

H2 P02

1480-111

W. I. (H_2PO_2 , PO_3H)

1955

Duval C., Lecomte J.

C. r. Acad. Sci. 1955, 290, n° 1,

66-68 (*app. au*)

Spectres d'absorption infrarouges
de phosphites et d'hypophosphites
métalliques, leur interprétation

td n.°, 1955, 33839

$H_2PO_2^-$
D:

1 Raman and infrared spectra and normal-coordinate treatments of the hypophosphite and the dideuterohypophosphite ions. Joseph S. Ziomek, John R. Ferraro, and Donald F. Peppard (De Paul Univ., Chicago). *J. Mol. Spectroscopy* 8, 212-21(1962); cf. Tsuboi, *CA* 51, 12653f. Infrared measurements at $4000-400\text{ cm}^{-1}$ and Raman spectra of aq. solns. at room temp. of NaH_2PO_2 , KH_2PO_2 , $Ba(H_2PO_2)_2$, NaD_2PO_2 , KD_2PO_2 , and $Ba(D_2PO_2)_2$ were made and are discussed. Depolarization measurements were also made by the 2-exposure method. Spectral data are tabulated and a normal-coordinate treatment for $H_2PO_2^-$ and $D_2PO_2^-$ for established fundamental frequencies is carried out math. The data supported the C_{2v} symmetry of the model. Assignments of the observed bands were made and were consistent with the isotopic product rule. Robert A. Bleidt

C.A. 1962.57.2

1763 de

H_2PO_2^- Zioemek J. S., Ferraro J. R., 1962
 D_2PO_2^- Perppard D. F.,

J. Molec. Spectrosc., 1962, 8, 212-221.

Раман и и.к. спектры и ^{анализ} нормальных
координат вращательных и и деформационных
колебаний ионов.



Т и Г мафмиз

$$d(P-O)=1,51 \quad d(P-K)=1,50$$

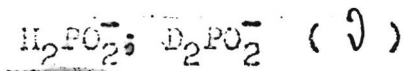
$$\angle KPK=92^\circ$$

$$\angle OPO=120^\circ$$

сдвигание зазора

III - 2217

1963



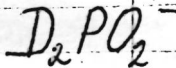
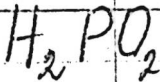
Zionek Joseph S., Ferraro John R.,
Reppard Donald F. Raman and infrared
spectra and normal coordinate treat-
ments of the hypophosphite and the
dideuterohypophosphite ions. "J. Molec.
Spectrosc.", 1962, 8, N 3, 212-221
(amm,)

PX., 1963, 1, B 145

10

*45 - 8923

1975



1) 18 Б187. Колебательные спектры гипофосфит-иона и его дейтеропроизводных. A ben o z a M., T a b a c i k V.
Vibrational spectra of hypophosphite ion and its deuterated species. «J. Mol. Struct.», 1975, 26, № 1, 95—106 (англ.)

Изучены ИК-спектры ($2500-400 \text{ см}^{-1}$) и спектры КР ионов H_2PO_2^- , HDP O_2^- и D_2PO_2^- в водн. р-рах. На основе изотопных сдвигов, поляризации линий КР, использования известных изотопн. соотношений для частот предложено отнесение спектров по симметрии и форме колебаний. В приближениях жесткого ротатора и гармонич. осциллятора проведен расчет термодинамич. функций S°_p , $(H^\circ - E^\circ)_0/T$ и S_p° в интервале т-р $-150+50^\circ$.
Б. В. Локшин

и.к. спектры

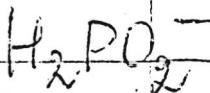


(+1)

Т.г.ср.

X 1975 IV 18

1975



$$\text{D}_2$$

$$\text{HD}$$

2 Б251. Квазиобобщенное гармоническое силовое поле и форма ангармоничности нормальных колебаний иона гипофосфита H_2PO_2^- . Tabacik V. Abenozza M. Quasigeneral harmonic force field and mode anharmonicity of the hypophosphite ion normal vibrations. «J. Mol. Struct.», 1975, 27, № 2, 369—381 (англ.)

Рассчитано квазиобобщенное гармонич. силовое поле иона H_2PO_2^- (симметрия C_{2v}) на основании отнесения колебаний трех его изотопозамещенных: H_2 , D_2 и HD . Были приняты след. ограничения: 1) ν_1 [$\nu(\text{PH}$ или PD) класса A_1] не зависит от других колебаний, т. е. $F_{12} = F_{13} = F_{14} = 0$ (разделение высоких и низких частот); 2) $F_{24} = 0$, т. е. отсутствует взаимодействие вал. кол. $\nu_s(\text{PO})$ с углами $\delta_s(\text{OPO})$ и $\delta_s(\text{HPH})$. В таком при-

x 1976 N2

ближении получено хорошее согласие вычисленных и эксперим. частот; средняя ошибка не превышает 0,5%. Рассчитано распределение потенциальной энергии по нормальным координатам, проекции нормальных форм и средние амплитуды колебаний. Амплитуды изменяются от 0,0363 Å (для форм, на которые влияет атом O), до 0,0883 Å (для форм, связанных с атомами H); для углов амплитуда изменения 5—6°. Полученные величины согласуются с данными по PH_3 , PH_2D , PHD_2 , OPF_3 , OPCl_3 и OPBr_3 . Колебания группы PO_2 не зависят от колебаний атомов H. Вычислены константы ангармоничности ω_i нормальных колебаний. Обсуждено соотношение между вал. частотами и вал. углами.

Е. Разумова

PH_2O_2

1983

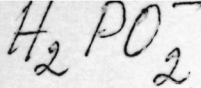
Работы

геометр.,
структ.

Муратбеков М. Б.,
Исмаилов М. У. и др.

Изв. АН Каз. Сер. Сер.
Хим., 1983, № 3-8.

($\text{Ca} \cdot \text{PO}_3^{2-}$; III)



1986

Muratbekov M. B.,
Izidorov G. M., et al.

списком,
Δ, H, Y,
интер.
расчет.

IZV. Akad. Nauk Kaz.
SSR, Ser. Khim. 1986;
(I), 72-8.
(ср. HPO_3H_2 ; III)

HPOOH

1987

198: 62835h Ground and excited state reactions of phosphono-
fluoridic acids and their isomers and esters. Theoretical
studies of novel silicon-containing compounds. Gordon, M. S.
Dep. Chem., North Dakota State Univ., Fargo, ND USA). Report
1987, AFOSR-TR-87-0204; Order No. AD-A177876/0/GAR, 30 pp.
(Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1987,
6(14), Abstr. No. 729,710. The fundamental nature of the P-O

bond was studied, and the effect of key substituents, such as F, Me,
and OH was established. The ground state potential energy surface
of the parent P mol. were established. The potential energy surfaces
of many of the low-lying excited states of the parent mol., within the
original C_{3v} symmetry, were investigated. Most of these dissociate to
phosphine and O. The vertical excited states of the mono-substituted
species were characterized, and the ground and excited states of the
corresponding free radicals were investigated. The nature of the acid
HPOOH, its dissociated anions, and the corresponding S analogs were
established.

meopem
paerem

C.A. 1988, 108, ~8

$H_2PO_2^-$ (2) [om. 27156] 1987

Streitwieser A., Jr., Rajca A.,
McDowell R. S., et al.,

kb. mex.
pacrem
M. N.,
 $\Delta_f H.$

J. Amer. Chem. Soc., 1987,
109, 14, 4184-4188.

H_2PO_2

1990

4 Б1051. Расчеты оксикислот фосфора с открытыми оболочками. I. Гомолиз связи P—H в H_2PO_2 . Computational studies of open-shell phosphorus oxyacids. 1. P—H bond homolysis in H_2PO_2 / Cramer Christopher J., Famini George R. // J. Amer. Chem. Soc.—1990.— 112, № 14.— С. 5460—5460.— Англ.

Неэмпирическим неограниченным методом ССП в базисах 3-21ГФ* и 6-31ГФ* с учетом корреляции электронов во 2-м порядке теории возмущений Меллера—Плессета (МП2) исследовано электронное строение гипотетич. дигидроксидифосфоранила, H_2PO_2 (I). Приведены равновесия геометрия, колебат. частоты, вращат. постоянные, дипольные и квадрупольные моменты, потенциальные кривые гомолитич. отщепления атома H, х-ки переходных состояний. Отмечена недостаточность МП2 и получены удовлетворит. результаты при использовании МП3. Энергия активации р-ции оценена в $4,8 \pm 0,3$ ккал/моль. Обсуждены причины метастабильности I. Отмечено, что базис 3-21ГФ* достаточен для адекватного описания реакции. С. П. Долин

М.П.

Х.1991, № 4