

Untersuchungen an Phosphoryl- und Thiophosphorylverbindungen III<sup>1</sup>

## Die Berechnung thermodynamischer Funktionen verschiedener Phosphoryl- und Thiophosphorylhalogenide

HANS-GEORG HORN und ACHIM MÜLLER

Anorganisch-Chemisches Institut der Universität Göttingen

(Z. Naturforschg. 21 a, 431—433 [1966]; eingegangen am 9. Oktober 1965)

Für  $\text{OPF}_2\text{Cl}$ ,  $\text{OPCl}_2\text{F}$ ,  $\text{OPF}_2\text{Br}$ ,  $\text{OPBr}_2\text{F}$ ,  $\text{OPCl}_2\text{Br}$ ,  $\text{OPBr}_2\text{Cl}$ ,  $\text{SPF}_2\text{Cl}$ ,  $\text{SPCl}_2\text{F}$ ,  $\text{SPF}_2\text{Br}$ ,  $\text{SPBr}_2\text{F}$ ,  $\text{SPCl}_2\text{Br}$  und  $\text{SPBr}_2\text{Cl}$  werden die Molwärme, die Entropie, die Enthalpie und die reduzierte freie Enthalpie im Temperaturbereich  $200 \text{ }^\circ\text{K} < T < 1000 \text{ }^\circ\text{K}$  für 12 verschiedene Temperaturen unter Zugrundelegung des Modells eines starren Rotators und harmonischen Oszillators berechnet.

NAGARAJAN<sup>2</sup> und VENKATESWARLU et al.<sup>3</sup> berichteten kürzlich über die Berechnungen thermodynamischer Funktionen von Phosphoryl- und Thiophosphorylhalogeniden des Typs  $\text{OPX}_3$  bzw.  $\text{SPX}_3$  mit  $C_{3v}$ -Symmetrie. Für Phosphoryl- und Thiophosphorylhalogenide des Typs  $\text{OPX}_2\text{Z}$  und  $\text{SPX}_2\text{Z}$  der Symmetrie  $C_s$  sind bisher keine Rechnungen durchgeführt worden. Das veranlaßte uns, im Rahmen unserer Untersuchungen an Phosphoryl- und Thiophosphorylverbindungen, die Molwärme  $C_p^0$ , Entropie  $S^0$ , die reduzierte Enthalpie  $(H^0 - H_0^0)/T$  und die reduzierte freie Enthalpie  $(G^0 - H_0^0)/T$  für den idealen Gaszustand zu berechnen.

Den Rechnungen wurde das Modell des starren Rotators und harmonischen Oszillators zugrunde gelegt. Die Frequenzen der Normalschwingungen

sind Arbeiten von DELWAULLE und FRANCOIS<sup>4</sup> entnommen. Die bei DELWAULLE und FRANCOIS als zufällig zweifach entartet angegebenen Schwingungsfrequenzen wurden bei der Berechnung der Oszillationsanteile mit einem Gewichtsfaktor 2 versehen.

Zur Berechnung des Produktes der Hauptträgheitsmomente  $I_A \cdot I_B \cdot I_C$  mit Hilfe der Formel von HIRSCHFELDER<sup>5</sup> wurden für  $\text{SPF}_2\text{Br}$ ,  $\text{SPBr}_2\text{F}$ ,  $\text{OPF}_2\text{Cl}$ ,  $\text{OPCl}_2\text{F}$  die in der Literatur<sup>6, 7</sup> angegebenen Abstände benutzt, für die übrigen Verbindungen die in Tab. 1 angegebenen geschätzten Werte. Dieses erscheint berechtigt, da einerseits die PX-Bindungsabstände ( $X = \text{O}, \text{S}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ ) bei bisher untersuchten Verbindungen nur geringfügig schwanken und zum anderen eine Unsicherheit in den Trägheitsmomenten nur mit geringfügigem Fehler in die

|   | $d_{\text{PO}}$ | $d_{\text{PS}}$ | $d_{\text{PF}}$ | $d_{\text{PCl}}$ | $d_{\text{PBr}}$ | $MG$   |
|---|-----------------|-----------------|-----------------|------------------|------------------|--------|
| $\text{OPF}_2\text{Cl}$ <sup>6, 7</sup> | 1,55            | —               | 1,51            | 2,01             | —                | 120,42 |
| $\text{OPCl}_2\text{F}$ <sup>6, 7</sup> | 1,54            | —               | 1,50            | 1,99             | —                | 136,88 |
| $\text{OPF}_2\text{Br}$                 | 1,55            | —               | 1,50            | —                | 2,10             | 164,88 |
| $\text{OPBr}_2\text{F}$                 | 1,55            | —               | 1,50            | —                | 2,10             | 225,79 |
| $\text{OPCl}_2\text{Br}$                | 1,55            | —               | —               | 2,00             | 2,10             | 197,79 |
| $\text{OPBr}_2\text{Cl}$                | 1,55            | —               | —               | 2,00             | 2,10             | 242,24 |
| $\text{SPF}_2\text{Cl}$                 | —               | 1,87            | 1,45            | 2,01             | —                | 136,49 |
| $\text{SPCl}_2\text{F}$                 | —               | 1,87            | 1,50            | 2,01             | —                | 152,94 |
| $\text{SPF}_2\text{Br}$ <sup>6, 7</sup> | —               | 1,87            | 1,45            | —                | 2,14             | 180,94 |
| $\text{SPBr}_2\text{F}$ <sup>6, 7</sup> | —               | 1,87            | 1,50            | —                | 2,18             | 241,85 |
| $\text{SPCl}_2\text{Br}$                | —               | 1,87            | —               | 2,01             | 2,16             | 213,85 |
| $\text{SPBr}_2\text{Cl}$                | —               | 1,87            | —               | 2,01             | 2,16             | 258,31 |

Tab. 1. Die der Berechnung des Produktes der Hauptträgheitsmomente zugrunde gelegten Bindungsabstände in Å und Molekulargewichte.

<sup>1</sup> II. Mitt.: A. MÜLLER, H.-G. HORN u. O. GLEMSER, Z. Naturforschg. 20 b, 1150 [1965].

<sup>2</sup> G. NAGARAJAN, J. Sci. Ind. Res. 21 B, 356 [1962].

<sup>3</sup> K. VENKATESWARLU u. R. THANALAKSHMI, Acta Phys. Polon. 22, 425 [1962].

<sup>4</sup> M. L. DELWAULLE u. F. FRANCOIS, J. Chim. Phys. 46, 87 [1949].

<sup>5</sup> J. O. HIRSCHFELDER, J. Chem. Phys. 8, 431 [1940].

<sup>6</sup> L. E. SUTTON, Tables of Interatomic Distances and Configurations in Molecules and Ions, The Chemical Society, London 1958.

<sup>7</sup> J. R. VAN WAZER, Phosphorus and its Compounds, Interscience Publ., New York 1958, Vol. 1, S. 222.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

| $T$<br>(°K)         | $C_p^0$ | $H^0 - H_0^0$ |        | $G^0 - H_0^0$ |        | $S^0$                | $C_p^0$ | $H^0 - H_0^0$ |        | $G^0 - H_0^0$ |        | $S^0$                | $C_p^0$ | $H^0 - H_0^0$ |        | $G^0 - H_0^0$ |         | $S^0$  |        |        |         |        |        |        |         |
|---------------------|---------|---------------|--------|---------------|--------|----------------------|---------|---------------|--------|---------------|--------|----------------------|---------|---------------|--------|---------------|---------|--------|--------|--------|---------|--------|--------|--------|---------|
| OPF <sub>2</sub> Cl |         |               |        |               |        | OPCl <sub>2</sub> F  |         |               |        |               |        | OPF <sub>2</sub> Br  |         |               |        |               |         |        |        |        |         |        |        |        |         |
| 200                 | 14,514  | 10,286        | 56,940 | 67,225        | 15,847 | 11,032               | 58,714  | 69,746        | 15,231 | 10,770        | 59,232 | 70,001               | 250     | 16,314        | 11,313 | 59,342        | 70,655  | 17,624 | 12,181 | 61,190 | 73,371  | 16,929 | 11,833 | 61,743 | 73,576  |
| 250                 | 16,314  | 11,313        | 59,342 | 70,655        | 17,624 | 12,181               | 61,190  | 73,371        | 16,929 | 11,833        | 61,743 | 73,576               | 298,16  | 17,747        | 12,245 | 61,424        | 73,669  | 18,967 | 13,176 | 63,457 | 76,633  | 18,254 | 12,778 | 63,927 | 76,705  |
| 300                 | 17,790  | 12,270        | 61,515 | 73,785        | 19,004 | 13,213               | 63,523  | 76,756        | 18,299 | 12,803        | 63,990 | 76,793               | 350     | 18,984        | 13,146 | 63,449        | 76,595  | 20,089 | 14,115 | 65,645 | 79,760  | 19,612 | 13,670 | 66,033 | 79,703  |
| 400                 | 19,970  | 13,937        | 65,252 | 79,190        | 20,945 | 14,719               | 67,589  | 82,506        | 20,351 | 14,454        | 67,908 | 82,362               | 500     | 21,460        | 15,305 | 68,522        | 83,827  | 22,226 | 16,260 | 71,052 | 87,312  | 21,728 | 15,785 | 71,307 | 87,092  |
| 600                 | 22,489  | 16,419        | 71,407 | 87,827        | 23,084 | 17,327               | 74,112  | 91,439        | 22,679 | 16,838        | 74,433 | 91,073               | 700     | 23,219        | 17,356 | 74,051        | 91,408  | 23,686 | 18,203 | 76,868 | 95,072  | 23,364 | 17,731 | 76,904 | 94,635  |
| 800                 | 23,744  | 18,126        | 76,420 | 94,546        | 24,121 | 18,922               | 79,365  | 98,287        | 23,852 | 18,467        | 79,341 | 97,808               | 900     | 24,121        | 18,750 | 78,528        | 97,278  | 24,434 | 19,588 | 81,518 | 101,106 | 24,216 | 19,075 | 81,501 | 100,577 |
| 1000                | 24,420  | 19,323        | 80,609 | 99,932        | 24,677 | 20,010               | 83,618  | 103,628       | 24,495 | 19,613        | 83,568 | 103,181              |         |               |        |               |         |        |        |        |         |        |        |        |         |
| OPBr <sub>2</sub> F |         |               |        |               |        | OPCl <sub>2</sub> Br |         |               |        |               |        | OPBr <sub>2</sub> Cl |         |               |        |               |         |        |        |        |         |        |        |        |         |
| 200                 | 17,262  | 12,147        | 62,856 | 75,004        | 17,871 | 12,416               | 62,247  | 74,661        | 18,560 | 13,019        | 64,479 | 77,498               | 250     | 18,796        | 13,325 | 65,690        | 79,015  | 19,472 | 13,676 | 65,159 | 78,834  | 20,044 | 14,281 | 67,540 | 81,821  |
| 298,16              | 19,916  | 14,297        | 68,114 | 82,411        | 20,598 | 14,706               | 67,657  | 82,364        | 21,066 | 15,302        | 70,133 | 85,435               | 300     | 19,970        | 14,365 | 68,206        | 82,571  | 20,637 | 14,749 | 67,761 | 82,511  | 21,096 | 15,342 | 70,247 | 85,589  |
| 350                 | 20,874  | 15,207        | 70,491 | 85,698        | 21,510 | 15,659               | 70,106  | 85,764        | 21,883 | 16,221        | 72,671 | 88,892               | 400     | 21,599        | 15,959 | 72,572        | 88,532  | 22,179 | 16,416 | 72,222 | 88,638  | 22,487 | 16,961 | 74,874 | 91,834  |
| 500                 | 22,691  | 17,201        | 76,248 | 93,449        | 23,150 | 17,685               | 76,064  | 93,749        | 23,380 | 18,180        | 78,838 | 97,019               | 600     | 23,438        | 18,191 | 79,509        | 97,699  | 23,796 | 18,650 | 79,357 | 98,007  | 23,958 | 19,085 | 82,198 | 101,283 |
| 700                 | 23,953  | 18,967        | 82,329 | 101,297       | 24,244 | 19,419               | 82,296  | 101,715       | 24,371 | 19,817        | 85,198 | 105,015              | 800     | 24,334        | 19,625 | 84,939        | 104,563 | 24,563 | 20,038 | 84,903 | 104,941 | 24,667 | 20,415 | 87,935 | 108,349 |
| 900                 | 24,609  | 20,164        | 87,700 | 107,466       | 24,801 | 20,560               | 87,310  | 107,868       | 24,878 | 20,884        | 90,285 | 111,169              | 1000    | 24,820        | 20,622 | 89,454        | 110,076 | 24,979 | 20,997 | 89,511 | 110,508 | 25,397 | 21,847 | 93,227 | 115,074 |
| SPF <sub>2</sub> Cl |         |               |        |               |        | SPCl <sub>2</sub> F  |         |               |        |               |        | SPF <sub>2</sub> Br  |         |               |        |               |         |        |        |        |         |        |        |        |         |
| 200                 | 15,839  | 11,060        | 58,553 | 69,613        | 17,193 | 11,742               | 60,457  | 72,199        | 16,528 | 11,585        | 60,822 | 72,407               | 250     | 17,666        | 12,201 | 61,142        | 73,344  | 18,988 | 13,135 | 63,116 | 76,251  | 18,243 | 12,748 | 63,533 | 76,281  |
| 298,16              | 19,071  | 13,197        | 63,379 | 76,576        | 20,303 | 14,193               | 65,525  | 79,718        | 19,569 | 13,747        | 65,866 | 79,614               | 300     | 19,135        | 13,239 | 63,458        | 76,697  | 20,355 | 14,224 | 65,594 | 79,818  | 19,629 | 13,796 | 65,968 | 79,764  |
| 350                 | 20,292  | 14,164        | 65,568 | 79,732        | 21,387 | 15,186               | 67,687  | 83,072        | 20,702 | 14,697        | 68,137 | 82,834               | 400     | 21,216        | 14,994 | 67,523        | 82,517  | 22,181 | 16,016 | 69,979 | 85,996  | 21,552 | 15,497 | 70,144 | 85,641  |
| 500                 | 22,530  | 16,366        | 71,019 | 87,385        | 23,272 | 17,359               | 73,667  | 91,025        | 22,776 | 16,849        | 73,783 | 90,632               | 600     | 23,387        | 17,490 | 74,132        | 91,622  | 23,952 | 18,404 | 76,953 | 95,357  | 23,570 | 17,908 | 76,945 | 94,854  |
| 700                 | 23,953  | 18,361        | 76,861 | 95,221        | 24,410 | 19,238               | 79,838  | 99,076        | 24,104 | 18,762        | 79,782 | 98,543               | 800     | 24,359        | 19,101 | 79,408        | 98,509  | 24,712 | 19,891 | 82,428 | 102,319 | 24,470 | 19,458 | 82,364 | 101,822 |
| 900                 | 24,639  | 19,691        | 81,668 | 101,359       | 24,934 | 20,442               | 84,806  | 105,248       | 24,734 | 20,037        | 84,726 | 104,762              | 1000    | 24,852        | 20,191 | 83,746        | 103,938 | 25,099 | 20,900 | 86,964 | 107,864 | 24,939 | 20,513 | 86,814 | 107,327 |
| SPBr <sub>2</sub> F |         |               |        |               |        | SPCl <sub>2</sub> Br |         |               |        |               |        | SPBr <sub>2</sub> Cl |         |               |        |               |         |        |        |        |         |        |        |        |         |
| 200                 | 18,556  | 13,057        | 64,563 | 77,620        | 18,979 | 13,398               | 64,123  | 77,521        | 19,924 | 14,084        | 66,144 | 80,229               | 250     | 20,105        | 14,328 | 67,629        | 81,956  | 20,796 | 14,733 | 67,268 | 82,001  | 21,369 | 15,406 | 69,164 | 84,570  |
| 298,16              | 21,205  | 15,348        | 70,241 | 85,589        | 21,896 | 15,811               | 69,968  | 85,779        | 22,355 | 16,451        | 72,236 | 88,687               | 300     | 21,257        | 15,386 | 70,326        | 85,712  | 21,933 | 15,845 | 70,047 | 85,892  | 22,386 | 16,495 | 72,354 | 88,849  |
| 350                 | 22,117  | 16,288        | 72,767 | 89,055        | 22,738 | 16,756               | 72,527  | 89,282        | 23,115 | 17,388        | 74,948 | 92,336               | 400     | 22,779        | 17,058 | 74,997        | 92,056  | 23,359 | 17,552 | 74,841 | 92,393  | 23,644 | 18,133 | 77,324 | 95,457  |
| 500                 | 23,687  | 18,310        | 78,963 | 97,273        | 24,130 | 18,803               | 78,930  | 97,733        | 24,342 | 19,316        | 81,510 | 100,827              | 600     | 24,262        | 19,247 | 82,365        | 101,613 | 24,607 | 19,736 | 82,443 | 102,179 | 24,756 | 20,181 | 85,077 | 105,258 |
| 700                 | 24,641  | 19,996        | 85,378 | 105,374       | 24,912 | 20,459               | 85,544  | 106,003       | 24,990 | 20,871        | 88,293 | 109,164              | 800     | 24,897        | 20,592 | 88,114        | 108,705 | 25,115 | 21,024 | 88,313 | 109,337 | 25,208 | 21,404 | 91,135 | 112,539 |
| 900                 | 25,082  | 21,073        | 90,489 | 111,562       | 25,258 | 21,478               | 90,767  | 112,244       | 25,331 | 21,829        | 93,682 | 115,510              | 1000    | 25,219        | 21,492 | 92,771        | 114,263 | 25,362 | 21,850 | 92,979 | 114,829 | 25,425 | 22,188 | 96,024 | 118,215 |

Tab. 2. Thermodynamische Funktionen (in cal·grad<sup>-1</sup>·mol<sup>-1</sup>) für den idealen Gaszustand bei 1 Atmosphäre.

Die dritte Stelle nach dem Komma ist als nicht signifikant zu bezeichnen.

thermodynamischen Funktionen eingeht.  $[C_p^0]$  und  $(H^0 - H_0^0)/T$  sind hier unabhängig von den Trägheitsmomenten.]

Für alle Verbindungen wurden Tetraederwinkel angenommen. Die Berechnung von  $C_p^0$ ,  $(H^0 - H_0^0)/T$ ,  $S^0$  und  $(G^0 - H_0^0)/T$  erfolgte mit den bei PITZER<sup>8</sup>

angegebenen Formeln für 1 Atm. Die Symmetrienzahl ist 1. Die zahlenmäßigen Ergebnisse für die verschiedenen Verbindungen gehen aus den Tab. 2 hervor.

Herrn Prof. Dr. O. GLEMSER danken wir sehr für die Unterstützung und Förderung dieser Arbeit.

<sup>8</sup> K. S. PITZER, Quantum Chemistry, Prentice Hall Inc., New York 1954.

## Faktorgruppenanalyse der optischen Schwingungen von KReO<sub>4</sub> im Raman-Effekt und im Infrarotspektrum<sup>1, 2</sup>

ACHIM MÜLLER

Anorganisch-Chemisches Institut der Universität Göttingen

(Z. Naturforsch. 21 a, 433—436 [1966]; eingegangen am 9. Oktober 1965)

Es werden die Faktorgruppen-Grundschwingungen von KReO<sub>4</sub> im RAMAN-Effekt und im Infrarotspektrum diskutiert. Frühere Zuordnungen der inneren Schwingungen werden berichtigt und ergänzt. Weiterhin wird eine Erklärung für unterschiedliche Frequenzen, die im Rahmen einer Site-Gruppen-Behandlung gleichen Schwingungen entsprechen, im IR- und RAMAN-Spektrum gegeben. Im Infrarotspektrum von KReO<sub>4</sub> ( $4000 \text{ cm}^{-1} > \nu > 33 \text{ cm}^{-1}$ ) werden alle 8 IR-aktiven Phononen ungerader Parität beobachtet.

Das RAMAN-Spektrum des tetraedrischen ReO<sub>4</sub><sup>-</sup>-Ions in Lösung ist bekannt<sup>3, 4</sup> und die Grundschatzungen sind nach den irreduziblen Darstellungen der Punktgruppe T<sub>d</sub> richtig zugeordnet. Das Spektrum weist nur 3 Linien auf, da  $\nu_2$  (E) fast mit  $\nu_4$  (F<sub>2</sub>) zusammenfällt und wegen zu geringer Intensität nicht zu ermitteln ist. Das Festkörperspektrum (IR- und RAMAN-) von KReO<sub>4</sub> (Raumgruppe<sup>5</sup>: C<sub>4h</sub><sup>6</sup> Site-Symmetrie des ReO<sub>4</sub><sup>-</sup>-Ions: S<sub>4</sub>) im Bereich der inneren Schwingungen ist dagegen schwierig zuzuordnen. Eine vollständige Zuordnung der gemessenen RAMAN-Frequenzen konnte bisher nicht durchgeführt werden<sup>6</sup>.

### Die inneren Schwingungen des ReO<sub>4</sub><sup>-</sup>-Ions im KReO<sub>4</sub>

Zuerst hat FONTEYN<sup>7</sup> RAMAN-Messungen im Bereich der inneren Schwingungen von KReO<sub>4</sub> durchgeführt und die Linien nach der Punktgruppe T<sub>d</sub> zugeordnet (Tab. 1).

DUVAL und LECOMTE<sup>8</sup> haben das IR-Spektrum von KReO<sub>4</sub> im Bereich der δ(OReO)-Schwingungen untersucht. Die Autoren geben nur eine Bande bei  $364 \text{ cm}^{-1}$  an, die sie  $\nu_4$  (F<sub>2</sub>) zuordnen. BUSEY und KELLER<sup>6</sup> haben das RAMAN-Spektrum von KReO<sub>4</sub> gemessen und geben eine teilweise Zuordnung der

<sup>1</sup> XIII. Mitteilung der Reihe: Schwingungsspektroskopische Untersuchungen anorganischer Festkörper. — XII. Mitt.: A. MÜLLER u. B. KREBS, Z. Anorg. Allg. Chem., im Druck. — XI. Mitt.: A. FADINI, A. MÜLLER u. B. KREBS, Z. Naturforschg. 20 a, 1241 [1965].

<sup>2</sup> V. Mitteilung der Reihe: Untersuchungen an Rhenium-Sauerstoffverbindungen. — I. Mitt.: O. GLEMSER, A. MÜLLER u. U. STÖCKER, Z. Anorg. Allg. Chem. 333, 25 [1964]. — II. Mitt.: O. GLEMSER, A. MÜLLER u. H. SCHWARZKOPF, Z. Anorg. Allg. Chem. 334, 21 [1964]. — III. Mitt.: A. MÜLLER, B. KREBS u. O. GLEMSER, Naturwiss. 52, 55 [1965]. — IV. Mitt.: A. MÜLLER, Z. Naturforschg. 20 a, 745 [1965].

<sup>3</sup> H. H. CLAASSEN u. A. J. ZIELEN, J. Chem. Phys. 22, 707 [1954].

<sup>4</sup> L. A. WOODWARD u. H. L. ROBERTS, Trans. Faraday Soc. 52, 615 [1956].

<sup>5</sup> J. BEINTEMA, Z. Krist. (A) 97, 300 [1937].

<sup>6</sup> R. H. BUSEY u. O. L. KELLER, J. Chem. Phys. 41, 215 [1964].

<sup>7</sup> R. FONTEYN, Natuurw. Tijdschr. Ghent 20, 20, 112, 275 [1938]; 21, 6, 141 [1939]. — In diesen Arbeiten sind ebenfalls RAMAN-Messungen an NaReO<sub>4</sub> und wässriger Perheniumsäure durchgeführt worden. Literaturstellen und Frequenzen bei K. W. F. KOHLRAUSCH, Raman-Spektren, Leipzig 1943.

<sup>8</sup> C. DUVAL u. J. LECOMTE, C. R. Acad. Sci. Paris 239, 249 [1954]. — J. LECOMTE, Spectroscopie dans l'infrarouge im Handbuch der Physik, Bd. 26, p. 825, Verlag Springer, Berlin 1958.