence supports the C_{2v} structure in which the F atoms appear in 1 equatorial and 2 axial sites. PF_5 is found to have a regular trigonal bipyramidal structure. Complete vibrational assignments are made in terms of the normal modes, and thermodynamic functions are evaluated for PCl_4F , PCl_3F_2 , and PF_5 .

RCJQ

C. A. 1964

61 116

C5384



1964

PCl_4F

PCl_3F_2

PCl_2F_3

gpyuzp

3 *ms*

Pentacoordinated molecules. IV. Molecular structures of PCl_4F , PCl_3F_2 , and PCl_2F_3 : pure chlorine nuclear quadrupole resonance and low-temperature ^{19}F nuclear magnetic resonance spectra. Robert R. Holmes, Richard P. Carter, Jr., and George E. Peterson (Bell Telephone Labs., Inc., Murray Hill, N.J.). *Inorg. Chem.* 3(12), 1748-54(1964)(Eng); *CA* 61, 6538d. Cl nuclear quadrupole resonance spectra detd. at 77°K. and ^{19}F N.M.R. data obtained as a function of temp. for the mol. forms of PCl_4F , PCl_3F_2 , and PCl_2F_3 were correlated with previous ir and Raman spectra. The data support the trigonal bipyramid as the structural model for the halides with F atoms showing a preference for axial positions. The symmetry of PCl_4F is C_{3v} and that of PCl_3F_2 is D_{3h} . For PCl_2F_3 the data are best interpreted in terms of the C_{2v} point group. Further, the data give no evidence for any significant variation in mol. structure between the gas, liquid, and solid states. Symmetry considerations and the ^{19}F N.M.R. data support the presence of axial P-F π bonding. The Cl quadrupole data indicate a lesser importance of π bonding in the P-Cl bonds. RCHH

C.A. 1965. 62.3

2386 cc



1965

PCl₄F

3 Д112. Дипольный момент PCl₄F, определенный по нерезонансной микроволновой абсорбции паров. Margott A. A., Kryder S. J., Holmes R. R. Dipole moment of PCl₄ from the nonresonant microwave absorption of the vapor. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, № 7, 2556—2557 (англ.)

Для определения дипольного момента молекулы PCl₄F применен метод изучения диэлектрич. потерь. Измерения проводились на частоте 2314 Мгц при t-ре 25±2° С.

Найденная величина дипольного момента PCl₄F $\mu=0,21\pm0,01$ ед. Дебая. Определенная по этому же методу величина μ для молекулы CCl₃F равна 0,50 ед. Дебая, что удовлетворительно согласуется с литературными данными. Е. Прокопьев

ф. 1966. 2д



PCl₄F

1967

3 Д110. Потенциальное поле и колебания молекул имеющих тригональную бипирамидальную структуру AX₃YZ: пентакоординированные молекулы. X. Holmes Robert R. Potential field and molecular vibrations of the trigonal bipyramidal model AX₃YZ: pentacoordinated molecules. X. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 10, 3724—3729 (англ.)

силовые
коэф.

Выполнен анализ норм. колебаний тригональных бипирамидальных молекул типа AX₃YZ с симметрией C_{3v}. Построены координаты симметрии и протабулированы элементы матриц кинематических и силовых коэф. в этих координатах. При помощи литературных данных о частотах основных колебаний вычислены силовые коэф. наиболее общего силового поля молекул PCl₄F и CF₃PCl₄. Ч. IX см. РЖФиз, 1968, 2Д253. М. Р. Аллев

ф. 1968. 2Д

7

1967

36522u Pentacoordinated molecules. X. Potential field and molecular vibrations of the trigonal bipyramidal model AX_3YZ . Robert R. Holmes (Bell Telephone Labs., Inc., Murray Hill, N.J.). *J. Chem. Phys.* 46(10), 3724-9(1967)(Eng); cf. *CA* 67: 37844n. The secular equations with angular dependence are derived in terms of the FG matrix system representing the normal vibrations assocd. with the trigonal bipyramidal model of C_{3v} symmetry. A normal-coordinate analysis of PCl_4F and CF_3PCl_4 , both of C_{3v} symmetry, is given, based on recent ir and Raman data. The symmetry coordinates adequately represent the normal modes except for ν_4 , ν_6 , and ν_7 , where appreciable mixing is indicated. RCJQ

AX₃YZPCl₄FCF₃PCl₄

(Clad. 1967)



C.A. 1967. 67. 8

v, n. n., c. n. n. (PF_5 , AsF_5 , VF_5 , $PCl_3 F_2$, 1969
 PCl_5 , $Sb(CH_3)_5$, PH_5 , CH_3PF_4 , $PClF_4$, PCl_2F_3) - 137

Holmes R. R., Geiters R. M. VII 4604

J. Chem. Phys., 1969, 51, 49, 4043-4054 (ann.)

Anisotropic thermal motion of trigonal
bipyramidal molecules from spectroscopic data. Pentacoordinated molecules. XIII

Bull. Chem. Soc. Japan, 1970, 43, 11579

10

16

PClF_4 (und. noeg.) 13 XIII 1282 1969
Venkateswarlu K., Girijavallabhan C.P.
Z. Naturforsch. B 1969, 24(10), 1256-8
Molecular constants of PClF_4 .

5 10 6 angstrom
(ϕ)



CA 1970, 72, 56, 24965d

PCl_4F

XIII - 796 - ВР 1970

16 Б62. Молекулярные константы фосфоргалогенидных соединений. V. Ramaswamy K., Krishna Rao B. Molecular constants of phosphorus-halogen compounds. V. «Z. phys. Chem.» (DDR), 1970, 245, № 3—4, 268—271 (англ.)

Для молекул PCl_4F , PCl_4CF_3 , $PCl_3(CF_3)_2$ и PF_4Cl с целью изучения влияния различных заместителей на связи $P-Hal$ вычислены по эксперим. лит. значениям частот колебаний значения силовых коэф. и средне-квадратичных амплитуд колебаний ($298,16^\circ K$). Отмечено, что атомы F и группы CF_3 влияют на длины экваториальных и аксиальных связей $P-Cl$ и $P-F$ в ряду этих молекул, что находит свое отражение в ходе изменения соотв-щих силовых коэф. Сообщ. IV, см. РЖХим, 1970, 13Б87.

А. П. Александров

см. п.

(см. также PCl_4CF_3) III

X. 1971.

76

+2

X

PCl_4F
 PF_4Cl

BP-XIII-1471

1971

Cl_3NOCl

(53165n) Molecular constants of phosphorus-halogen compounds. V. Ramaswamy, K.; Rao, B. Krishna (Dep. Phys., Annamalai Univ., Annamalainagar, India). *Z. Phys. Chem. (Leipzig)* 1971, 246(5-6), 309-12 (Eng). The potential energy consts. and the mean amplitudes of vibration of PCl_4F , PCl_4CF_3 , $PCl_3(CF_3)_2$, and PF_4Cl were calcd. by the characteristic set of coordinates and the results are listed. The F and CF_3 groups have an influence on both the axial and equatorial bonds.

Friedrich Epstein

+1

P.A. 1971. 45. 8



PFly

Bruen C.

1872

empyrypa
nb. illex
pacre

Inorg. Min. Acta
1942, 6(1), 74-80

C.A. 1872. 76. 20

III C.A. PF₅

РСс₄F

XIII - 2509

1973

6 Д197. Молекулярные постоянные для PCl_4F .
Venkateswarlu K., Girijavallabhan C. P.
Molecular constants of PCl_4F . «Indian J. Pure and Appl.
Phys.», 1973, 11, № 6, 393—395 (англ.)

м.п.

сил. пог.

Для частот колебаний и структурных параметров
вычислены силовые постоянные общего валентного си-
лового поля, среднеквадратичные амплитуды колебаний
и постоянные Горнолисова взаимодействия для молеку-
лы PCl_4F . М. Р. Алиев

ф. 1974 № 6

PCl_4F

XIII-2509

1973

76017h / Molecular constants of phosphorus tetrachloride fluoride. Venkateswarlu, K.; Girijavallabhan, C. P. (Postgrad. Dep. Phys., P. S. G. Arts Coll., Coimbatore, India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1973, 11(6), 393-5 (Eng). General valence force consts., generalized mean square amplitudes, shrinkage effects and Coriolis coupling consts. for PCl_4F were evaluated. The P-F mean square amplitudes were found to be greater than the corresponding quantities for the P-Cl bond, and an explanation is offered for this. The calcd. Coriolis coupling consts. for the degenerate species are in accordance with the ξ -sum rule.

Chem. not.

M.N.

C.A. 1974. 80. N14

PClyF

Letter 12791a

1980

Ramasamy R., et. al
Indian J. Pure and Appl. Phys.,
1980, 18, 912 - 913

конси.
серия
раб. 12791а

PCl_4F

1987

107: 162206b Vibrational analysis of phosphorus fluorotetra=chloride molecule. Mohan, S.; Gunasekaran, S.; Ravikumar, K. G. (Div. Appl. Sci., Anna Univ., Madras, 600 044 India). *Orient. J. Chem.* 1987, 3(2), 149-53 (Eng). All the general quadratic valence force field potential consts. of PCl_4F mol. are evaluated afresh using kinetic consts. Using the present potential consts., the other mol. consts. such as vibrational mean amplitudes. Coriolis coupling consts., and centrifugal distortion consts. are calcd. The values of these mol. consts. are in the expected range. Furthermore, it is shown that the kinetic consts. method leads to acceptable sets of mol. consts.

Chem. no cm.

C.A. 1987, 107, ~ 18

1995

F: PCl_4F

P: 3

2Б1292. Молекулярная структура PCl_4F , PCl_3F_2 и PCl_2F_3 : спектры ядерного квадрупольного резонанса ядер хлора и низкотемпературные спектры ядерного магнитного резонанса $\{^{19}\text{F}\}$. Molecular structures of PCl_4F , PCl_3F_2 , and PCl_2F_3 : pure chlorine nuclear quadrupole resonance and low temperature $\text{F}\{^{19}\}$ nuclear magnetic resonance spectra {1,2} / Holmes Robert R., Carter Richard P. (Jr), Peterson George E. // Phosph., Sulfur and Silicon and Relat. Elem. - 1995. - 98, N 1 - 4. - С. 33-44. - Англ.

Исследованы ЯКР спектры Cl при 77К и ЯМР $\{^{19}\text{F}\}$ спектры молекулярных форм PCl_4F , PCl_3F_2 и PCl_2F_3 при различных т-рах и результаты сопоставлены с полученными ранее данными ИК и КР спектров. Сделан вывод, что системы обладают тригональной бипирамидальной структурой с предпочтительным аксиальным расположением атомов F. с обнаружено значительных различий структур в газовой, жидкой и твердой фазах. Обсуждена природа хим. связи.

Р. Ж. Х. N 2, 1996.