

B-N-H

V 5771

1938

~~III~~

$B_3N_3H_6$  (r),  $(CH_3)_2NH$  (r),  $B_2NH_7$  (r,

Bauer S.H.

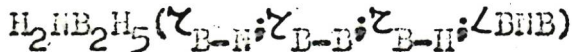
J. Am. Chem. Soc., 1938, 60, 524-30

J

$B_2NH_7$

V 4976

1952



Hedberg K., Stosick A.J.

J. Am. Chem. Soc., 1952, 74, 954-8

An electron-diffraction investigation of the structure of the aminodiboranes  $(\text{CH}_3)_2\text{NB}_2\text{H}_5$  and  $\text{H}_2\text{NB}_2\text{H}_5$ .

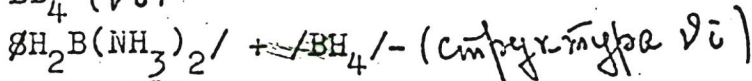
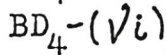
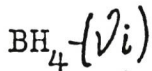
CA., 1952, 5379e

J



$\text{B}_2\text{NH}_3$

1958



Taylor R.C., Schultz D.R., Emery A.R.

J. Amer. Chem. Soc., 1958, 80, N 1, 27-30

Raman spectrascopy in liquid ammonia solutions.

The spectrum of the borohydride ion and evidence for the constitution of the diammoniate of a diborane.

PJX., 1958, 49330



V 4995

1960

Vi ( $B_3N_3H_3D_3$ ,  $B_3N_3Cl_3D_3$ )

Watanabe H., Totani T., Nakagawa T., Kubo M.  
Spectrochim. acta, 1960, 16, N 9, 1076-82

Инфракрасные спектры поглощения тридейтероборадоля и В — трихлор-Н- тридейтероборадоля,

РЖХ., 1961, 17Б107  
J

$N_2H_4 \cdot BH_3$

Goubeau F.  
Richer E.

1961.

и.к.сильн.

1-4907-668

"F. Anorg. Allg. Chem."  
1961, 310, 123-142.

1964.

$\text{B}(\text{NH}_3)_3$

$\text{B}(\text{NH}_2)_3$

Koffmann R.

J. Chem. Phys., 1964, 40, 2474 (N:9).

Различные теория Хискема. III.

Барьеры

Соединения бора и азота.

внутр.

Расчеты энергии двойного меча

барьеры

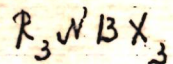
соединения бора и азота ( $\text{B}(\text{NH}_3)_3$ ,  $\text{B}(\text{NH}_2)_3$ ,  $\text{B}_3\text{N}_3\text{H}_6$  и др.), а также барьеры внутр. барьеры барьеры

$\text{B}(\text{NH}_3)_3 \sim 1.5$  ккал/моль и асимметри-

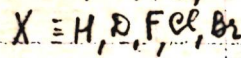
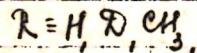
ция  $\text{B}(\text{NH}_3)_3 \sim 10$  ккал/моль

(Сил.  $\text{B}(\text{NH}_3)_3$ ) III

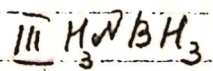
11964



Robert C. Taylor  
Advan. Chem. Ser. 42, 59



Vibrational frequencies  
assignments and force constant  
for some compounds containing  
boron-nitrogen dative bonds.



Аминоборо-  
раны

4 Д170. Заторможенное вращение в аминоборанах  
Dawson John W., Niedenzu Kurt. Hindered  
rotation in aminoboranes. «Army Sci. Conf. Proc., 1964.  
Vol. 1.» Washington, D. C., Dept Army, 1965, 251—260  
(англ.)

Обобщены эксперим. данные по ИК- и комбинацион-  
ным спектрам и спектрам ЯМР различных аминобора-  
нов, содержащих группировку  $\text{>N-B<}$ . Путем прибли-  
женного расчета с помощью правила Горди проведено  
отнесение полосы вал. кол. N=B-связи в ряду аминобо-  
ранов. Отмечено, что весьма заметные вариации частоты  
вал. кол. N=B-связи с различными функциональны-  
ми заместителями свидетельствуют об участии неподе-  
ленной пары электронов азота при образовании связи  
N=B. Данные свидетельствуют также о заторможенном  
вращении вокруг двойной связи N=B и о наличии  
цис-, транс-изомеров некоторых аминоборанов.

М. Алнев

ф. 1967. 42

1965

1966

33171x Electronic structure (L.C.A.O method) of polymethyl derivatives of borazine. Jean Francois Labarre, Marcel Graffeuil, and Maurice Pâdeloup (Dept. Chim. Inorg., Toulouse, France). *J. Chim. Phys.* 63(9), 1236-41(1966)(Fr). An uv-consistent L.C.A.O. calcn. of the electronic structure of borazine and five polymethylborazines is carried out. The perturbed B and N Coulomb integrals are chosen in order to estimate correctly the first uv vertical transition ( $^1A_{1g} \rightarrow ^1A'_2$ ). The  $\pi$  character of the BN bond is important, but the actual ( $\sigma + \pi$ ) charge transfer along this bond is small, the N atom obtaining a neg. charge in spite of the L.C.A.O. calcn. results. From this point of view, borazine seems very similar to benzene, and the exptl. observed magnetic rotation excess is in agreement with a conjugated borazinic structure. Moreover, the effective charge caused by an unsubstituted B atom is remarkably const., no matter what compd. is investigated. This correlates perhaps with the invariance of  $\nu$  (B-H) in ir spectroscopy.

Bernard Rubin

C.A. 1967.66.8

V 5975

1967

$B_3 N_3 O_3 H_3$ ,  $B_3 N_3 H_6$ ,  $B_3 N_3 O_3$  (Di, enol. mer.)

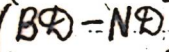
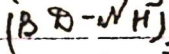
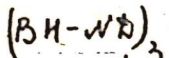
Kartha V. B., Krishnamachari S. L. N. G.,  
Subramaniam C. R.,

J. Molec. Spectrosc., 1967, 23, 149-  
157

PMK, 1968, 115176

10

1967

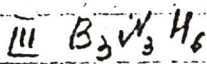


Viedensy Kurt и др.

Inorgan. Chem. 6, 8, 1453

Колебательный спектр  
боразина

ВФ-5865-V





$H_3B_3N_3D_3$

Silverman E.

1967

Spectrochim acta A23, N7, 2021

Углебамы производных  
боразола. I. Плоские углебамы  
боразина и N-трифтороборазина.

III  $H_3B_3N_3H_3$

$\text{BH}_2\text{-NH-NH-BH}_2$

V-6329

1968

$\text{B}_2\text{N}_2\text{H}_6$

ИК-спектр

6 Д334. Анализ ИК-спектра гидразиндиборана. Belinski Colette, Duterque Jean, L'alau Keraly François-Xavier. Analyse du spectre infrarouge de l'hydrazine diborène. «C. r. Acad. sci.», 1968, 267, № 20, B1087—B1089 (франц.)

Получен ИК-спектр ( $4000\text{--}300\text{ см}^{-1}$ ) гидразиндиборана. Отмечена полярность связи N—H (большая интенсивность  $\nu(\text{NH}) = 3210\text{ см}^{-1}$ ). Значения частот вал. кол.  $\nu(\text{BH})$  ( $2470$  и  $2450\text{ см}^{-1}$ ) позволили высказать предположение о преобладании групп  $\rightarrow\text{BH}_2$  и сделать вывод о мономерном характере соединения. Дана интерпретация наблюдаемых полос. Библи. 11.

А. Белозеров

9.1969. 69

$BH_2NHNH BH_2$

V-6329

1968

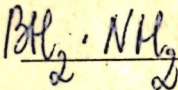
42481h Infrared spectrum of 1,2-diborylhydrazine. Belinski, Colette, Duterque, Jean; Lalau-Keraly, Francois X. (Office Nat. Etudes Rech. Aerosp., Chatillon-sous-Bagneux, Fr.). C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. A,B 1968, 267B (20), 1087-9 (Fr). The ir spectrum (600-3800  $cm^{-1}$ ) of  $BH_2NHNH BH_2$ , formed on heating hydrazine monoborane under vacuum in boiling  $C_6H_6$  (J. Goubeau and E. Ricker, 1961) suggests that the compd. is monomeric and has an inorg. butadiene-type structure.

FBJF

В.К. мек.р  
структура

C.A. 1969. 70.10

1969

D<sub>0</sub>V<sub>0</sub>

(128947x) Electronic structure of aminoborane: a comparison between nonempirical and semi-empirical theoretical methods. Armstrong, David Reed; Duke, B. J.; Perkins, Peter G. (Univ. Newcastle-upon-Tyne, Newcastle-upon-Tyne, Engl.). *J. Chem. Soc. A* 1969, (17), 2566-72 (Eng). The electronic structure of aminoborane,  $\text{BH}_2\text{NH}_2$ , has been calcd. ab initio by use of extended basis sets of Gaussian-type orbitals. The binding energy (corrected for correlation) is 550 kcal./mole, and the energy of rotation about the B-N bond is kcal./mole. The B-N bond is polar in the sense  $\text{B}^+-\text{N}^-$ , and the calcd. dipole moment of the mol. is 2.071 D. The highest bonding orbital is of  $\sigma$ -type with an energy of -12.0 ev. Extended Hückel calcs. on the same compd. give orbital energies which agree fairly well with those above, while the charge distribution can be reproduced by the CNDO [complete neglect of differential overlap] method. However, neither of the semi-empirical techniques yield good overall agreement with the ab initio calcs.

RCGF

C.A. 1969: 71. 26

1969

 $\text{H}_2\text{B} \cdot \text{NH}_2$ Электр.  
Строение

11 Б44. Электронное строение аминоборана: сравнение между неэмпирическими и полуэмпирическими теоретическими методами. Armstrong D. R., Duke B. J., Perkins P. G. Electronic structure of aminoborane: a comparison between nonempirical and semiempirical theoretical methods. «J. Chem. Soc.», 1969, A, № 17, 2566—2572 (англ.)

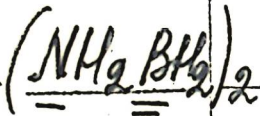
Проведено сравнительное изучение электронного строения аминоборана  $\text{H}_2\text{B} \cdot \text{NH}_2$  в рамках неэмпирического и полуэмпирических методов. Неэмпирический расчет МО ЛКАО СССР (использованы наборы из 26, 40 и 48 гауссовых функций и учтены корреляционные поправки) приводит к выводу о значительной кратности

X. 1970. 11

связи В—N (барьер вращения около 41 ккал/моль) и ее полярности  $\overset{+}{\text{B}}-\overset{-}{\text{N}}$  (в основном за счет атомов Н), противоречащей обычным классическим представлениям о полярности  $\overset{-}{\text{B}}-\overset{+}{\text{N}}$ . Верхняя занятая МО (энергия около —12,0 эв) имеет  $\sigma$ -симметрию, что требует пересмотра выводов, полученных в  $\pi$ -электронном приближении. Полуэмпирические расчеты (несколько вариантов расширенного метода Хюккеля и метода ССП—МО в приближении полного пренебрежения дифференциальным перекрыванием) хотя и передают отдельные черты строения аминоборана, однако в целом не дают хорошего согласия с результатами неэмпирического расчета.

Е. М. Шусторович

1970

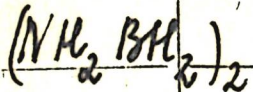


(134084w) Electronic structure of dimeric aminoborane,  $(\text{NH}_2\text{BH}_2)_2$ . Armstrong, David Reed; Perkins, Peter G. (Dep. Pure Appl. Chem., Univ. Strathclyde, Glasgow, Scot.). *J. Chem. Soc. A* 1970, (16), 2748-50 (Eng). The electronic structure of dimeric aminoborane has been calcd. ab initio by use of Gaussian orbital basis sets. Min. total energy was achieved by variation of the B-N distance (optimum 1.63 Å) and the B-N-B angle (optimum 86°). The energy of the dimer exceeds that of 2 mols. of the monomer by about 3 kcal mole<sup>-1</sup>, and the implications of this are discussed. The shape of the ring probably results from antibonding interactions between the 2 N atoms. The charge distribution is highly sym., the B and N atoms being pos. and neg. charged, resp. RCGF

ср. ун.  
но р. и.

C.A. 1970. 73. 26

1970



колич. сп. ра

у

ΔH

D<sub>0</sub>

X. 1971. 6

6 Б45. Электронное строение димерного аминоборана  $(\text{NH}_2\text{BH}_2)_2$ . Armstrong D. R., Perkins P. G. Electronic structure of dimeric aminoborane,  $(\text{NH}_2\text{BH}_2)_2$ . «J. Chem. Soc.», 1970, A, № 16, 2748—2750 (англ.)

Произведен неэмпирич. расчет МО—ССП  $(\text{NH}_2\text{BH}_2)_2$  (I) в гауссовом базисе с минимизацией полной энергии по длине связи В—N и углу В—N—В. Приведены орбитальные энергии, полная электронная энергия: —278, 7932 ат. ед. при В—N 1,63А и  $\angle$  В—N—В 86°, так что группировка  $\text{B}_2\text{N}_2$  построена в виде искаженного квадрата. Из сравнения с расчетом мономера (см. РЖХим, 1970, 11Б44) найдена энергия димеризации: 2,64 ккал/моль при 0° К, что объясняет обратимый характер димеризации или ее отсутствие у родственных соединений. Потенциал ионизации равен 11,46 эв. С учетом энергии реорганизации (ЭР), включающей растяжение связи В—N от



1,38А ( $\sim 38$  ккал/моль) и изменение углов, энергия диссоциации I на два реорганизованных мономера оценена в 119 ккал/моль, так что энергия «новой» связи В—N оценивается в 60 ккал/моль. В случае  $(\text{CH}_3)_2\text{BN}(\text{CH}_3)_2$ , где ЭР должна быть больше, димеризации не должно происходить. Искажение квадрата  $\text{B}_2\text{N}_2$  авторы связывают с тем, что взаимодействие  $\text{N} \dots \text{N}$  имеет разрыхляющий характер, а  $\text{B} \dots \text{B}$  — слабо связывающий. Заселенности АО в димере близки к найденным для мономера.

М. Дяткина

$H_2BNH_2$

1970

11 Б97. Криохимическое приготовление мономерного аминоборана. Kwon C. T., McGee H. A., Jr. Cryo-chemical preparation of monomeric aminoborane. «Inorg. Chem.», 1970, 9, № 11, 2458—2461 (англ.)

Продукты плазмохим. р-ций, образованные в без-электродном ВЧ-разряде в парах боразина при низких давлениях, улавливались в проточной ловушке при  $-196^\circ$ . При постепенном нагревании ловушки при т-рах  $-170$ ,  $-160$ ,  $-130$ ,  $-40$  и  $-30^\circ$  из нее выделялись соотв. диборан, аминоборан ( $H_2BNH_2$ ), непрореагировавший боразин, а также, по-видимому, боразанафталин и диборазинил.  $H_2BNH_2$  был идентифицирован: а) по относит. летучести; б) по масс-спектру; в) по потенциалу ионизации, равному  $11,0 \pm 0,1$  эв и г) по ИК-спектру при различных т-рах вплоть до  $4,2^\circ$  К. Ло-

у;

ИК-спектр

Х. 1971. 11

вушка была присоединена непосредственно к ионному источнику времяпролетного масс-спектрометра. Наиболее интенсивные ионы масс-спектра  $\text{H}_2\text{BNH}_2$  и их относит. интенсивности —  $m/e$  29 (38,8), 28 (100,0) 27 (56,2), 26 (13,8). Тв.  $\text{H}_2\text{BNH}_2$  частично полимеризуется, начиная с т-ры  $-196^\circ$ , с образованием белого инертного вещества.

В. Ю. Орлов

HBNH

$B_2N_2H_4$

(пер: ет)

1972.

Armstrong D.R, Clark D.T

"Theor. chim.<sup>#</sup>.acta"

1972, 24, N 4, 307-316.

(сир  $B_3N_3H_6$ , III)

1982

НВНН

19 Б34. Исследование иминоборана неэмпирическим методом молекулярных орбиталей. Baird N. Colin, Datta Ranjan K. An ab initio molecular orbital study of iminoborane. «Inorg. Chem.», 1972, 11, № 1, 17—19 (англ.)

электр.  
структура;  
молекулы

Методом СОП МО ЛКАО в базисе СТО-3Г (миним. базис 3-членных сгруппированных гауссовских функций) рассчитано электронное строение и геометрия молекулы иминоборана, НВНН, в основном состоянии. Расчет предсказывает линейную структуру молекулы с длиной связи В—N 1,23 А и дипольным моментом 0,86 D. Анализ рассчитанных энергетич. характеристик, а также локализованных (по методу Эдмистона—Рюденберга) и канонич. МО, указывает на то, что связь В—N имеет полярность  $B^+N^-$ , по своей силе сравнима со связью  $C \equiv C$  в изoeлектронном иминоборану ацетилене и может рассматриваться как тройная. По резюме

X.1982.19

1972

HBNH

50330x Ab initio molecular orbital study of iminoborane. Baird, N. Colin; Datta, Ranjan K. (Dep. Chem., Univ. West. Ontario, London, Ont.). *Inorg. Chem.* 1972, 11(1), 17-19 (Eng). The ground-state electronic and geometric structure of the as yet unisolated mol. iminoborane, HBNH, was investigated by ab initio SCF-LCAO-MO calcs. The mol. is predicted to be

linear with a B-N bond distance of 1.23 Å and with a dipole moment of 0.86 D. Anal. of the calcd. energy and of the localized and delocalized wave functions indicates that the B-N bonds, while polar in the sense  $B^+N^-$ , are of comparable strength to those in the isoelectronic hydrocarbon acetylene and that the linkage is best represented as a truly triple bond.

ub. mex.

p. 1000

reac. chp. 1000

C.A. 1972.76.10

$B_3N_3H_4$

1972  
13 Б1085. Фотохимия боразина. Доказательство существования промежуточного продукта  $B_3N_3H_4$ . Neiss Melvin A., Porter Richard F. Photochemistry of borazine. Evidence for a borazine intermediate. «J. Amer. Chem. Soc.», 1972, 94, № 5, 1438—1443 (англ.)

При фотолизе (184,9 нм)  $B_3N_3H_6$  (I) образуются  $H_2$ , боразанафталин, диборазанил и нелетучий полимер. Наблюдалась линейная зависимость выхода  $B_3N_3O_5H$  от суммарного давл. при фотолизе эквимол. смеси  $B_3N_3H_6$ — $B_3N_3N_6$ . Квантовый выход образования  $H_2$  равен 0,21 при давл. I, 1 мм и падает в присутствии добавок Ag,  $H_2$  и циклогексана. Рассмотрен механизм фотохим. распада I, согласно к-рому возбужденная молекула I в синглетном состоянии в результате внутренней конверсии переходит в колебательно-возбужденное основное состояние и далее распадается на  $H_2$  и промежут. соединение  $B_3N_3H_4$ .  
А. Шведчиков

X. 1972. 13

$B_3H_3N_3$  ( $A'_2 - A'_1$ )

1972

Yanase M., Koyanagi M., Kanda Y.

Mem. Fac. Sci., Kyushu Univ.

1972, 18, 11, 35-42 .



$\text{NH}_2\text{-B}_2\text{H}_5 (\nu_i)$

omnibus 8791

1973

(811)

65231x Ring-puckering vibration of  $\mu$ -aminodiborane. Gaylord, A. S.; Pringle, W. C., Jr. (Dep. Chem., Wesleyan Univ., Middletown, Conn.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(9), 4674-7. (Eng). The ring-puckering vibrations of  $\mu$ -aminodiborane and  $\text{ND}_2\text{-B}_2\text{H}_5$ ,  $\text{NH}_2\text{-B}_2\text{D}_5$ , and  $\text{ND}_2\text{-B}_2\text{D}_5$  were investigated. The  $0 \rightarrow 1$  transitions were assigned to the Q branches at 337.6, 333.6, 244.6, and 243  $\text{cm}^{-1}$ , resp. The potential function for this vibration is  $V(Z) = 8.695 \times 10^5 Z^4 + 6.859 \times 10^4 Z^2$  ( $\text{cm}^{-1}$ ), where Z is the displacement coordinate in Å. Inclusion of terms in the kinetic energy to account for the dependence of the reduced mass on coordinate suggests that the vibration involves equal bending about the diagonals in the ring-H analogs and bending about the B-B diagonal in ring-D mols. The concept of torsional-strain energy in ring mols. is introduced.

C.A. 1974. 80. N12. 65231x 10

Ⓟ

$NH_2B_2H_5$

omnius 1791

1973

(2i)

65231x Ring-puckering vibration of  $\mu$ -aminodiborane. Gaylord, A. S.; Pringle, W. C., Jr. (Dep. Chem., Wesleyan Univ., Middletown, Conn.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(9), 4674-7 (Eng). The ring-puckering vibrations of  $\mu$ -aminodiborane and  $ND_2-B_2H_5$ ,  $NH_2-B_2D_5$ , and  $ND_2-B_2D_5$  were investigated. The  $0 \rightarrow 1$  transitions were assigned to the Q branches at 337.6, 333.6, 244.6, and 243  $cm^{-1}$ , resp. The potential function for this vibration is  $V(Z) = 8.695 \times 10^5 Z^4 + 6.859 \times 10^4 Z^2$  ( $cm^{-1}$ ), where Z is the displacement coordinate in Å. Inclusion of terms in the kinetic energy to account for the dependence of the reduced mass on coordinate suggests that the vibration involves equal bending about the diagonals in the ring-H analogs and bend-

ing about the B-B diagonal in ring-D mols. The concept of torsional-strain energy in ring mols. is introduced.

C. A. 1974. 80. N12

40219.7515

TE, Ph, Ch

$BH_2-NH_2-BH_2-H$

40892

1973

1791

Gaylord A.S., Pringle W.C., Jr. Ring-puckering vibration of  $\mu$ -aminodiborane.

"J:Chem.Phys.", 1973, 59, N9, 4674-4677

(англ.)

0047 ББК

030 032 040

ВИНИТИ

$N_2H_4 \cdot 2BH_3$

1973

3 Д384. ИК-спектры и спектры комбинационного рассеяния гидразин-бис-(тригидроборана). Hanousek F., Haruda F. Infrared and raman spectra of hydrazine-bis(trihydroborane). «Collect. Czech. Chem. Commun», 1973, 38, № 9, 2692—2696 (англ.)

Получены ИК-спектры ( $4000-400 \text{ см}^{-1}$ )  $N_2H_4 \cdot 2BH_3$  (I) и его  $d_6$ - и  $d_{10}$ -производных в твердом состоянии и в растворе в диэтиловом эфире, а также их спектры комб. рас. На основании предположения о принадлежности I к классу симметрии  $C_{2h}$  и на основании смещения полос при изотопном замещении дано отнесение полос. Дублет в области  $720 \text{ см}^{-1}$  в спектре комб. рас. I отнесен к  $\nu_s^{10}BN$  и  $\nu_s^{11}BN$ , а полоса ИК-поглощения  $760 \text{ см}^{-1}$  отнесена к  $\nu_{as}$  колебания той же связи. Отмечена чувствительность полосы  $760 \text{ см}^{-1}$  к дейтерированию. Библи. 11.

А. Л. Белозеров

(I)

Р. 1974. №3

HNBH

1973

16 Б242. Инфракрасные исследования продуктов в системе водород — бор — азот, изолированных в матрице. Logy Earl R., Porter Richard F. Infrared studies of matrix isolated species in the hydrogen—boron—nitrogen system. «J. Amer. Chem. Soc.», 1973, 95, № 6, 1766—1770 (англ.)

Измерены спектры ИК-поглощения продуктов фотоллиза  $\text{H}_3\text{N}_3\text{B}_3$  (I), изолированных в матрицах Ar и Xe при  $M/A=300$  или выше. Как основной продукт разложения I идентифицирован HNBH (II). В ИК-спектре обнаружены два из трёх основных колебаний II:  $3700 \text{ см}^{-1}$  ( $\nu_1$ ) и  $1785 \text{ см}^{-1}$  ( $\nu_3$ ). Обнаружены полосы этих же колебаний изотопич. разновидностей II с  $\text{B}^{10}$  и  $\text{N}^{15}$ . Проведен расчет основных колебаний II. Рассчитанное значение частоты  $\nu_2$   $2800 \text{ см}^{-1}$ . К основному деф. кол.  $\nu_4$  предположительно отнесена слабая полоса  $460 \text{ см}^{-1}$ . Изучено действие более продолжительного облучения, приводящее к разложению II с образованием HNB, к колебаниям к-рого отнесены полосы  $3675 \text{ см}^{-1}$  ( $\nu_1$ ) и  $2035 \text{ см}^{-1}$  ( $\nu_2$ ). Г. Кузьянц

(vi)

65-259

Ж. 1973 № 16

HNBH

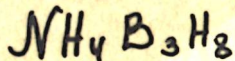
1973.

(vi) 130181f Infrared studies of matrix isolated species in the hydrogen-boron-nitrogen system. Lory, Earl R.; Porter, Richard F. (Dep. Chem., Cornell Univ., Ithaca, N.Y.). *J. Amer. Chem. Soc.* 1973, 95(6), 1766-70 (Eng). Infrared spectra of the 1216-Å photolysis products of  $H_3N.BH_3$  in rare gas matrixes indicated that the major product was imidoborane (HNBH). Two of the 3  $\Sigma^+$  vibrations for a linear HNBH structure were obsd. at  $3700\text{ cm}^{-1}$  ( $\nu_1$ ) and  $1785\text{ cm}^{-1}$  ( $\nu_2$ ) for the  $^{11}\text{B}$ ,  $^{14}\text{N}$  species in an Ar matrix. Calcns. based on isotope effects predicted a frequency of  $2800\text{ cm}^{-1}$  for  $\nu_2$ . One of the bending vibrations of HNBH was obsd. at  $460\text{ cm}^{-1}$ . A 2nd species appearing after prolonged photolysis of  $H_3N.BH_3$  was HNB. Spectra of the photolysis products of borazine indicated a species formed by ring opening, loss of H, and multiple BN bond formation.

C.A. 1973. 78 v20

(+1) HNB





1973

47421j Infrared absorption spectra of some nitrogen-containing octahydrotriborates(1-). Nikitin, V. S.; Pchelkina, M. A.; Antonov, I. S.; Vinogradova, Z. F.; Kurekova, A. T. (USSR). *Zh. Prikl. Spektrosk.* 1973, 18(5), 938 (Russ). Addnl. data considered in abstracting and indexing are available from a source cited in the original document. The ir spectra of  $\text{NH}_4\text{B}_3\text{H}_8$ ,  $\text{N}(\text{CH}_3)_4\text{B}_3\text{H}_8$ , and  $\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_4\text{B}_3\text{H}_8$  were detd. at 400-4000  $\text{cm}^{-1}$ . Discrepancies in published assignments of the band at 2128  $\text{cm}^{-1}$  (sym. stretching vibration of  $\text{BH}_2$ ) are discussed. Proof is given that the band corresponds to stretching vibrations of the B-H-B group in  $\text{B}_3\text{H}_8$  ion. H. Parizkova

2i  
u.k. chemip

C.A. 1973. 79 N 8.

(+1)  $\boxtimes$

30727.6833

Ph. Ch. TE

41125

1973

\* 25-1235

Smith J., Seshadri K.S., White David.  
Infrared spectra of matrix isolated  $\text{BH}_3\text{-}$   
 $\text{NH}_3$ ,  $\text{BD}_3\text{-ND}_3$ , and  $\text{BH}_3\text{-ND}_3$ . "J. Mol.  
Spectrosc.", 1973, 45, N 3, 327-337

(англ.)

0926 БИК

902 906 9 1 9

ВИНИТИ



$H_2BNH_2$

\*У-4596

1974

Сил. пост.,  
Геометр.

8 Д173. Вычисление барьера внутреннего вращения и структуры аминоборана неэмпирическим методом. Gropen Odd, Seip Hans M. Rotational barrier and structure of aminoborane determined by AB initio calculations. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 25, № 2, 206—208 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с использованием расширенного базиса  $s, p, d$ -орбиталей вычислены структурные параметры и силовые постоянные для плоской ортогональной формы, барьер внутреннего вращения вокруг связи В—N и барьер инверсии молекулы  $H_2BNH_2$ . Полученные значения длины связи В—N (1,378 Å) и барьера внутреннего вращения (33,3 ккал/моль) согласуются с эксперим. данными (1,379 Å и 26,3 ккал/моль).

М. Р. Алнев

Ф. 1974. № 8

$H_2NB_2H_5$

\*4-8099

1974

11 Б313. Микроволновый спектр, структура и дипольный момент аминодиборана. Lau Kar-Kuen, Burg Anton B., Beaudet Robert A. Microwave spectrum, structure, and dipole moment of aminodiborane. «Inorg. Chem.», 1974, 13, № 12, 2787-2791 (англ.)

Исследованы МВ-спектры десяти изотопозамещенных аминодиборана  $H_2NB_2H_5$  в области частот от 18,5 до 40 ГГц. Для всех изотопозамещенных определены вращательные постоянные и моменты инерции, для нормального изотопич. образца вращательные постоянные в МГц с точностью не хуже  $\pm 0,05$  МГц:  $A=19448,87$ ;  $B=14228,18$ ;  $C=10098,81$ . По эффекту Штарка для одного перехода определен дипольный момент:  $\mu_b = 2,67 \pm 0,03$  D.

м.б.  
спектр  
J; м.п.  
геометр.

х. 1975. N 11

IX-75X20-29

Из анализа тонкой структуры ряда переходов и квадрупольного расщепления определены компоненты  $^{14}\text{N}$  ядерного квадрупольного взаимодействия в Мгц:  $\chi_{aa} = -2,71 \pm 0,03$ ;  $\chi_{bb} = 0,84 \pm 0,05$ ;  $\chi_{cc} = 1,87 \pm 0,08$ . Определены координаты всех атомов молекулы за исключением двух атомов водорода амино-группы. Определены структурные параметры:  $r(\text{B}-\text{B}) = 1,916 \pm 0,002$  А,  $r(\text{B}-\text{N}) = 1,558 \pm 0,001$  А,  $r(\text{B}-\text{H}_{br}) = 1,355 \pm 0,005$  А,  $r(\text{B}-\text{H}_t) = 1,193 \pm 0,001$  А,  $\angle \text{BNB} = 75,9 \pm 0,1^\circ$ ,  $\angle \text{BH}_{br}\text{B} = 90,0 \pm 0,6^\circ$ ,  $\angle \text{H}_t\text{BH}_t = 121,0 \pm 0,3^\circ$ , угол между  $\text{BH}_2$  плоскостью и плоскостью, перпендикулярной к  $C_{2v}$  оси симметрии:  $16,8 \pm 0,1^\circ$ .

С. Н. Мурзин

$H_2NB_2H_5$

BP-2797-XV  
#5-8099

1974

179419r Microwave spectrum, structure, and dipole moment of aminodiborane. Lau, Kar-Kuen; Burg, Anton B.; Beaudet, Robert A. (Chem. Dep., Univ. South. California, Los Angeles, Calif.). *Inorg. Chem.* 1974, 13(12) 2787-91 (Eng). The microwave spectra of 10 isotopic species of  $H_2NB_2H_5$  were assigned. The following substitution values for the structural parameters were detd.:  $r(B-B) = 1.916 \pm 0.002$  Å,  $r(B-N) = 1.558 \pm 0.001$  Å,  $r(B-H_{br}) = 1.355 \pm 0.005$  Å,  $r(B-H_t) = 1.193 \pm 0.000$  Å,  $\angle BNB = 75.9 \pm 0.1^\circ$ ,  $\angle BH_{br}B = 90.0 \pm 0.6^\circ$ ,  $\angle H_tBH_t = 121.0 \pm 0.3^\circ$ ,  $\angle \epsilon$  (the angle made by the  $BH_t$  plane and the plane perpendicular to the  $C_{2v}$  symmetry axis)  $= 10.8 \pm 0.1^\circ$  (*br* and *t* refer to bridging and terminal H atoms, resp.). From the center of mass equations, the amino hydrogen parameters were calcd. to be  $r(N-H) = 1.005 \pm 0.006$  Å and  $\angle HNH = 111.0 \pm 1.2^\circ$ . The dipole moment was  $2.67 \pm 0.03$  D. The  $^{14}N$  nuclear quadrupole coupling consts. were  $\chi_{aa} = -2.71 \pm 0.03$ ,  $\chi_{bb} = 0.84 \pm 0.05$ , and  $\chi_{cc} = 1.87 \pm 0.08$  MHz.

См. пункт  
на с. 4.

C. A. 1974. 8/ N 26

$BH_2NH_2$

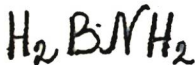
1974

(40)

Bombardieri 12,00 a.l.,

J. Chem. Phys., 1974,  
61, 113, 894-901.

(em.  $C_2H_6$ ; III)



равнов.  
геометр

Х. 1974. N 16

1974

16 Б36. Электронное строение и спектры ЯМР некоторых производных фуранохинолиновых, 5, 6, 7, 8-тетра-гидрофуранохинолиновых и 2-хинолоновых алкалоидов. Ягудаев М. Р., Юнусов С. Ю. «Химия природ. соедин.», 1974, № 1, 55—62

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовых функций  $(\text{N}, 9s5p1d|\text{B}, 9s5p|\text{H}, 4s)$ , сгруппированном в  $(\text{N}, 4s2p1d|\text{B}, 4s2p|\text{H}, 2s)$  исследовано электронное строение и рассчитана равновесная геометрия аминоборана,  $\text{H}_2\text{BNH}_2$  (I). Минимуму энергии отвечает плоская структура I с длинами связей  $\text{B}-\text{H}$  1,193 Å,  $\text{N}-\text{H}$  1,006 и  $\text{B}-\text{N}$  1,378 и валентными углами  $\text{H}-\text{B}-\text{N}$  119,5° и  $\text{B}-\text{N}-\text{H}$  124,4° (опытное значение длины

связи В—N для  $(\text{CH}_3)_2\text{NBCl}_2$  1,379 Å). Барьер вращения оценен в 33,3 ккал/моль, что близко к опытным данным для родственных систем. В повернутой на  $90^\circ$  форме связь В—N удлинена на 0,09 Å, группа  $\text{NH}_2$  пирамидальная и находится в шахматной конформации по отношению к группе  $\text{BH}_2$ . Барьер инверсии для группы  $\text{NH}_2$  (геометрия оптимизировалась только частично) оценен в 7,2 ккал/моль. Также рассчитаны силовые постоянные вал. кол., найденные равными соотв. 8,03; 8,10 и 4,07 мдин/Å для связей N—B, N—H и B—H плоской формы.

---

В. Л. Лебедев

\*U-9483

1975

H<sub>2</sub>BNH<sub>2</sub>

Hill, J.D. et al.

HB-NH

J. Am. Chem. Soc., 1975,

KB. LXX.  
pucem

97(12), 3452-9

C.A. 1975, 83, N8

CU BH; III



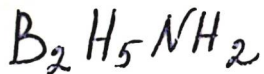
1975

 $B_n N_n H_{n+3}$ 

7) 84: 50029w Energy levels and wave functions of polyborazoles. Pozela, I.; Radvilavicius, C. (Kaunas A. Snieckus Polytech. Inst., Kaunas, USSR). *Liet. Fiz. Rinkiny* 1975, 15(4), 559-64 (Russ). Anal. equations of energy levels and wave functions were derived by the MO LCAO method for polyborazoles ( $B_n N_n H_{n+3}$ ), composed of linear series of ( $B_3 N_3 H_6$ ) rings, in the ( $\pi$ -electron approxn. and by using the finite difference method. The Coulomb and exchange integrals were calcd. by using literature exptl. spectroscopic data. The energy of the 1st  $\pi$ -electron transition decreases with increasing no. ( $N$ ) rings in the mol. and at  $N \rightarrow \infty$  it reaches 4.46 eV.

Кб. пер.  
спектр

C.A. 1976 84 N8



1976

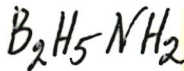
85:130906r The electronic structure of aminodiborane. Armstrong, D. R. (Dep. Pure Appl. Chem., Univ. Strathclyde, Glasgow, Scot.). *Inorg. Chim. Acta* 1976, 18(2), 145-6 (Eng). The electronic structure of aminodiborane ( $\text{B}_2\text{H}_5\text{NH}_2$ ) was studied by nonempirical LCAO-MO-SCF calcs. There is electron donation to the amino group from the diborane moiety. The main component of the B-N bond is in the in-plane interaction between the B  $P_x$  orbital, perpendicular to the B-B bond (y axis), and the n  $P_y$  orbital. The  $\pi$ -bonding within the BBN ring is negligible. Tilting the  $\text{BH}_2$  groups by  $16.8^\circ$  from a plane perpendicular to the  $C_2$  axis stabilizes the mol. energy by 24.2 kJ/mole.

kb. mex.  
packet

C.A. 1976 85 N 18

B-H-N (аминодиборан)

1976



18 Б40. Электронное строение аминодиборана. Armstrong D. R. The electronic structure of aminodiborane. «Inorg. chim. acta», 1976, 18, № 2, 145—146; (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в двухэкспонентном базисе ОСТ—4ГФ исследовано электронное строение плоской (I) и изогнутой (плоскости  $BH_2$  отклонены от плоскости BBN) (II) конформаций аминодиборана. Во всех расчетах использованы эксперим. значения длин связей и валентных углов. Найдено, что II стабильнее I на 5,8 ккал/моль. Анализ заселенностей показал, что атомные заселенности I и II почти одинаковы. Обнаружен перенос заряда с атомов Н аминогруппы (от каждого 0,359) и с группы диборана (0,227) на атом азота. Мостиковый атом Н несет малый отриц. заряд. Связь B—B, достаточно слабая в диборане, становится несущественной в I и II. Связывающее взаимодействие

геометр.

Эл. эффекты

ж. 1976 № 18

сконцентрировано в плоскости цикла, т. к.  $\pi$ -компоненты в области В—В—N разрыхляющие. Высшая занятая МО представляет собой антисимметричную комбинацию  $P_z$ -АО бора и АО симметрично расположенных терминальных атомов Н. Низшая вакантная МО состоит из  $p$ -АО бора, расположенных в плоскости ВВN. Этим объясняется, что как электрофильные, так и нуклеофильные реагенты, реагируют с атомом В. Вычисленный дипольный момент согласуется с экспериментальным.

В. А. Корсунов

$(\text{BH}_2\text{NH}_2)_3$

Оттиск 4484

1976

21 Б61. Геометрическое и электронное строение циклогексана циклотриборазана,  $(\text{BH}_2\text{NH}_2)_3$ . Findlay Robert H. Geometric and electronic structures of cyclohexane and cyclotriborazane,  $(\text{BH}_2\text{NH}_2)_3$ . «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1976, № 10, 851—857 (англ.)

геометр.  
и электр.  
строение

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в миним. базисе сгруппированных гауссовских функций (7s, 3p для B, C, N и 4s для H) проведены расчеты циклотриборазана (I) и циклогексана (II) в различных конформациях. Для I и II проведена частичная оптимизация геометрии по двухгранным углам, определяющим отклонения систем от плоскостности. В случае II в согласии с опытом и лит. расчетными данными найдено, что конформация типа ванны менее стабильна, чем конформация типа кресла, хотя рассчитанная разность энергий конформеров несколько завышена 38,1 кДж/моль (опыт 20,0—24,7). В случае I наиболее низкой энергии отвечает затменная конформация типа ванны, что не согласуется с рентгеноструктурными данными. Обсуждены возможные причины указанных расхождений.

1976 N 21

Приведены дипольные моменты и заселенности связей различных конформаций I и II. Рассмотрены процессы ионизации в изученных системах. Потенциалы ионизации (ПИ) рассчитывались двумя способами: по теореме Купманса (ТК) и прямым расчетом, как разность энергий ССП молекулы и образующегося катион-радикала. Расчеты катион-радикалов проводились в рамках ограниченного метода Хартри—Фока для открытых оболочек. Приведены энергии релаксации ионизации  $\Delta E_p^i = (\text{ИП ТК})_i - (\text{ИП ССП})_i$  с различных орбиталей. Обсуждена связь между  $\Delta E_p^i$  и средними значениями  $\langle r^2 \rangle_i$ , характеризующими степень делокализации данной МО. Рассчитаны и сопоставлены с экспериментальными данными тепловые эффекты ряда реакций I и II: 1)  $\text{II} + 6\text{CH}_4 \rightarrow 6\text{C}_2\text{H}_4$ ; 2)  $\text{II} \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6 + 3\text{H}_2$ ; 3)  $\text{I} \rightarrow \text{B}_3\text{N}_3\text{H}_6 + 3\text{H}_2$ ; 4)  $\text{II} \rightarrow 3\text{C}_2\text{H}_4$ ; 5)  $\text{I} \rightarrow 3\text{BNH}_3(\text{NH}_2)$ ; 6)  $\text{II} + 3\text{H}_2 \rightarrow 3\text{C}_2\text{H}_6$ ; 7)  $\text{I} + 3\text{H}_2 \rightarrow 3\text{NH}_3 \cdot \text{BH}_3$ ; 8)  $\text{I} + 3\text{H}_2 \rightarrow 3\text{BH}_3 + 3\text{NH}_3$ ; 9)  $2(\text{I}) \rightarrow \text{B}_3\text{N}_3\text{H}_3 + 3\text{NH}_3 \cdot \text{BH}_3$ .

И. Абронин

$(\text{BH}_2\text{NH}_2)_3$

omnick 4484

1976

conf. 5-  
n. p. a. c.  
K. l. c. c. x.  
p. a. c. c. t.

85: 68614p Geometric and electronic structures of cyclohexane and cyclotriborazane,  $(\text{BH}_2\text{NH}_2)_3$ . Findlay, Robert H. (Dep. Pure Appl. Chem., Univ. Strathclyde, Glasgow, Scot.). J. Chem. Soc., Dalton Trans. 1976, (10), 851-7 (Eng). Nonempirical minimal-basis-set calcs. of the geometric and electronic structures of cyclohexane (I) and cyclotriborazane (II) predicted that II adopts an eclipsed boat conformation in the gas phase and is thermodynamically unstable with respect to disproportionation, and confirmed that the chair conformation for I was more stable than the boat conformation. Changes in ionization potential and orbital nature were discussed in terms of the relative at. orbital energies. Several open-shell calcs. gave improved agreement with exptl. ionization energies, while the assocd. electronic relaxation energies were considered in the context of the  $\langle r^2 \rangle$  expectation value.

C. A. 1976.85 N10

оттиск 6000

1974

Боразини

B-C-N-H

Beachley O.T.  
et al.

Борозини

Св. 6

и. н. Д.

инст. Дир

Inorg. Chem., 1974,  
16, 2935 - 2938

Borazines; Molecules...



HBN-

[omnick 10504] 1977

HNB-

Summers N. L.; et al.

(u.n)

J. Amer. Chem. Soc.,  
1977, 99 (12), 3960-65.

kv. mex,  
pacer

HBNH

Commen 10504 1974.

Summers N. L., et al.

(min)

J. Amer. Chem. Soc.,  
1974, 99 (12), 3960-65.

кв. мех.  
фактор

HNB  
HBN  
HNBH

1978

Botschwina Peter

Chem. Phys. 1978, 28, N1-2,  
231-241 (engl.)

правов.  
защиты  
евр. пат., Di

евр. БО - III

$BH(NH_2)_2$

compound 7187

1978

Briggs Th. S.; et al.

J. Amer. Chem. Soc.

1978, 100 (24), 7762-63.

Synthesis, Characterization  
and Structure of ...

(M.H.) :  
empirical  
molecular

$B_2H_5NH_2$

1978

13 Б14. Электронное строение и природа связей в диборане ( $B_2H_6$ ) и аминодиборане ( $B_2H_5NH_2$ ). Datta M. K., Datta R. Electronic structure & bonding in diborane ( $B_2H_6$ ) & aminodiborane ( $B_2H_5NH_2$ ). «Indian J. Chem.», 1978, А16, № 4, 274—278 (англ.)

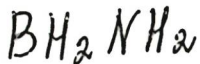
Методом МО ЛКАО СПП в приближении ППДП/2 выполнен расчет  $B_2H_6$  (I) и  $B_2H_5NH_2$  (II). Полученные МО локализованы по методу Триндла и Синаноглу («J. Chem. Phys.» 1968, 49, 65), представляющему модификацию процедуры Эдмистона—Рюденберга для полуэмпирич. методов. Подробно обсуждено строение локализованных МО, их сходство и различие в I и II. Приведены результаты анализа заселенностей по Малликену. Вычисленное значение дипольного момента II равно 2,27 D (эксперим. значение 2,67). Проанализирована роль различных энергетич. вкладов в энергию хим. связей ( $E_{св}$ ) I и II. Найдено, что основной вклад в  $E_{св}$  дают взаимодействия резонансного типа  $E^R$ , причем  $E_{св}$  и  $E^R$  изменяются симбатно, члены электростатич. отталкивания и притяжения приблизительно взаимно компенсируются.

А. Клягина

М. П.

⊠

Х. 1979, № 13



1979

M, N.

93: 104037d Microwave spectra of aminoborane ( $\text{BH}_2\text{NH}_2$ ). Sugie, Masaaki; Kawashima, Yoshiaki; Takeo, Harutoshi; Matsumura, Chikashi (Natl. Chem. Lab. Ind., Tokyo, Japan). *Koen Yoshishu - Bunshi Kozo Sogo Toronkai* 1979, 168-9 (Japan). Chem. Soc. Japan: Tokyo, Japan. The microwave spectrum of  $\text{BH}_2\text{NH}_2$  produced from the thermal reaction between  $\text{NH}_3$  and  $\text{B}_2\text{H}_6$  were obsd., and the mol. consts., including the rotational and centrifugal distortion consts., dipole moments, and the mol. structure were detd. The mol. consts. of  $^{10}\text{BH}_2\text{NH}_2$ ,  $\text{BH}_2^{16}\text{NH}_2$ ,  $\text{BD}_2\text{NH}_2$ , and  $\text{BH}_2\text{ND}_2$  were also detd.

C.A. 1980, 93 n 10

BH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>

DM. 8172

1079

91: 131543f Microwave spectrum of aminoborane, BH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>. Sugie, Masaki; Takeo, Harutoshi; Matsumura, Chi (Natl. Chem. Lab. Ind., Tokyo, Japan 151). *Chem. Phys. Lett.* 1979, 64(3), 573-5 (Eng). The unstable species aminoborane, BH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, was identified as a reaction produce of NH<sub>3</sub> with B<sub>2</sub>H<sub>6</sub> microwave spectroscopy. The rotational consts. detd. are  $A = 138212 \pm 4$ ,  $B = 27487.83 \pm 0.10$ , and  $C = 22878.44 \pm 0.11$  MHz for <sup>11</sup>BH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub> and  $A = 138199 \pm 6$ ,  $B = 28420.36 \pm 0.11$  and  $C = 23520.78 \pm 0.12$  MHz for <sup>10</sup>BH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>. The dipole moment is  $1.844 \pm 0.015$  D.

M.N.

XV-3623

C.A. 1979, 9, N16

$\text{BH}_2\text{NH}_2$

22 Б269. Микроволновый спектр аминоборана,  $\text{BH}_2\text{NH}_2$ . Sugie M., Takeo H., Matsumura S. Microwave spectrum of aminoborane,  $\text{BH}_2\text{NH}_2$ . «Chem. Phys. Lett.», 1979, 64, № 3, 573—575 (англ.)

Измерены в области частот от 8 до 60 ГГц МВ-спектры двух изотопич. образцов нестабильной молекулы аминоборана,  $^{11}\text{BH}_2\text{NH}_2$  (I) и  $^{10}\text{BH}_2\text{NH}_2$  (II), в основном колебательном состоянии. I и II получены в качестве продуктов реакции между дибораном и аммиаком при нагреве смеси до  $t = 500^\circ$ . В приближении нежесткой модели определены для I и II, соответственно, вращательные постоянные (в МГц)  $A = 13821,2(4)$  и  $138199(6)$ ,  $B = 27487,83(10)$  и  $28420,36(11)$ ,  $C = 22878,44(11)$  и  $23520,78(12)$ , и постоянные центробежного искажения (в МГц)  $T_{aaaa} = -22(5)$  и  $-28(9)$ .

т. 1979, № 22

XV-3623



$\tau_{bbbb} = -0,23(4)$  и  $-0,19(8)$   $\tau_{aabb} = 1,0(5)$  и  $1,8(10)$ ,  
 $\tau_{abab} = -1,4(2)$  и  $-1,8(4)$ . Из малости дефектов инер-  
 ции для I и II сделан вывод о плоской структуре  
 молекулы. По эффекту Штарка для двух переходов I  
 и II в предположении  $\mu_b = \mu_c = 0$  определен дипольный  
 момент молекулы  $\mu_a = 1,844(15) D$ . В предположении,  
 что  $r(BN) = 1,184$  А,  $r(NH) = 1,003$  А, определены мо-  
 лек. параметры  $r(BN) = 1,403(5)$  А, углы  $\angle BHN$   $120,7(4)^\circ$ ,  
 $\angle BHN$   $117,9(19)^\circ$ . Полученные значения параметров  
 согласуются с данными для родственных молекул. Дли-  
 на  $BN$  связи указывает на двойной характер связи в  
 соответствии с предсказанием квантовохим. расчетов.  
 Из сравнения с  $BF_2NH_2$  установлено, что дипольный  
 момент I направлен от атома азота к атому бора, что  
 не согласуется с результатами расчетов. С. Н. Мурза—

$\text{BH}_2\text{NH}_2$

оттиски 8172 1979

11 Д569. Микроволновый спектр аминоборана  $\text{BH}_2\text{NH}_2$ . Sugie Masaaki, Takeo Harutoshi, Matsumura Chi. Microwave spectrum of aminoborane,  $\text{BH}_2\text{NH}_2$ . «Chem. Phys. Lett.», 1979, 64, № 3, 573—575 (англ.)

Впервые получен микроволн. спектр нестабильной молекулы  $\text{BH}_2\text{NH}_2$  (I), образованной при реакции аммиака с дибораном. В диапазоне 8—52 Гц идентифицированы линии вращательных переходов с  $J \leq 27$  основных колебательных состояний  $I = {}^{10}\text{B}$  и  $I = {}^{11}\text{B}$ . Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных этих молекул.

М. Р. Алиев.

м. р. спектр

4V-3623

ф. 1979, VII

B-N-H

1973

22

91: 81105s Emission spectrum of tri-*B*-fluoroborazine radical cation in the gas phase:  $A^2A_2'' \rightarrow \bar{X}^2E''$  band system. Jones, Taylor B.; Maier, John P.; Marthaler, Oskar (Phys.-Chem. Inst., Univ. Basel, CH-4056 Bas. I, Switz.). *Inorg. Chem.* 1979, 18(8), 2140-2 (Eng). The optical emission spectrum of the tri-*B*-fluoroborazine radical cation in the gas phase was obtained. The band system is assigned to the  $A^2A_2 \rightarrow \bar{X}^2E''$  electronic transition of the cation by ref. to the photoelectron spectrum of tri-*B*-fluoroborazine which was recorded under high resolu. A vibrational anal. of the emission band system yields the frequencies of 3 of the 4  $A_1'$  (under  $D_{3h}$  symmetry classification) fundamentals for the  $\bar{X}^2E''$  state whereas the Ne I photoelectron spectrum allows the corresponding 3 frequencies for the  $A^2A_2''$  state of tri-*B*-fluoroborazine cation to be deduced.



C.A. 1979, 10/10

ommu 10497 1980



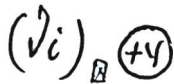
J.



94: 9356u Ground states of molecules. Part 57. Vibration frequencies of boron-containing molecules. Dewar, Michael J. S., McKee, Michael L. (Dep. Chem., Univ. Texas, Austin, TX 78712) *J. Mol. Struct.* 1980, 68, 105-18 (Eng). Vibration frequencies were calcd. for a no. of B-contg. mols. using MNDO. Correlations with obsd. spectra led to ests. of group corrections. Cor. frequencies are used in assigning IR spectra of aminoborane and  $\text{B}_2\text{N}_2\text{H}_8$  and in predictions of spectra for vinyl borane and  $\text{B}_2\text{N}_2\text{H}_4$ .

P.A. 1981.54.12

айтиск 10497 1980



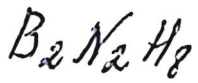
Л. 1981 N 7

7 Б155. Основные состояния молекул. Часть 57. Частоты колебаний борсодержащих молекул. Dewar M. J. S., McKee M. L. Ground states of molecules. Part 57. Vibration frequencies of boron-containing molecules. «J. Mol. Struct.», 1980, 68, 105—118 (англ.)

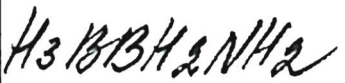
Проведен расчет норм. кол. большого числа борсодержащих молекул. Силовые постоянные рассчитаны одним из вариантов полуэмпирич. метода ЧПДП. Исходя из результатов расчета частот колебаний 28-ми борсодержащих молекул, для к-рых имеются надежные данные по спектрам и отнесению частот колебаний, рассчитаны поправки ( $\sigma_K$ ) для частот колебаний определенного типа ( $\nu_i$ ) групп атомов типа К минимизацией выражения  $\sum_i (\nu_{i\text{набл.}} - \nu_{i\text{расч.}} + \sigma_K)^2$ . После внесения поправок

средняя ошибка расчета составила 11,8%. Используя полученные значения  $\sigma_K$  проведен расчет норм. кол. молекул  $B_2N_2H_8$  (циклич. молекула) и  $BNH_2NH_2$ , для к-рых отсутствовали данные по отнесению частот колебаний, и рассчитан колебательный спектр молекул  $CH_2=CHBNH_2$ ,  $H_3B BNH_2 NH_2$  и  $B_2N_2H_4$ , спектры к-рых не измерены. И. А. Гарбузова

ammuc 10497 1980



Ji



E.A. 1981.54, 112

94: 9356u Ground states of molecules. Part 57. Vibration frequencies of boron-containing molecules. Dewar, Michael J. S., McKee, Michael L. (Dep. Chem., Univ. Texas, Austin, TX 78712) *J. Mol. Struct.* 1980, 68, 105-18 (Eng). Vibration frequencies were calcd. for a no. of B-contg. mols. using MNDO. Correlations with obsd. spectra led to ests. of group corrections. Cor. frequencies are used in assigning IR spectra of aminoborane and  $B_2N_2H_8$  and in predictions of spectra for vinyl borane and  $B_2N_2H_4$ .

$H_2BNH_2$

$HB(NH_2)_2$

$(H_2B_2)NH$

равн. геометр.

Оммуек 10803

1980

Fjeldberg Torgny  
et al.

Acta chem. scand.  
1980, A34, N 8, 547-565.

(ссыл.  $H_2BOH$ ; III).

$BH_2 - NH_2$

1980

$BH_2 - NH^-$  Hinde et al. L. et al.

no. acc.  
fact.

J. Comput. Chem., 1980,  
1(2), 118-28.

coll.  $Li - NH_2 - H$



1980

BN

Bz N3 H6

кв. ссср. г;  
расч.;  
м. свая

гуг К, et al.

Theor. chim. acta, 1980,  
57, n2, 131-44

см. FH-III

$H_2B/NH_2$   
 $HB(NH_2)_2$   
 $(H_2B_2)NH$   
павч. звод.

1980

Fjellberg J., et al.

Acta chim. scand, 1980,  
A34, N8, 547-65

см.  $H_2BOH-III$

(HBNH)<sub>n</sub> Lommuu 12894 | 1981.

Armstrong D.R.

Кб.мх.  
факт  
открытия  
1981

Theor. chim. acta,  
1981, 60, 159-172

4-NB<sub>8</sub>H<sub>13</sub>

1981

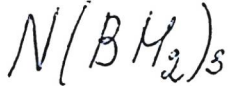
Dolanský J., et al.

Collect. Czech. Chem.

соедин

Commun., 1981, 46, N10,  
2479 - 2493.

(см. 4-CB<sub>8</sub>H<sub>14</sub> ; III)



Оммуек 13172 / 1981

$B(NH_2)_3$  Gundersen G.

расчёт,  
теоретическая,  
структура,  
ио.

Acta chem. scand.,  
1981, A35, N9, 729-  
- 731.

●  
(сер.  $B(OH)_3$ ; 111)

$(\text{NH}_4)_2 \text{B}_6 \text{H}_6$

1982

Bragin J., et al.

V. J. Raman Spectrosc.,  
1982, 12, N1, 86-90.

(cm.  $\text{C}_2\text{B}_6 \text{H}_6$ ; III)

$\text{BH}_3 \text{ N}_2$

1982

Prezent  
sr. n.

Breulet Jacques,  
Lievin Jacques.

Theor. chim. acta,  
1982, 61, N1, 59-72.

(Car.  $\text{BH}_3 \text{ CO}$ ; III)

HNB<sup>+</sup>

1982

Dev M.B., Mahajan  
Geeta D.

теор.  
расшир  
связки.  
и свод.

Indian J. Pure Appl.

Phys. 1982, 20 (5), 360 -  
- 371.

(св. HCLi ; III)



HBNH

1982

Picrem  
Pi

Hout Robert F., Levi  
Beverly A., et al.

J. Comput. Chem.  
1982, 3, 2, 234-250.  
(see H2; III)

МНБ<sup>+</sup>

Оммуек 15870

1982

Структура,  
теорет.  
расчет.

Mahajan G.D., *Acta B.U.*,  
*Indian J. Pure and*  
*Appl. Phys.*, 1982, 20,  
N 7, 527-537.

$\text{BH}(\text{NH}_2)_2$

От. 16974

1982

20 Б199. Инфракрасный спектр, спектр комбинационного рассеяния и расчет частот и форм нормальных колебаний борандиамина. Infrared and Raman spectra and normal coordinate analysis of boranedi-amine. Reuter D. C., Thorne L. R., Gwinn W. D. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 24, 4737—4745 (англ.)

Проведен синтез и измерены ИК-спектры поглощения на фурье-спектрометре с разрешением от 0,125 до 0,5  $\text{см}^{-1}$  и спектры КР 4 изотопомеров борандиамина,  $^1\text{BH}(\text{NH}_2)_2$  (I),  $^{10}\text{BH}(\text{NH}_2)_2$  (II),  $^{11}\text{BH}(\text{ND}_2)_2$  (III) и  $^{10}\text{BH}(\text{ND}_2)_2$  (IV). На базе полученных эксперим. данных дано отнесение частот колебаний. Проведен контроль отнесения частот по правилу Теллера—Редлиха. С помощью нелинейного метода наименьших квадратов решена обр. колебательная задача для плоской модели молекулы I. Подгонка силовых постоянных проведена по 37 эксперим. частотам молекул I—IV. Для

Vi, м.п.

х. 1983, 19, n 20

устранения плохой обусловленности системы уравнений часть силовых постоянных не варьировалась и принята равной нулю. С полученным силовым полем рассчитаны постоянные центробежного искажения молекулы I и значения дефекта инерции 8 изотопомеров соединения I. Из совпадения всех рассчитанных и эксперим. величин сделан вывод о плоском строении молекулы I и о частичной двосвязности фрагмента BN.

Ю. Н. Панченко

$B_6(NH_2)_6$  1983  
Neckel A., Polesak H.  
et al.

рецензир.,  
есть рукоп. Inorg. chim. acta,  
1983, 70, №2, 255-259.

(сер.  $N(BH_2)_3$ ; III)

$\text{BN}(\text{NH}_3)_2$

От. 16974

1982

12 Д469. Спектры ИК-поглощения и комбинационного рассеяния света и анализ нормальных колебаний борандиамина. Infrared and Raman spectra and normal coordinate analysis of boranedi-amine. Reuter D. C., Thorne L. R., Gwinn W. D. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 24, 4737—4745 (англ.)

Получены ИК-спектры ( $4000\text{--}50\text{ см}^{-1}$ ) газообразного борандиамина (I) и его изотопически-замещенных ( $\text{B}^{10}\text{B}$ , D) аналогов, а также спектры комб. рас. I и его аналогов при возбуждении лазерными линиями 488,0 и 514,5 нм. Проведен анализ норм. колебаний I в рамках плоской конфигурации типа симметрии  $\text{C}_{2v}$ . Определены значения силовых постоянных и значения частот колебаний связей I. Определены параметры наиболее устойчивой конфигурации I. Вычислены значения констант центробежного искажения I и его изотопич. аналогов. Величины силовых постоянных вал. кол. связей B—N и N—N составляют 6,0 и 6,8 мдин/Å<sup>2</sup> соответственно. Показано, что связь B—N в I обладает характером частично двойной связи в плоской устойчивой конфигурации I. Библиограф. 16. И. В. А.

Д.и. сил. пост.

ср. 1983, 18,  
N 12

BH(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>

Om. 16974

1982

97: 205130s Infrared and Raman spectra and normal coordinate analysis of boranedi-amine. Reuter, D. C.; Thorne, L. R.; Gwinn, W. D. (Univ. California, Berkeley, CA USA). *J. Phys. Chem.* 1982, 86(24), 4737-45 (Eng). Vibration transition frequencies obtained from moderate-resoln. Fourier transform IR (FT IR) spectra and low-resoln. Raman spectra are reported for <sup>11</sup>BH(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>, <sup>10</sup>BH(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>, <sup>11</sup>BH(ND<sub>2</sub>)<sub>2</sub>, and <sup>10</sup>BH(ND<sub>2</sub>)<sub>2</sub>. A force-const. refinement calcn. using the obsd. frequencies allows the normal coordinates for the planar modes to boranedi-amine (BDA) to be detd. in terms of independent force consts. One of the 2 symmetry types of the out-of-plane normal coordinates is detd. in terms of 4 independent force consts. The accuracy of the force field is tested by its ability to reproduce transition frequencies of <sup>11</sup>BD(ND<sub>2</sub>)<sub>2</sub> and to reproduce obsd. centrifugal distortion consts. of <sup>11</sup>BH(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub> and obsd. inertial defects of 8 isotopically substituted species of boranedi-amine. The results are most consistent with a planar structure for the mol. The B-N stretch force const. is 6.0 mdyn/Å and the N-H stretch force const. is 6.8 mdyn/Å. These results are consistent with a partial double bond for B-N.

*Vi, out. nocs*  
*UK, CKP*

C.A. 1982, 97, N 24

$\text{BH}(\text{NH}_2)_2$

Отмеч. 14563) 1982

24 Б298. Микроволновые спектры и молекулярная структура  $\text{BH}(\text{NH}_2)_2$ . Thorne L. R., Gwinn W. D. Microwave spectra and molecular structure of  $\text{BH}(\text{NH}_2)_2$ . «J. Amer. Chem. Soc.», 1982, 104, № 14, 3822—3827 (англ.)

Измерены в области частот 8—48 ГГц МВ-спектры борандиамина,  $\text{BH}(\text{NH}_2)_2$  (I) и его 7 изотопич. производных в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен в приближении модели жесткого волчка. Вращательные постоянные (I) в (МГц) равны  $A=53754,360$  (710),  $B=9092,560$  (68),  $C=7777,600$  (29). По эффекту Штарка 2-го порядка определен дипольный момент  $|\mu|=1,245$  (17) D. Полученные данные использованы для определения эффективной и замещ. молек. структур I. Молекула обладает плоской структурой  $C_{2v}$ -симметрии с цис- и транс-положениями атомов водорода аминогруппы относительно направления бор-связанный водород.

С. Н. Мурзин

М.П;

Х. 1982, 19, N 24

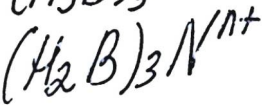
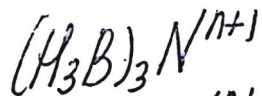


BH(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub> (Dipole 14563) 1982

/ 97: 30519w Microwave spectra and molecular structure of boranediamine. Thorne, L. R.; Gwinn, W. D. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1982, 104(14), 3822-7 (Eng). The effective mol. structure of boranediamine, BH(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>, was detd. from the microwave spectra of 8 isotopic species. The mol. has planar C<sub>2v</sub> symmetry with  $r(\text{B-H}) = 1.193 \pm 0.001 \text{ \AA}$ ,  $r(\text{B-N}) = 1.418 \pm 0.001 \text{ \AA}$ ,  $r(\text{N-H}_{\text{cis}}) = 1.005 \pm 0.005 \text{ \AA}$ ,  $r(\text{N-H}_{\text{trans}}) = 1.000 \pm 0.003 \text{ \AA}$ ,  $\angle \text{NBN} = 122.0 \pm 0.3^\circ$ ,  $\angle \text{BNH}_{\text{cis}} = 121.1 \pm 0.1^\circ$ , and  $\angle \text{BNH}_{\text{trans}} = 123.7 \pm 0.6^\circ$ , where the amine hydrogens are cis or trans relative to the B-bonded H. The dipole moment is  $1.245 \pm 0.017 \text{ D}$ .

уб ерекп,  
снупуи-  
ноеннои.

C.A. 1982, 97, N4



Omnueck 16400

1983

Cuthbertson A. F.,  
GlideWell Ch.,

смыкнута

J. Mol. Struct., 1983,  
92, N 3-4, Suppl. "Theo-  
chem", 9, N 3-4, 353-359



мономер  
димер

структура

и  
стабильн.

C. A. 1983, 98, 420

1983

98: 167238u. Quantum study of the ground state of a series of unsaturated boron-nitrogen compounds by the MNDO method. I. Geometries and stabilities. Maouche, Boubekeur; Gayoso, Jose (Inst. Chim., Univ. Sci. Technol. Houari Boumed., Alger, Algeria). *Int. J. Quantum Chem.* 1983, 23(3), 891-904 (Eng). A MNDO study of mol. geometries, enthalpies of formation and atomization, bond sepn., and hydrogenation of a series of unsatd. B-N compds., linear with 2 and 3 members and cyclic with 3, 4, 5, and 6 members are presented. For all these mols., MNDO calcns. are in excellent agreement with available ab initio calcns. or exptl. data. The high rotational barrier in aminoborane  $H_2BNH_2$ , 30.6 kcal/mol. and the length of bond in iminoborane  $HBNH$ , 1.183 Å, imply strong double and triple BN bond character in these mols. In the odd membered heterocycles, examn. of the mol. geometries and energies of equil. states shows that in all cases, the stability of the compds. grows with the no. of B atoms and decreases with that of the N atoms. Moreover, compared study of the 2 BN-fulvenes with their homologous hydrocarbon shows that only BN (BB)-fulvene has a polyenic structure similar to that of fulvene.

$N(BH_2)_3$

1983

15 Б97. Устойчивость и геометрия трибориламинов и соединений, содержащих  $B_6$ -циклы. The stabilities and geometries of triborylamines and of compounds containing the  $B_6$  moiety. Neckel A., Polesak H., Perkins P. G. «Inorg. chim. acta», 1983, 70, № 2, 255—259 (англ.)

Квантовохимически проведен анализ устойчивости различных геометрич. конфигураций  $N(BH_2)_3$  и  $B_6(NH_2)_6$ . Из сравнения данных, полученных для плоской, плоской с одним скрученным фрагментом  $BH_2$ , пирамидальной и двух различных димерных конфигураций, получено, что наиболее устойчивой является структура трибориламина, в к-рой фрагмент  $N(BH_2)_2$  плоский, а третья группа  $BH_2$  повернута таким образом, что ее плоскость ортогональна плоскости фрагмента  $N(BH_2)_2$ . Аналогичные расчеты проведены для соединений, содержащих циклы из 6 атомов бора, для плоской скрученной, цепных, октаэдрич. конфигураций и конфигурации «ванны». Установлено, что наиболее устойчивыми конфигурациями таких циклов являются плоский и скрученный  $B_6$ -циклы.

В. И. Пергушов

геометр.,  
структура

(4) 

X. 1983, 19,  
N 15

$(\text{BH}_2)_3\text{N}$

$\text{B}_6(\text{NH}_2)_6$

констр.,  
структура,  
стабильность

1983

99: 28249f The stabilities and geometries of triborylamines and of compounds containing the  $\text{B}_6$  moiety. Neckel, A.; Polesak, H.; Perkins, P. G. (Inst. Phys. Chem., Univ. Vienna, Vienna, Austria). *Inorg. Chim. Acta* 1983, 70(2), 255-9 (Eng). The geometries and relative stabilities are calcd. of some triborylamines and of some systems based on the  $\text{B}_6$  ring. The triborylamine  $\text{N}(\text{BH}_2)_3$  possesses a stable structure when 2 of the  $\text{N}(\text{BH}_2)$  units lie in the same plane, while the third is rotated so that the H atoms are orthogonal to the plane. This is more stable than the all-planar structure. The parent compd.  $\text{N}(\text{BH}_2)_3$  is also shown to be intrinsically thermodyn. stable. Possible dimeric structures for this triborylamine are more stable than 2 mol of the monomer. However, among the dimers, a structure in which the bridging entities between the units are H atoms is shown to be more stable than one in which the bridging is brought about by the N atoms. The most stable structure in the gas phase of the compd.  $\text{B}_6(\text{NH}_2)_6$  is that in which the  $\text{B}_6$  ring adopts a planar configuration. This is more stable than either a chair configuration, a boat configuration or an octahedral cage arrangement of B atoms.

C. A. 1983, 99, 14

УБНУ

[Ом. 19284]

1984

Бразил.  
Сиренг,  
кв. мек.  
расчет.

De Frees D. J.,  
Birkley J. S., et al.,  
J. Chem. Phys., 1984,  
80, n8, 3720-3725.

$BH_2NH_2$

1984

Galasso V.

meop.  
pacrem

J. Chem. Phys. 1984,  
80 (1), 365-371.

● (corr.  $N_2H_4$ ; III)

$\text{BH}_3 \cdot \text{N}_2$

1984

Garcia-Leigh A.,  
Murrell J. N.

publ. overest.  
w. overest.,  
meop.  
p. overest.

Croat. chem. acta,  
1984(1985); 57, N 5,  
879-886.  
(see  $\text{BF}_3 \cdot \text{BF}$ ; III)



УБВ

[ОМ. 18491]

1984

Зюбина Т. С., Чаркин  
О. П.,

теор. расчет  
Энергии  
ионизации,  
Vo

Ж. Мортан. Жилин,  
1984, 29, N 3, 598-606.

$B(NH_2)_2^+$  1985

Coffey Jeffrey L.,  
Petersen John D., et al.

рефер., J. Mol. Struct., 1985,  
структ., 122, N 1-2, Suppl.:

Уо; Theochem, 23, N 1-2, 115  
-121.

(ср.  $Hl(NH_2)_2^+$ ; III).

$H_2N: BH_2$

(Im 21336)

1985

102: 122330c The infrared spectrum of gaseous aminoborane,  $H_2N: BH_2$ : location of the fundamentals and rotational structure in the  $4_1^1$  band (BN stretching vibration at  $1337\text{ cm}^{-1}$ ): Gerry, M. C. L.; Lewis-Bevan, W.; Merer, A. J.; Westwood, N. P. C. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 110(1), 153-63 (Eng). The IR spectrum of gaseous aminoborane,  $H_2N: BH_2$  was obsd. for the 1st time, following controlled thermal decompn. of  $NH_3BH_3$  in a flow system. The positions of the 9 vibrational fundamentals lying above  $800\text{ cm}^{-1}$  was detd. from medium-resoln. Fourier transform spectra, and the rotational structure of the  $\nu_1$  fundamental (the BN stretching vibration at  $1337.474\text{ cm}^{-1}$ ) was studied at high resoln. The  $4_1^1$  level is extensively perturbed, and anal. of the perturbations permitted the positions of the 3 lowest-lying fundamentals (which are either IR inactive or below the wave no. range of the spectrometer) to be estd. An accurate set of rotational consts. for the ground level of the mol. was obtained.

UK chemp,  
Vi;

C. A. 1985, 102, N 14.

$H_2N=BNH_2$

[Um. 21336] 1985

18 Б1270. Инфракрасный спектр газообразного аминоборана ( $H_2N=BNH_2$ ): отнесение основных полос и вращательная структура полосы  $4_0^1$  валентного колебания связи BN при  $1337\text{ см}^{-1}$ . The infrared spectrum of gaseous aminoborane,  $H_2N=BNH_2$ : location of the fundamentals and rotational structure in the  $4_0^1$  band (BN stretching vibration at  $1337\text{ см}^{-1}$ ). Gerry M. C. L., Lewis-Bevan W., Merer A. J., Westwood N. P. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 1, 153—163 (англ.)

На фурье-спектрометрах с разрешением 0,05 и  $0,004\text{ см}^{-1}$  исследован ИК-спектр поглощения молекулы  $NH_2BH_2$ , полученной термич. разложением молекулы  $NH_3BH_3$  при  $400^\circ\text{C}$ . Идентифицированы полосы основных колебаний. Выполнен анализ вращат. структуры полосы  $\nu_4$  при  $1337\text{ см}^{-1}$ . Определены значения вращат. постоянных и постоянных кватичного центробежного искажения. Обнаружена запрещенная полоса  $\nu_6$  ( $A_2$ ) в обл.  $700\text{—}830\text{ см}^{-1}$ , появление к-рой обусловлено кориолисовым резонансом.

Е. В. Алиева

(Pi)  
X. 1985, 19, N 18



[Dm. 21 336]

1985

9 Л178. ИК-спектр поглощения газовой фазы  $\text{H}_2\text{N}=\text{BH}_2$ : частоты фундаментальных полос и вращательная структура полосы  $\nu_4$  ( $1337 \text{ cm}^{-1}$ ). The infrared spectrum of gaseous aminoborane,  $\text{H}_2\text{N}=\text{BH}_2$ : Location of the fundamentals and rotational structure in the  $4_0^1$  band (BN stretching vibration at  $1337 \text{ cm}^{-1}$ ). Gerry M. C. L., Lewis-Bevan W., Merer A. J., Westwood N. P. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 1, 153—163 (англ.)

С разрешением  $0,05 \text{ cm}^{-1}$  получен ИК-спектр поглощения  $\text{H}_2\text{N}=\text{BH}_2$ . Измерены положения и дана интерпретация 9 колебательно-вращательных полос в области  $700\text{—}3900 \text{ cm}^{-1}$ . С более высоким разрешением ( $0,004 \text{ cm}^{-1}$ ) получены спектры полос  $\nu_4 A_1$  (с началом  $\nu_0=1337,474 \text{ cm}^{-1}$ ) и  $\nu_1 A_1$ ,  $\nu_9 B_2$  ( $\sim 3500 \text{ cm}^{-1}$ ) и дан анализ вращательной структуры полосы  $\nu_4$ . Отмечено, что структура различных подполос в  $\nu_4$  возмущена взаимодействиями Ферми и Корнголиса; для ряда слу-

$\nu_i, m, n$

ср. 1985, 18, N 9

чаев дана оценка имеющихся возмущений. По измеренным частотам вращательных линий в полосе  $\nu_4$  (частично и  $\nu_9$ ) и литер. данным по микроволн. спектру  $\text{H}_2\text{N}^{11}\text{BH}_2$  рассчитаны комбинационные разности для уровней с  $K \leq 10$  и  $J \leq 30$ , по которым с большой точностью определены вращательные постоянные основного (и некоторые постоянные возбужденного  $4^1$ ) состояний. В. К.



Om. 234641

1985

$H_2NBH_2$

Westwood N.P.C.,  
Westbury N.H.,

meop-  
phen

J. Amer. Chem. Soc.  
1985, 108, N5, 891-894.

ВНЧ

10м - 24/195

1986

Чаркин О. П.,  
Зюбина Т. С.

расчёт  
Евро и  
барьер  
измер

Координаты, измерения,  
1986, 12, N 8, 1011-1037.



$\text{BH}_2 \cdot \text{NH}_2$

[Om. 23582]

1926

$\text{BH}(\text{NH}_2)_2$

Ha Tae-Kye,

meop  
pacem

J. Mol. Struct. Theo-  
Chem, 1986, 136, N1-2,

165- ● 176.

HB-NH

H<sub>2</sub>B-NH<sub>2</sub>

М.П.

X. 1989, N 12.

1986

12 Б1029. Неэмпирическое исследование электронной структуры и энергии иминоборана, аминоборана и их димеров. Ab initio studie elektronových struktur a energií iminoboranu, aminoboranu a jejich dimerů / Hálová Olga // Sb. UŠCHT Praze. P.— 1986.— 9.— С. 5—16.— Чеш.; рез. англ.

Неэмпирическим методом ССП при фиксированных длинах связей проведен расчет молекул HB—NH (I), H<sub>2</sub>B—NH<sub>2</sub> (II) и их димеров. Миним. энергией обладает линейная форма I и плоская форма II. Циклич. димер I симметрии D<sub>2h</sub> имеет R(B—N)=0,1630 нм, энергия стабилизации равна 163 ккал/моль. Циклич. димер II с атомами водорода, лежащими в плоскости, перпендикулярной плоскости цикла, имеет энергию стабилизации 235 ккал/моль.

В. А. Болотин

$\text{NH}_2\text{BH}_2$

(On 28455)

1986

Хелпне чегу,  
неоп. пацем

105: 232661f Estimated core electron binding energies and their application in the interpretation of valence ionization potentials. Jolly, William L. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Phys. Chem.* 1986; 90(26), 6790-3 (Eng). Empirical group shifts for estn. of the core electron binding energies of compds. of 14 elements are evaluated. For elements of the 1st row of the periodic table, simple 1-parameter group shifts are inadequate for estg. core binding energies of highly pos. charged atoms with polarizable ligands. In the case of C 1s binding energies, a method involving 2 parameters - an "electronegativity" parameter and a "polarizability" parameter - is devised which significantly improves the accuracy of the predictions. The N 1s binding energies of the aminoboranes,  $\text{NH}_2\text{BH}_2$ ,  $\text{N}(\text{CH}_3)_2\text{BF}_2$ ,  $\text{NH}(\text{CH}_3)\text{BF}_2$ , and  $\text{NH}_2\text{BF}_2$ , are estd. These data, when combined with the N  $p\pi$  ionization potentials, leads to the conclusion that there is an important degree of N-B  $\pi$  bonding in all of these mols.



C.A. 1986, 105, N 26

$N_2BH_3$

Am 24 999

1986

/ 106: 90504b Ab-initio study of the structure of boradiazirine. Kanev, I.; Monev, V. (Inst. Org. Chem., 1040 Sofia, Bulg.). *Dokl. Bolg. Akad. Nauk* 1986, 39(8), 49-51 (Eng). For boradiazirine (I) ( $N_2BH_3$ ) [i.e., diazaboriridine], the mol. structure, total energy, and dipole moment were obtained in ab-initio MO calcns. with STO-3G and 4-31G basis sets. The nonplanar mol. structure ( $C_s$  symmetry) of I is more stable than the planar structure ( $C_{2v}$  symmetry). The N-connected H atoms lie considerably above the ring plane, and the BH bond is only slightly under the ring plane.

неопре-  
пачен  
смысл

C.A. 1987, 106, n 12

$H_2B-N-NH_2$

1986

16 Б1037. Капто-дативная стабилизация пуш-пульных радикалов с центром на азоте. Изучение неэмпирическим методом ССП. Capto-dative stabilization in nitrogen-centred push-pull radicals: an ab initio CSF-MO study. Kost Daniel, Raban Morton, Aviram Kalman. «J. Chem. Soc. Chem. Commun.», 1986, № 4, 346—348 (англ.)

Неограниченным методом Хартри-Фока в базисе 4-31ГФ оптимизированы геометрии борилгидразильного  $H_2B-N-NH_2$  (I) и формилгидразильного  $HCO-N-NH_2$  (II) радикалов. Найдено, что равновесная конфигурация II планарная ( $C_s$ ), а I — неплоская (симметрия  $C_s$ , однако атомы H аминогруппы не лежат в плоскости NNCHO). Барьер вращения вокруг связи NN в II составляет 20,6 ккал/моль, барьер инверсии через конфигурации с линейной группировкой NNC превышает 30 ккал/моль.

В. Я. Беспалов

коментр., стр. 10

Х. 1986, 19, № 16

$\text{NH}_2\text{BH}_2$

$\text{NH}_3\text{BH}$

1987

106: 185041n Theory and experiment in concert: evidence for stable ammoniaborene dication ( $\text{H}_3\text{NBH}_2^{2+}$ ). Drewello, Thomas; Eech, Wolfram; Lebrilla, Carlito B.; Stahl, Daniel; Schwarz, Helmut (Inst. Org. Chem., Tech. Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 12 Fed. Rep. Ger.): *J. Am. Chem. Soc.* 1987, 109(10), 2922-4 (Eng). The potential energy surfaces of the mono- and dications of  $\text{NH}_2\text{BH}_2$  and  $\text{NH}_3\text{BH}$  were explored by high level ab initio calcs. Although 2 min. were located on either surface, corresponding to  $\text{NH}_2\text{BH}_2^{2+}$ ,  $\text{NH}_3\text{BH}^{2+}$ ,  $\text{NH}_2\text{BH}_2^{2+}$ , and  $\text{NH}_3\text{BH}^{2+}$ , the theor. anal., in conjunction with charge stripping mass spectrometry, suggested that the only dication formed is that of  $\text{NH}_3\text{BH}_2^{2+}$ , requiring a  $Q_{\text{min}}$  value of 15.2 eV.  $\text{NH}_3\text{BH}_2^{2+}$  is predicted to be 60.6 kcal/mol more stable than  $\text{NH}_2\text{BH}_2^{2+}$  which is due to the powerful donor/acceptor interactions operative in  $\text{NH}_3\text{BH}_2^{2+}$ . Comparison of the  $\text{BNH}_3^{2+}/\text{BNH}_2^{2+}$  with electronic  $\text{C}_2\text{H}_5^{2+}/\text{C}_2\text{H}_4^{2+}$  is made.

(ab initio  
расчет,  
стабильность  
ионов)

C.A. 1987, 106, N 22

HBNH

1987

H<sub>2</sub>BNH<sub>2</sub>

U UX gunc

NH

ab initio

pacem

111:45490m Ab initio study of electronic structure and energy of iminoborane, aminoborane, and their dimers. Halova, Olga (VSCHT, Czech.). Sb. Vys. Sk. Chem.-Technol. Praze, Fyz. Mater. Merici Tech. 1986 (Pub. 1987). P9, 5-16 (Czech). Total electronic energy of mols. contg. besides B and H atoms also N atoms was calcd. The simplest types are: iminoborane HB-NH, aminoborane H<sub>2</sub>B-NH<sub>2</sub> and their dimers in several various structural configurations. From charge distribution follows the polar nature of all considered mols. Dimerization contributes little to polarization.

C.A. 1989, III, 26

$BH_3 \cdot NH_3$

1987

111: 28744e Calculation of electronic structure of the molecule of borazane ( $BH_3-NH_3$ ). Halova, Olga (VSCIT, Prague, Czech.). Sb. Vys. Sk. Chem.-Technol. Praze, Fyz. Mater. Merici Tech. 1986 (Pub. 1987). P9, 17-24 (Czech). The structure and charge distribution in borazane  $BH_3-NH_3$  were studied by non-empirical SCF-MO method by means of Gaussian AOs. The total electronic energy of the borazane was calcd. in dependence on the B-N bond length. Polarity and dipole moment of the borazane in two geometrical configurations were detd.

(71. эмпирика)  
мод. расчет

с. А. 1989, III, № 4



$B_2 N_2 H_4$

1987

Jourany C., Barthelat J.C.,  
et al.

ce.n.  
Chem. Phys. Lett., 1987,  
136, N 1, 52-58.

(see  $B_2 H_2$ ; III)

$B_2NH_3$

1987

Jouany C., Barthelat  
J.C., et al.

et al.

Chem. Phys. Lett., 1987,  
136, N 1, 52-58.

(see.   $B_2H_2$ ; III)

$H_3 B_2 N$

1987

Jouany C., Barthelat  
J. C., et al.

M. n.

Chem. Phys. Lett., 1987,  
136, N 1, 52-56.

(see  $H_2 B_2$  ; III)

МВНМ

От 28757

1987

7 Л213. Детектирование HBNH методом ИК диодной лазерной спектроскопии. Detection of HBNH by infrared diode laser spectroscopy. Kawashima Yoshiyuki. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 11, 6331—6333 (англ.)

С помощью ИК диодного лазерного спектрометра получен спектр поглощения молекул HBNH, образующихся в плазме тлеющего электрич. разряда в смеси  $B_2H_6-NH_3-He$  (0,06—0,12—0,12 мм рт. ст.). Зарегистрировано 18 переходов  $P$ - и  $Q$ -ветвей полосы  $\nu_3$  в области 1759—1822  $cm^{-1}$  для  $H^{11}BNH$  и 12 переходов в области 1788—1854  $cm^{-1}$  до  $H^{10}BNH$ . Определены основная частота, константа центробежного искажения и вращательная постоянная моды  $\nu_3$  основного состояния обоих изомеров. Попытка получить чисто вращательный спектр HBNH в микроволн. области не удалась, предположительно — вследствие малости дипольного момента молекулы — ( $<0,1 D$ ). Библ. 33.  
С. В. Литке

М.П.

Ф. 1988, 18, № 7

НВНН

от 28751

1987

13 Б1312. Обнаружение НВНН методом инфракрасной полупроводниковой лазерной спектроскопии. Detection of HBNH by infrared diode laser spectroscopy. Kawashima Y., Kawaguchi K., Hirota E. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 11, 6331—6333 (англ.)

Измерена (полупроводниковый лазерный спектрометр) вращат. структура полосы  $\nu_3$  молекул  $\text{H}^{11}\text{BNH}$  и  $\text{H}^{10}\text{BNH}$  в диапазоне  $1755\text{—}1860\text{ см}^{-1}$ . Молекулы НВНН образовывались в плазме разряда переменного тока через смесь диборана и аммиака в гелии (парц. давл., соотв., 0,06; 0,12 и 0,12 мм) или смесь диборана с окисью азота. Начало полосы,  $\nu_0$ , и значения вращат. постоянных  $B''$ ,  $D''$ ,  $B'$ ,  $D'$  (в  $\text{см}^{-1}$ ):  $\text{H}^{11}\text{BNH}$  — 1786,1931; 1,09934;  $1,7 \cdot 10^{-6}$  1,09348;  $1,7 \cdot 10^{-6}$ ;  $\text{H}^{10}\text{BNH}$  — 1823,4011; 1,13490;  $1,9 \cdot 10^{-6}$ ; 1,12883;  $1,9 \cdot 10^{-6}$ ; постоянная колебательно-вращат. взаимодействия  $\alpha_3 = 5,856 \cdot 10^{-3}\text{ см}^{-1}$ . Величина  $\nu_3$  сопоставлена с полу-

М.А.

Х. 1988, 19, N 13

ченной методом ИК-спектроскопии для HBNH в Аг-  
матрице, а также с данными неэмпирич. расчетов. Ис-  
пользуя значения  $R(B-N)$  и  $R(N-H)$ , найденные в не-  
эмпирич. расчетах и эксперим. значение  $B$ , рассчитано  
 $R(B-N) = 1,2381 \text{ \AA}$ . Предпринята попытка получить чи-  
сто вращат. спектр поглощения в предсказанном диапа-  
зоне ( $\sim 66 \text{ гГц}$ ). Неудача связывается с низкой величи-  
ной дипольного момента молекулы (по оценкам  
 $< 0,1 \text{ D}$ ). В. М. Ковба

HBNH

1987

108: 64897d Detection of iminoborane(HBNH) by infrared diode laser spectroscopy. Kawashima, Yoshiyuki; Kawaguchi, Kentarou; Hirota, Eiji (Ikutoku Tech. Univ., Atsugi, Japan 243-02). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(11), 6331-3 (Eng). The IR spectrum of a transient species HBNH was obsd. in the gas phase using a diode laser spectrometer. The HBNH mol. is formed in an a.c. discharge plasma of a B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>/NH<sub>3</sub> or B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>/NO mixt. The  $\nu_3$  band origin and the rotational consts. of H<sup>11</sup>B<sup>14</sup>NH are  $\nu_0 = 1786.193\ 08(72)$ ,  $B_0 = 1.099\ 335(81)$ , and  $B_3 = 1.093\ 431(72)$  cm<sup>-1</sup>, with 3 std. deviations in parentheses. The  $\nu_3$  band of H<sup>10</sup>B<sup>14</sup>NH was also obsd. and analyzed.

UK, Vi, Gra -  
Usam. no cm.

C.A. 1988, 108, NS

$BH_3NH_2^-$

1987

Ouassas A.,

El Moutadi et al.

meop.  
paerem

THEOCHEM 1987, 37  
(3-4), 255-60.

(cell.  $BH_3H^-$ ; III)



$\text{NH}_3$   $\text{BH}_2$

1987

§ 10 Д146. Структура системы аммиак — борильный радикал ( $\text{BH}_2\text{NH}_3$ ) неорганического аналога этильного радикала. Неэмпирическое исследование. The structure of the ammonia — boryl radical ( $\text{BH}_2\text{NH}_3$ ), an inorganic analogue of the ethyl radical. a non empirical study. Russo Nino, Subra Robert, Toscano Marirosa, Barone Vincenzo. «J. Mol. Struct. Theochem», 1987, 151, 365—371 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в рамках неограниченного хартри-фоковского подхода в базисе 6-31ГФ\* исследовано электронное строение системы аммиак — борильный радикал ( $\text{BH}_2\text{NH}_3$ ) (I). Приведены равновесная геометрия различных конформаций, потенц. кривая для вращения вокруг связи В-Н. Обнаружено, что энергии конформеров близки друг к другу. Пирамидализация радикальной группы  $\text{BH}_2$  в I больше, чем группы  $\text{CH}_2$  в этильном радикале и  $\text{CH}_2\text{NH}_3$ . Обнаружено, что инверсия по радикальному центру харак-

М.П.

ф. 1987, 18, N10

характеризуется довольно большим барьером (19 кДж/моль), тогда как барьер внутреннего вращения невелик (около 5 кДж/моль), т. е. не должно быть сильной связи между внеплоскостной деформацией и внутренним вращением.

В. Л. Лебедев



$\text{BH}_2\text{NH}_3$

1987

/ 107: 103059h The structure of the ammonia-boryl radical ( $\text{BH}_2\text{NH}_3$ ), an inorganic analogue of the ethyl radical. A non empirical study. Russo, Nino; Subra, Robert; Toscano, Marirosa; Barone, Vincenzo (Dip. Chim., Univ. Calabria, I-87030 Arcavacata di Rende, Italy). *THEOCHEM* 1987, 36, 365-71 (Eng). The structure of the ammonia-boryl radical ( $\text{BH}_2\text{NH}_3$ ) was studied at the UHF-SCF level employing the 6-31G\* basis set. Complete geometry optimization was performed on various possible conformations and the results suggest that the distortion of the  $\text{BH}_2$  group is higher than the corresponding distortion of the  $\text{CH}_2$  group in the isoelectronic  $\text{CH}_2\text{CH}_3$  and  $\text{CH}_2\text{NH}_3$  radicals. The results confirm the interpretation of the ESR spectrum, which assumes a nonplanar B radical center.

теоретич,  
емпірична

C.A. 1987, 107, N 12

$\text{BH}_2\text{NH}_3$

DM-27 100

1987

21 Б1021. Структура аммоний-борильного радикала  $\text{BH}_2\text{NH}_3$ , неорганического аналога этильного радикала. Неэмпирическое исследование. The structure of the ammonia-boryl radical ( $\text{BH}_2\text{NH}_3$ ), an inorganic analogue of the ethyl radical. A non empirical study. Russo Nino, Subra Robert, Toscano Marirosa, Barone Vincenzo. «J. Mol. Struct. Theochem.», 1987, 151, 365—371 (англ.)

Неограниченным методом ССП в базисе 6—31 ГФ\* изучена структура радикала  $\text{BH}_2\text{NH}_3$ . Проведена полная оптимизация геометрии. Наиболее устойчивой найдена шахматная конформация, с почти тетраэдрич. структурой радикального центра  $\text{BH}_2$ . Степень пирамидализации группы  $\text{BH}_2$  больше, чем группы  $\text{CH}_2$  в изоэлектронных радикалах  $\text{CH}_2\text{CH}_3$  и  $\text{CH}_2\text{NH}_3$ . Найдено, что возможно почти свободное вращение вокруг связи В—N, однако инверсия радикального центра имеет барьер 19 кДж/моль. Теор. результаты хорошо согласуются с данными ЭПР в матрицах.

Н. В. Харчевникова

структура

X. 1987, 19, n21

$\text{BH}_2\text{NH}_2$

1987

№11 Л186. Микроволновый спектр и структура молекулы аминоборана ( $\text{BH}_2\text{NH}_2$ ). Microwave spectrum and molecular structure of aminoborane,  $\text{BH}_2\text{NH}_2$ . Sugie Masaaki, Takeo Harutoshi, Matsumura Chi. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 123, № 2, 286—292 (англ.).

В диапазоне 8—52 ГГц исследованы МВ-спектры 5 изотопич. разновидностей молекулы  $\text{BH}_2\text{NH}_2$ . Идентифицированы линии вращательных переходов с  $J \leq 30$  в основном колебательном состоянии, а также квадрупольная СТС ряда линий. Определены значения вращательных постоянных, постоянных кватерного центробежного искажения и постоянных квадрупольной связи ядер азота и бора. Вычислены структурные  $r_e$ -параметры:  $\text{BN} = 1,391$ ,  $\text{BH} = 1,195$ ,  $\text{NH} = 1,004$  Å,  $\text{HBN} = 122,2^\circ$ ,  $\text{HNN} = 114,2^\circ$ .

М. Р. Алиев

М.П.

ср. 1987, 18, №11



1987

21 Б1291. Микроволновый спектр и молекулярная структура аминоборана,  $\text{BH}_2\text{NH}_2$ . Microwave spectrum and molecular structure of aminoborane,  $\text{BH}_2\text{NH}_2$ . Sugie M., Takeo H., Matsumura C. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 123, № 2, 286—292 (англ.)

На автоматизированном штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 8—52 ГГц измерены вращат. спектры пяти изотопич. образцов аминоборана,  $\text{BH}_2\text{NH}_2$ ,  $^{10}\text{BH}_2\text{NH}_2$ ,  $\text{BH}_2^{15}\text{NH}_2$ ,  $\text{BD}_2\text{NH}_2$  и  $\text{BH}_2\text{ND}_2$ , в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен с учетом квартичного и секстичного центробежного искажения, В- и  $^{14}\text{N}$ -ядерных квадрупольных взаимодействий. Для нормального изотопич. образца определен дипольный момент  $\mu_a = 1,844(15) \text{ D}$ . С учетом расчетов МО установлена симметрия  $C_{2v}$  молекулы в равновесном состоянии. На основе полученных МВ-данных определена полная замещенная структура молекулы  $r(\text{BN}) = 1,391(2) \text{ \AA}$ ,  $r(\text{BH}) = 1,195(4) \text{ \AA}$ ,  $r(\text{NH}) = 1,004(2) \text{ \AA}$ ,  $\angle \text{HBN} = 122,2(2)^\circ$ ,  $\angle \text{HNH} = 142,2(2)^\circ$ .

С. Н. Мурзин

X. 1987, 19, № 21

M. H.

$\text{BH}_2\text{NH}_2$

1987

| 107: 14841q Microwave spectrum and molecular structure of aminoborane,  $\text{BH}_2\text{NH}_2$ . Sugie, Masaaki; Takeo, Harutoshi; Matsumura, Chi (Natl. Chem. Lab. Ind., Yatabe, Japan 305). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 123(2), 286-92 (Eng). The microwave spectra of 5 isotopic species of  $\text{BH}_2\text{NH}_2$  were obsd. The rotational consts., centrifugal distortion consts., and nuclear quadrupole coupling consts. of  $^{11}\text{B}$  and  $^{14}\text{N}$  were detd. from the spectra. The planarity and symmetry of the mol. were confirmed by the measurements of inertia defects, dipole components, and statistical spin wt. due to the 4 H nuclei. The complete  $r_s$  structure detd. from the rotational consts. is:  $r(\text{BN}) = 1.391(2)$  Å,  $r(\text{BH}) = 1.195(4)$  Å,  $r(\text{NH}) = 1.004(2)$  Å,  $\angle\text{HBH} = 122.2(2)^\circ$ , and  $\angle\text{HNN} = 114.2(2)^\circ$ .

(ув спектры)  
структурн.  
параметры

С.А. 1987, 107, N2

$\text{BH}_2\text{NH}_2$  (Om-26863) 1987

Yugie M., Takeo H., et al.,  
J. Mol. Spectrosc., 1987,  
монитор.  
структура 123, N 2, 286-292.



N. B. H. 3

[om. 29836]

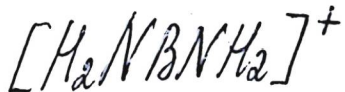
1988

Forcada M. L., Moscardo F.  
et al.,

теор. исл. и  
стабильн.

J. Mol. Struct. Theochem.,  
1988, 166, 293-299.





1988

111: 121240x Electronic structure and bonding in diamidoboron cations. A molecular orbital study of diamidoboron(1+)  $[H_2NBNH_2]^+$ . Silaghi-Dumitrescu, Ioan; Haiduc, Ionel (Chem. Dep., Babes-Bolyai Univ., R-3400 Cluj-Napoca, Rom.). *Rev. Roum. Chim.* 1988, 33(9-10), 851-6 (Eng). For  $(H_2NBNH_2)^+$  (I), the total energy, MO shapes, MO electron populations, Wiberg bond indexes, and B-N force const. and vibrational frequency were obtained in EHMO and CNDO/2 calcns. In I, the HOMO's are  $\pi$ -type, and the conformation is  $D_{2d}$  allene-type.

эл. структура,  
хим. свойства  
мор. расей

с.А. 1989, III, N14

$BH_4 N^+$  | om. 30490 | 1988

$(BH_2 NH_2 NH_2^+)$

Jacox M.E.,

Ti, Pi; J. Phys. and Chem. Ref.  
Data, 1988, 17, n2, 468.

$H_2NBNH_2$

М. 30293

1988

4 Б1043. Электронная структура и связывание в диамидоборных катионах. Исследование методом молекулярных орбиталей  $[H_2NBNH_2]^+$ . Electronic structure and bonding in diamidoboron cations. A molecular orbital study of  $[H_2NBNH_2]^+$  / Silaghi-Dumitrescu Ioan, Haiduc Ionel // Rev. roum. chim.— 1988.— 33, № 9—10.— С. 851—856.— Англ.

Расширенным методом Хюккеля и методом ППДП/2 проведены расчеты плоской  $D_{2h}$  (I), алленоподобной  $D_{2h}$  (II) и неплоской  $C_{2h}$  (III) конформаций катиона  $H_2NBNH_2$ . Найдено, что конформер II на 11 ккал/моль более стабилен, чем I, к-рый в свою очередь существенно стабильнее конформера III. Более высокая стабильность II объяснена более эффективным  $\pi$ -связыванием в нем. Анализ индексов Уайберга в II свидетельствует о существенном вкладе  $\pi$ -связывания в связь BN. Порядок связи BN очень хорошо согласуется с оценкой силовой постоянной этой связи по ф-ле Зиберта (см. // Z. anorg. allg. Chem.— 1953.— 273.— С. 170; 1953.— 274.— С. 24, 34).

И. Н. Сенченя

М. П.

X. 1989, № 4

ЛНУ ВЛУ

1989

5 Б1092. Теоретическое исследование нежесткого вращения тетраэдрических катиона и аниона в молекуле  $\text{NH}_4\text{BH}_4$  / Баранов Л. Я., Чаркин О. П. // Ж. структур. химии.— 1989.— 30, № 5.— С. 27—34.— Рус.

В приближениях ССП/3-21Г (с полной оптимизацией геометрии) и МПЗ/6-31Г\* (для особых точек) рассчитаны участки потенциальной Пв молекулы  $\text{NH}_4\text{BH}_4$ , отвечающие нежестким движениям катиона  $\text{NH}_4^+$  и аниона  $\text{BH}_4^-$  относительно друг друга. Показано, что барьеры этих движений малы (несколько килокалорий) и молекула является очень нежесткой к некоторым типам внутримолек. вращений (вокруг связи В—N; с изменением дентатности катиона и аниона; повороты их, способствующие образованию одних и разрыву других связей  $\text{H}_3\text{N—H...H—BH}_3$ ). Обсуждена сильная геометрич. деформация ионов  $\text{NH}_4^+$  и  $\text{BH}_4^-$ , поляризация у них электронной плотности, взаимодействие Н—Н между атомами водорода, принадлежащими разным ионам. Подчеркнуто, что структурная нежесткость молекулы  $\text{NH}_4\text{BH}_4$  тесно связана с ее стабильностью к распаду.

Резюме

М.П.

Х. 1990, N 5

НН<sub>4</sub>ВН<sub>4</sub>

1989

2 Д75. Теоретическое исследование нежесткого вращения тетраэдрических катиона и аниона в молекуле НН<sub>4</sub>ВН<sub>4</sub> / Баранов Л. Я., Чаркин О. П. // Ж. структур. химии.— 1989.— 30, № 5.— С. 27—34

В приближениях ССП/3—21ГФ (с полной оптимизацией геометрии) и МПЗ/6-31ГФ\* (для особых точек) рассчитаны участки потенц. поверхности молекулы НН<sub>4</sub>·ВН<sub>4</sub>, отвечающие нежестким движениям катиона НН<sub>4</sub><sup>+</sup> и аниона ВН<sub>4</sub><sup>-</sup> относительно друг друга. Показано, что барьеры этих движений малы (несколько килокалорий), и молекула является очень нежесткой к некоторым типам внутримолекулярных вращений (вокруг связи В—N; с изменением дентатности катиона и аниона; повороты их, способствующие образованию одних и разрыву других связей Н<sub>3</sub>N—Н... Н—ВН<sub>3</sub>). Обсуждаются сильная геометрич. деформация ионов НН<sub>4</sub><sup>+</sup> и ВН<sub>4</sub><sup>-</sup>, поляризация у них электронной плотности, взаимодействие Н—Н между атомами водорода, принадлежащими разным ионам. Подчеркнуто, что структурная нежесткость молекулы НН<sub>4</sub>ВН<sub>4</sub> тесно связана с вопросами ее стабильности к распаду.

Резюме

М.П.

ф. 1990, № 2

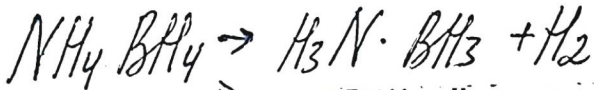
$\text{NH}_4\text{BH}_4$

1989

112: 105146m Theoretical study of nonrigid rotations of the tetrahedral cation and anion in the ammonium tetrahydroborate molecule. Baranov, L. Ya.; Charkin, O. P. (Inst. Nov. Khim. Probl., USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1989, 30(5), 27-34 (Russ). The potential energy surface for  $\text{NH}_4\text{BH}_4$  is studied by nonempirical methods. It is related to the relative nonrigid rotations of  $\text{NH}_4^+$  and  $\text{BH}_4^-$  ions in the mol. Strong deformation is considered for both ions as well as the polarization of the electron d. and the H-H interion interaction.

praren

C.A. 1990, 112, N 12



1989

32270a  
м

м.п.

† 23 Б1144. Неэмпирические расчеты потенциальной поверхности распада молекулы  $\text{NH}_4\text{BH}_4$  / Баранов Л. Я., Чаркин О. П. // Ж. неорганич. химии.— 1989.— 34, № 8.— С. 1928—1934.— Рус.

Выполнены неэмпирич. расчеты (с полной оптимизацией геометрии в приближении ССП/3-21Г и уточнением особых точек в приближении ПМ3/6-31Г) потенциальной Пв, переходного состояния, энергетич. барьера и пути р-ции мономолек. распада борогидрида аммония  $\text{NH}_4\text{BH}_4 \rightarrow \text{H}_3\text{N} \cdot \text{BH}_3 + \text{H}_2$ . Рассмотрены наиболее вероятные механизмы распада этой молекулы, которая энергетически нестабильна к распаду (37 ккал ССП/3-21Г). Барьер на пути распада мал либо вовсе отсутствует. Показано, что перестройка  $\text{NH}_4^+ + \text{BH}_4^-$  (солеобразная структура)  $\rightleftharpoons \text{H}_3\text{N} \dots \text{H} \dots \text{H} \dots \text{BH}_3$  (переходное состояние)  $\rightleftharpoons \text{H}_3\text{N} \dots \text{H} - \text{H} \dots \text{BH}_3$  («молек. комплекс»)  $\rightleftharpoons \text{H}_3 + \text{H}_2 + \text{BH}_3$  сопровождается весьма ма-

X. 1989, N 23



лыми изменениями энергии и что в «молек. комплексе»  $\text{H}_3\text{N} \dots \delta^+ \text{H} - \text{H}^\delta - \dots \text{BH}_3$  (к-рый включает в себя молекулу водорода  $\text{H}_2$ , расположенную между донорным и акцепторным атомами N и B), связь H—H поляризована и активизирована (ослаблена). Сделано предположение, что аналогичная активация м. б. характерна и для др. связей при внедрении их между донорным и акцепторным атомами.

Резюме



$H_nBNH_n$

Am 31564

1989

$n = 1, 2, 3$

ab initio,  
Di, compd.

| 110: 47475p Ab initio study of the vibrational frequencies of aminoboranes ( $H_nBNH_n$ , ( $n = 1, 2, 3$ )) and related compounds. Brint, Paul; Sangchakr, Benchang; Fowler, Patrick W. (Dep. Chem., Univ. Coll., Cork, Ire.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1989, 85(1), 29-37 (Eng): The equil. geometries and vibrational frequencies of the  $H_nBNH_n$  ( $n = 1-3$ ) mols. were calcd. at the SCF level using a 4-31G\*\* basis set. Comparative calcns. were carried out for the isoelectronic hydrocarbons.  $H_3BNH_3$  was treated at the correlated 2nd-order Moeller-Plesset level, with anal. calcn. of 2nd derivs. The B-N stretching vibration in  $H_3BNH_3$  is poorly described at the SCF level and shifts from 604 to 679  $cm^{-1}$  on inclusion of electron correlation. Over the whole set of mols., calcd. SCF harmonic frequencies are uniformly higher than the exptl. fundamentals by 10%, with a few exceptions that lead to proposed reassignments of some spectroscopic bands. A correlation between BH stretching frequency and nominal hybridization was detd. and its application to some related compds. discussed.

C.A. 1989, 110, n. 6

$H_n B N H_n$   
( $n=1,2,3$ )

ОМ 31564

1989

16 Б1056. Неэмпирическое исследование частот колебаний  $H_n B N H_n$  ( $n=1,2,3$ ) и родственных соединений. Ab initio study of the vibrational frequencies of  $H_n B N H_n$  ( $n=1,2,3$ ) and related compounds / Brint P., Sagehakar B., Fowler P. W. // J. Chem. Soc. Faraday Trans. Pt. 2.— 1989.— 85, № 1.— С. 29—37.— Англ.

В приближении ССП/4—31ГФ\*\* найдены равновесные геометрич. параметры и частоты колебаний молекул  $H_n B N H_n$  и изоэлектронных им молекул  $H_n C S H_n$  ( $n=1,2,3$ ). Св-ва молекулы  $H_3 B N H_3$  были рассчитаны также во 2-м порядке теории возмущений по Меллеру—Плессету. Учет электронной корреляции привел к укорочению на 0,03 Å теорет. межъядерного расстояния B—N, возрастанию теорет. силовой постоянной  $f$  (B—N) и соотв. частоты (от 604 до 679  $cm^{-1}$ ). Обсуждены отнесения полос в колеб. спектрах молекул  $H_n B N H_n$ , нек-рые отнесения исправлены. Установлена корреляция между величиной частоты вал. кол. B—H и типом гибридизации атома бора в молекуле.

В. Г. Соломоник

Х. 1989, N16

М.А.

NH<sub>2</sub>BT<sub>2</sub>

(DM. 32041)

1989

ab initio  
pacem  
g.

Ortiz J.V.,

Chem. Phys. Lett.,

1989, 156, N5,

489-493

In electron ● propagator

Study of Bonding in  
aminoborane.

NH<sub>4</sub>BF<sub>4</sub>

1990

114: 12357Sw Theoretical study of the structural nonrigidity, stability and hydrogen bonding in molecules of hydride and hydride fluoride salts EX<sub>4</sub>AZ<sub>4</sub> (E = N, P, A = B, Al, X = H and Z = H, F). Baranov, L. Ya.; Charkin, O. P. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). Zh. Neorg. Khim. 1990, 35(11), 2888-98 (Russ). Nonempirical calcs. are presented of NH<sub>4</sub>BH<sub>4</sub>, NH<sub>4</sub>AlH<sub>4</sub>, PH<sub>4</sub>BH<sub>4</sub>, PH<sub>4</sub>AlH<sub>4</sub>, NH<sub>4</sub>BF<sub>4</sub>, NH<sub>4</sub>AlF<sub>4</sub>, and PH<sub>4</sub>BF<sub>4</sub> for different orientations of tetrahedral anions and cations. Intramol. rotation barriers and dissocn. heats are evaluated for these salts.

(45)

2

расчет

структурн,

до

C.A. 1991, 114, N 14

$H_4 B_2 (NH_2)_2$

1991

Cao Yang, Wang  
You-Liang.

Синтез - Гаодан сюэсяо хуасюе.  
Chem. J. Chin. Univ. 1991.  
муре, 12, N3. с. 353-355.  
рацем

(с.и.  $\bullet B_2H_6; \bar{I}$ )

$BH(NH)_2$

1991

20 Б1028. Структура и энергия ароматических и антиароматических трехчленных гетероциклов, содержащих атом бора. Struktura a energie aromatických a antiaromatických tříčlenných heterocyklů obsahujících atom bóru /Hálová Olga //Sb. VŠCHT Praze. P. —1991. —12.—С: 5—14. —Чеш.; рез. англ.

М.П. Неэмпирическим методом ССП МО в базисе ОСТ-3ГФ оптимизированы геометрии борсодержащих гетероциклов —  $BH(CH)_2$ ,  $NH(BH)_2$  и четырех конформеров  $BH(NH)_2$ , а также планарной и неплоской конформации азирина  $NH(CH)_2$ . Рассчитаны распределения заряда в изученных молекулах и дипольные моменты. В. Я. Беспалов

□ (H)

X. 1992, N 20



BNH

1991

Sana Michel, Leroy G.

u. 12,

J. Mol. Struct. Theochem.

1991, 226, N3-4. C. 307 -

Δ<sub>7</sub>H

325.

(car. ● LiH; <sup>I</sup>~~IV~~)

$B(NH_2)_2^+$  Schneider William F., 1991  
Narula Chaitanya K., et al.

емрук-  
тура,  
рацем

Inorg. Chem. 1991. 30,  
N 20. C. 3919-3927.

(сир. ●  $BH_2^+$ ; III)

$\text{BH}_3\text{NH}_3$

[om. 36 587]

1991

$\text{BH}_3\text{NO}_3$

Vormann K., Dreizler H.

Freisam. Z. Naturforsch. 1991,  
спектр

сверхтон Y6a, 1060 - 1062.  
кал

спектр - Rotational  
тип Borane

● Spectrum of  
Monoammoniate.

Boron and Nitrogen Hyperdine  
Structure and Vibrational  
Structure.

$B^{14}NH$

Om. 37 431

1992

$B^{15}NH$

Knight L.B., Jr., Herlong J.O.,

$B^{14}ND$

Kirk T.J., et al.,

J. Chem. Phys.

Ref. - J. Chem. Phys., 1992, 96(2), 5604 -

5613.

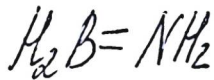
Laser vaporization

generation of

$B^{14}NH$ ,  $B^{15}NH$ ,

$B^{14}ND$ ,  $B^{16}O$ , and

$\text{B}^{17}\text{O}$ : Electron-spin-resonance investigation in neon matrices under ultra-cold trapping conditions.



1992

1 Б 1025. Неэмпирическое исследование образования  $H_2B=NH_2$  из  $NH_3$  и  $B_2H_6$ . Ab initio study of the formation of  $H_2B=NH_2$  from  $NH_3$  and  $B_2H_6$  /McKee Michael L. //J. Phys. Chem. —1992. —96, № 13. —С. 5380—5385. —Англ.

В рамках теории возмущений Мёллера—Плессета второго порядка (ТВМП2) с использованием базисного набора 6—31 ГФ\* изучена поверхность потенциальной энергии для р-ции вз-вия аммиака с дибораном, приводящей к образованию аминоборана  $H_2B=NH_2$ . Энергии стационарных точек уточнены расчетами в рамках ТВМП четвертого порядка в базисе 6—31+ГФ(2d,p). Показано, что на начальной стадии бимолек. присоединение  $NH_3$  к  $B_2H_6$  приводит к образованию льюисовского аддукта  $NH_3(BH_3)_2$ , к-рый изоструктурен  $B_2H_7$ . Энергия связи в нем равна 4,7 ккал/моль. Предсказаны частоты колебаний и их интенсивности в этом аддукте, к-рые будут способствовать эксперим. идентификации этого аддукта. Энергия активации для мономолек. отщепления  $H_2$  очень велика и поэтому исследованная р-ция протекает либо по бимолек. механизму, либо под действием катализатора. Сопоставле-

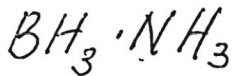
М.А.

Х. 1993, N 1

ны рассчитанные и измеренные частоты колебаний для  $\text{H}_2\text{B}-\text{NH}_2$ ,  $\text{H}_3\text{UNH}_3$ , метилпр. пр-ных  $\text{H}_2\text{B}-\text{N}(\text{H})\text{CH}_3$  и  $\text{H}_3\text{BNH}_2$ -  
 $\text{CH}_3$  и  $\mu$ -аминодиборана. И. Н. Сенченя

сходи  
та.





1992

Røeggen Inge.

Chem. Phys. 1992. 162,  
N2-3. C. 271-284.

u.n.

(see.   $\text{BH}_3 \cdot \text{CO}$ ; III)

$BH_2Y$   
 $BF_2Y$

$BH_2NH_3^+$ ,  $BH_2NH_2$ ,  $BH_2NO_2$  1992

121: 264108c Ab initio SCF and MP2 study of the equilibrium geometry and vibrational spectrum for methyleneaminoborane and  $BH_2Y$  and  $BF_2Y$  ( $Y = NH_2, NO_2, PH_2, CO_2^-, CHO, OH, CH_3, SiH_3, NH_3^+$ ) molecules. Spoliti, Maurizio; Ramondo, Fabio; Bencivenni, Luigi (Dipartimento di Chimica, Universita degli Studi di Roma, 00185 Rome, Italy). *Folia Chim. Theor. Lat.* 1992, 20(4), 201-21 (Ital). This study reports the results accomplished from the HF-SCF and MP2 levels to describe the mol. geometries, vibrational frequencies and relative stabilities of metileneaminoborane and of  $BH_2Y$  and  $BF_2Y$  species ( $Y = NH_2, NO_2, PH_2, CO_2^-, CHO, OH, CH_3, SiH_3, NH_3^+$ ). The  $\pi$  bonding effects have been studied from the comparison between the MP2 geometries of the stable structures and those of suitable non-planar models.

$Y = NH_2, NO_2,$   
 $PH_2, CO_2^-, CHO,$   
 $OH, CH_3, SiH_3, NH_3^+$   
молекулы  
Di, стабильн.  
теор. расчет

(19) 2

C.A. 1994, 121, N22

B-NH<sub>2</sub>

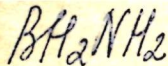
1992

Volatron F,  
Demachy I.

Chem. Phys. Lett. 1992,  
198 (3-4), 253-8.

об initio  
расчет  
вращ.  
коэф.  
B-X связь

●  
(сер. B-OH ; III)



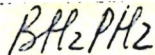
1993

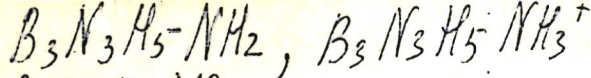
119: 168092f Theoretical studies of boranamine and its conjugate base. Comparison of the boron-nitrogen and boron-phosphorus  $\pi$  bond energies. Allen, Thomas L.; Fink, William H. (Dep. Chem., Univ. California, Davis, CA 95616 USA). *Inorg. Chem.* 1993, 32(20), 4230-4 (Eng). To answer questions about the relative strengths of the B-N and B-P  $\pi$  bonds the authors investigated mol. geometries, energies, dipole moments, normal vibrational modes, and harmonic vibrational frequencies of  $\text{BH}_2\text{NH}_2$  and  $\text{BH}_2\text{NH}^-$  by ab initio methods using basis sets of high quality. Several disagreements in the literature on the interpretation of the  $\text{BH}_2\text{NH}_2$  IR absorption spectrum were resolved. The aminoborane has two rotational transition states, one of  $C_s$  symmetry at 32.4 kcal/mol above the planar ground state and one of  $C_{2v}$  symmetry at 37.9 kcal/mol. The former has a BNH angle of  $110.5^\circ$  and an out-of-plane angle at N of  $55.4^\circ$ . Surprisingly, it is the d orbitals of the N atom that give the  $C_s$  transition state its lower energy and its approx. tetrahedral geometry at N. The  $\text{BH}_2\text{NH}^-$  anion has planar geometry and a BN bond length of 1.366 Å. It has an inversion transition state at 20.8 kcal/mol above the ground state, but it has no rotational transition state. Finally, a comparison of  $\text{BH}_2\text{NH}_2$  and  $\text{BH}_2\text{PH}_2$  shows that the B-P  $\pi$  bond is stronger than the B-N  $\pi$  bond (40.5 vs. 37.9 kcal/mol); these bonds are overwhelmingly of  $p\pi-p\pi$  type.

аминобора,  
фосфора,  
N, P

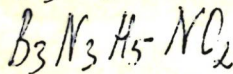
(4)  $\Delta$

C. A. 1993, 119, N 16





1993



ab initio  
pacem  
empyrm  
napalem,  
Vi

120: 62896b HF-SCF study of the ground state geometry and harmonic vibrational frequencies of borazine derivatives. Ramondo, F.; Portalone, G.; Colapietro, M.; Bendivenni, L. (Dip. Chim., Univ. Roma, I-00185 Rome, Italy). *THEOCHEM* 1993, 102, 85-99 (Eng). The results of ab initio HF-SCF calcs. of the B-monosubstituted borazine deriva.  $B_3N_3H_5X$  ( $X = NH_2, NO_2, F, Cl, CN, NC, OH, N_2^+, CCH, CHO, CH_3, NH_3^+$  and  $SiH_3$ ) are reported. The equil. geometries of the mols. were detd. from gradient optimizations carried out employing the 6-31G\* and 6-31G\*\* basis sets. HG/6-31G\* level calcs. of disubstituted and trisubstituted F and Cl borazine deriva. and of trimethylborazine are included. The effects of the substituents on the geometry of the borazine ring were investigated. Vibrational frequencies were calcd. for some B-mono-substituted mols. and the splittings of the degenerate modes of borazine due to symmetry lowering occurring in the B-monosubstituted mols. were examd.

(78)  $\nabla$   
C.A. 1994, 120, N6

$NH_3 \cdot BH_3$

1994

11 Б1042. Сравнительное исследование структуры и энергий связывания для аддуктов  $AH_3EH_3$  ( $A=B, Al, Ga, In$ ;  $E=N, P, As$ ). A comparative study of structures and binding energies for  $AH_3EH_3$  adducts ( $A=B, Al, Ga, In$ ;  $E=N, P, As$ ) /Chaillet Max, Dargelos Alain, Marsden Colin J. //New J. Chem. .—1994 .—18 ,№ 6 .—С. 693—700 .—Англ. ;рез. фр.

структура,  
энергии  
связывания

Неэмпирическим методом ССП, а также с учетом электронной корреляции в рамках теории возмущений Меллера—Плессета второго порядка с использованием псевдопотенциала для остовных электронов и базисов двухэкспонентного типа, дополненного поляризац. ф-циями, для валентных электронов изучено электронное и геометрич. строение 12 аддуктов типа  $AH_3EH_3$  ( $A=B, Al, Ga, In$ ;  $E=N, P, As$ ), содержащих акцепторные атомы третьей группы и донорные — пятой. Найдено, что учет корреляц.

(41)



$NH_3 \cdot$



$AlH_3,$

$NH_3 \cdot GaH_3,$

X. 1995, N 11

$NH_3 \cdot InH_3,$

$PH_3 \cdot BH_3,$

$PH_3 \cdot AlH_3$

поправок приводит к укорочению длин связей А—Е и временами к их заметному упрочнению. Рассчитанные энергии в-вия попадают в интервал от 141 (А=Al, Е=N) до 37 (А=In, Е=As) кДж/моль (соотв. 120 и 31 кДж/моль после учета ошибки суперпозиции базисного набора). В общем, энергии вз-вия уменьшаются с ростом размеров как акцептора, так и донора. Однако эти тенденции не являются регулярными, напр., NH<sub>3</sub> образует более прочные комплексы с AlH<sub>3</sub>, чем с BH<sub>3</sub>. Библ. 35.

И. Н. Сенченя

PH<sub>3</sub> · BH<sub>3</sub>, Ptl<sub>3</sub> · InH<sub>3</sub>, AsH<sub>3</sub> · BH<sub>3</sub>,  
 AsH<sub>3</sub> · AlH<sub>3</sub>, AsH<sub>3</sub> · BH<sub>3</sub>,  
 AsH<sub>3</sub> · InH<sub>3</sub>

$B_2(NH_2)_4$

1994

Demachy I., Volatron F.

J. Phys. Chem. 1994. 98,  
N 42. C. 10728-10734.

и. п.

(сес.  $B_2H_4$ ; III)



$B_3H_6NH^+$   
 $B_3H_6N$

1994

(смысл)  
 ab initio  
 part

120: 331616m Pyramidal Structures with a  $B_3H_6$  Ring. Possibility of Terminal Hydrogens opposite the Capping Group. Jemmis, Eluvathingal D.; Subramanian, G.; Srinivas, G. Naga (School of Chemistry, University of Hyderabad, Hyderabad, 500 134 India). *Inorg. Chem.* 1994, 33(11), 2317-19 (Eng). Ab initio MO studies on a series of pyramidal  $B_3H_6X$  structures ( $X = NH^+, N, CH, BH^-, P, PH^+, SiH, NO, PO, Co(CO)_3$ ) indicate that, for structures where  $X = NH^+, N$ , and  $NO$ , the terminal hydrogens ( $H_t$ ) of the basal  $B_3H_6$  ring are toward the direction of the capping group. In contrast, the  $H_t$ 's are found to be away from the capping group for  $X = CH, BH^-, P, PH^+, SiH, PO$ , and  $Co(CO)_3$ . All structures except that of  $B_4H_7^-$  are calcd. to be min. The six  $\pi$  interstitial electron rule for three-dimensional delocalization and the compatibility of orbitals that overlap are used to explain the structural and bonding preferences in these pyramidal mols.

(+7)  $\boxtimes$



$B_3H_6CH$ ,  $B_4H_7^-$ ,  $B_3H_6P$ ,  $B_3H_6P^+$ ,  
 $B_3H_6SiH$ ,  $B_3H_6NO$ ,

C. A. 1994, 120, N 26

$B_3H_6PO$ ,  $B_3H_6Co(CO)_3$

$H_3N-BH_3$

1994

Jonas Volker, Frenking  
Bernot, et al.

No(298) J. Am. Chem. Soc. 1994,  
116 (19), 8741-53.

(see  OC-BH<sub>3</sub>; III)

(BH-AH)<sub>3</sub>

7 ?

1994

121: 308749u Stabilities and Energetics of Inorganic Benzene Isomers: Prismenes. Matsunaga, Nikita; Gordon, Mark S. (Department of Chemistry, Iowa State University, Ames, IA 50011-3111 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1994, 116(25), 11407-19 (Eng). Ab initio calcns. of inorg. prismenes, with the formula (XH-YH)<sub>3</sub>, where X = B, Al, and Ga and Y = N, P, and As, as well as X or Y = C, Si, and Ge, were carried out. Energetics of these species are compared with those of the planar benzene analog and chair/boat conformers. The prismane and planar structures contg. first period elements (B, C, and N) are all stable (i.e. min. on the potential energy surfaces). Chair and boat conformers are potential energy min. only in compds. contg. second or fourth period elements. For the species with a first period element in the 1, 3, 5 positions, the planar benzene-like structure is the global min.; otherwise, the planar structure is not a min. The lowest min. found is the prismane arrangement for Si<sub>6</sub>H<sub>6</sub> and Ge<sub>6</sub>H<sub>6</sub> and the chair structure for Si<sub>3</sub>Ge<sub>3</sub>H<sub>6</sub>. Other mols. have distorted min.

ab initio  
prismen  
структура  
и конформеры

с. А. 1994, 121, N 26

$BH_3 NH_3$

1995

Baeschlicher Ch.W., Jr.  
Ricca A.

Chem. Phys. Lett.  
1995, 237 (1,2), 14-19.

(cell.  $BH_3CO$ ; III)

мур.  
растёт  
жизнью  
св. и др.,  
св. и др.

1995

F: B<sub>2</sub>NH<sub>3</sub>

P: 3

8Б149. Соединения бора с анти-геометрией вант Гоффа/Ле Беля. Теоретическое исследование классических и неклассических изомеров B[2]CH[4], B[2]NH[3] и B[2]OH[2]. Anti van't Hoff/Le Bel geometries of boron compounds. A theoretical study of classical and nonclassical isomers of B[2]CH[4], B[2]NH[3] and B[2]OH[2] / Fau Stefan, Frenking Gernot // J. Mol. Struct. Theochem. - 1995. - 338. - С. 117-130. - Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах до 6-311ГФ(2df, 2pd) с учетом электронной корреляции в рамках МП4 исследована поверхность потенциальной энергии B[2]CH[4], B[2]NH[3] и B[2]OH[2]. Найдено четыре, шесть и три равновесных изомера соответственно. Электронное строение систем изучено с помощью топологич. анализа распределения электронной плотности и соответствующих градиентов и лапласиана.

Р. Ж. Х. N 8, 1996

F: B<sub>2</sub>NH<sub>3</sub>

P: 3

8Б149. Соединения бора с анти-геометрией вант Гоффа/Ле Беля. Теоретическое исследование классических и неклассических изомеров B[2]CH[4], B[2]NH[3] и B[2]OH[2]. Anti van't Hoff/Le Bel geometries of boron compounds. A theoretical study of classical and nonclassical isomers of B[2]CH[4], B[2]NH[3] and B[2]OH[2] / Fau Stefan, Frenking Gernot // J. Mol. Struct. Theochem. - 1995. - 338. - С. 117-130. Англ.

эмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах до 6-311ГФ(2df, 2pd) с учетом электронной корреляции в рамках МП4 исследована поверхность потенциальной энергии B[2]CH[4], B[2]NH[3] и B[2]OH[2]. найдено четыре, шесть и три равновесных изомера соответственно. Электронное строение систем изучено с помощью топологич. анализа распределения электронной плотности и соответствующих градиентов и лапласиана.

Х. 1996, № 8

[Om. 38234]

1995

$\text{BH}_3\text{NH}_3$

Martin Lebold,  
Nino Russo et al.,

мон.  
структ.  
конфиг. J. Chem. Phys., 1995, 103(17),  
задачи,  
No. 7408 - ...

A density functional study  
of borane and alanine



monoammoniate.

$BH_3NH_3$

F:  $BH_3NH_3$

P: 3

1995

06.Д.0137. Исследование методом ССП с учетом электронной корреляции структуры, силовых постоянных и колебательных спектров моноаммиачного комплекса борана. SCF and electron correlation studies on structure, force constants and vibrational spectra of borane monoammoniate complex / Vijay Amrendra, Sathyanarayana D. N. // Chem. Phys. - 1995. - 198, N 3. - С. 345-352. - Англ.

эмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах от двухэкспонентного до трехэкспонентного с включением поляризационных и диффузных ф-ций и с учетом электронной корреляции по МП2 и КВ рассчитаны равновесная геометрия, силовые постоянные и колебательные спектры  $BH_3NH_3$ . Учет корреляции существенно улучшает завышаемые в ССП длины связей В-Н. Колебательные частоты отличаются от эксперим. значений на 10% при использовании ССП и на 5 - 6% при использовании МП2. Получены хорошие значения частот и интенсивностей для изотопозамещенных.

X. 1996, №6

F: B<sub>2</sub>(NH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>

P: 3

13B143. Теоретическое изучение сопряжения, сверхсопряжения и стерических эффектов в B[2]D[4] (D=H, F, OH, NH[2] и CH[3]). Theoretical study of conjugation, hyperconjugation, and steric effect in B[2]D[4] (D=H, F, OH, NH[2], and CH[3]) / Mo Y., Lin Z. // J. Chem. Phys. - 1996. - 105, N 3. - С. 1046-1051. - Англ.

Неэмпирическим методом ССП в базисе 6-31ГФ{\*} исследовано электронное строение B[2]X[4], X=H, F, OH, NH[2], CH[3]. Обсуждены вклады эффектов сопряжения, сверхсопряжения и стерич. эффектов в барьеры вращения групп BX[2]. При этом проведены расчеты с включением в рассмотрение 'пи'-орбиталей атомов В и без их учета.

РМХ 1997

$B_2(NH_2)_4$

1996

Mo, Yizong;  
Lin, Zhengyang.

Гарнц  
присущие,  
снр-ра,  
мюрет.  
рассет.

J. Chem. Phys., 1996,  
105(3), 1046-57



(coll.  $B_2H_4$ ; III)

HB(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>

1996

22Б179. Теоретическое изучение равновесной структуры, гармонического силового поля и колебательных спектров диаминборана. Влияние базиса и электронной корреляции. Theoretical investigation of equilibrium structure, harmonic force field and vibrational spectra of borane diammine: Effects of basis set and electron correlation / Vijay Amrendra, Sathyanarayana D. N. // J. Mol. Struct.— 1996.— 375, № 1-2.— С. 127-141.— Англ.

М.А.



Х. 1997, № 22

BH(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>

1996

теор. расчет  
структ.,  
энергетик.,  
ви, чис. мет.

124: 186102s Theoretical investigation of equilibrium structure, harmonic force field and vibrational spectra of borane diamine: effects of basis set and electron correlation. Vijay, Amrendra; Sathyanarayana, D. N. (Department of Inorganic and Physical Chemistry, Indian Institute of Science, Bangalore, 560 012 India). *J. Mol. Struct.* 1996, 375(1-2), 127-41 (Eng). The equil. structure, harmonic force field and vibrational spectra of borane diamine, BH(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>, have been investigated with the aid of SCF, MP2 and QCISD methods, applying a basis set of DZ + P quality. The effects of a larger basis set (TZ + 2P) including diffuse and higher order polarization functions on the computed mol. structure, harmonic force consts., vibrational frequencies and IR band intensities of BH(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub> have also been studied at the SCF as well as the MP2 level of approxn. The vibrational anal. of BH(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub> and several of its isotopomers has been carried out using the GF matrix method. The predicted frequency for NH<sub>2</sub> wagging is very sensitive to the method of calcn.; however, the predicted band intensity remains nearly unaffected.

Q.A. 1996, 124, N 14

$H_2BNH_2$

1997

Симплекс  
метод

129: 86282k Internal rotation of  $H_2BNH_2$  molecule. Minyaev, R. M.; Lepin, E. A. (Nauchno-Issled. Inst. Fiz. Org. Khim., Rostov. Gos. Univ., Rostov-on-Don, Russia). *Zh. Fiz. Khim.* 1997, 71(8), 1449-1453 (Russ), MAIK Nauka. The authors used the MP2(fc)/6-31G\*\* method to study the topol. of the potential surface of aminoborane detg. internal-rotation stationary points and orthogonal trajectories (gradient field). The internal rotation of  $H_2BNH_2$  can be described by 2 equiv gradient lines and is two dimensional.

C.A. 1998, 129,  4

H<sub>2</sub>BNH<sub>2</sub>

1997

..... Wales D. J. et al.,

note xxx.  
no merits.  
freemium

J. Phys. Chem. 1997, A101(7),  
...

(all PFs; III)



By Hs N<sup>+</sup>

1997

Nu, Hai-Sun; et al.,

стр-ра,  
статистик,  
теорет.  
расчет

Huaxue Huobao 1997,  
55(21), 1185-90.

(all. By Hs)



III)

B<sub>3</sub> N<sub>3</sub> H<sub>6</sub>

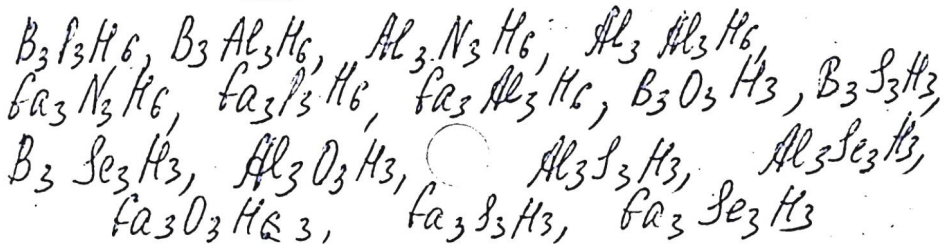
1998

128: 262187y Aromaticity in X<sub>3</sub>Y<sub>3</sub>H<sub>6</sub> (X = B, Al, Ga; Y = N, P, As), X<sub>3</sub>Z<sub>3</sub>H<sub>3</sub> (Z = O, S, Se), and Phosphazenes. Theoretical Study of the Structures, Energetics, and Magnetic Properties. Jemmis, Eluvathingal D.; Kiran, Boggavarapu (School of Chemistry, University of Hyderabad, Hyderabad, 500 046 India). *Inorg. Chem.* 1998, 37(9), 2110-2116 (Eng), American Chemical Society. A systematic estn. of aromaticity in X<sub>3</sub>Y<sub>3</sub>H<sub>6</sub>, 1, (X = B, Al, Ga; Y = N, P, As), P<sub>3</sub>N<sub>3</sub>H<sub>6</sub>, 2, and X<sub>3</sub>Z<sub>3</sub>H<sub>3</sub>, 3 (Z = O, S, Se), was conducted using structural, energetic, and magnetic criteria. Ests. based on arom. stabilization energy (ASE) calcs. predict that 1BN (1; X = B, Y = N) and 1BP are equally arom. Contrary to this, magnetic susceptibility exaltation (MSE) and nucleus independent chem. shift (NICS) data at the B3LYP/6-31G\* level indicate that 1BN is not arom. while 1BP is. This finding emphasizes the fact that energetic and magnetic criteria need not be parallel. On the basis of MSE and NICS values, all 1XP compds. show strong arom. character; 1XAs are borderline arom. while 1XN compds. are nonarom. Despite being arom., all 1XP and 1XAs compds. are found to prefer nonplanar geometries. MSE and NICS criteria can also diverge quite strongly; this was obsd. in the X<sub>3</sub>Z<sub>3</sub>H<sub>3</sub> family. MSE values for 3BS, 3BSe, 3AlO, 3AlS, and 3GaS are more than half of the MSE value for benzene, indicating substantial arom. character. However, NICS ests. point to the contrary; none of the type 3 compds. are arom. The problem with the ASE and

nonplanar  
arom.  
compd.  
C.A.

(41b)  
C.A. 1998, 128, N21

MSE is that both depend on the choice of the ref. systems while NICS, which avoids the need for ref. mols., is impossible to vary exptl. In spite of this deficiency of NICS, it is complementary to the ASE and MSE criteria. Despite the existence of a large no. of well-established structures and substantial arom. stabilization energy, phosphazenes, 2, are not arom. according to NICS data.



$Bn(NH_2)n$   
 $n=4-6$

1999

McKee, Michael L.,

сир-ра,  
стабильн.,  
мор-рацем 321-330

Inorg. Chem. 1999, 38(2),

(cell- $BnNH_2$ ;  III)

F: B3N3H6

P: 3

2001

135:11612 High-resolution FTIR spectroscopy of borazine: The parallel bands  $\nu_8$  and  $\nu_9$  of 10B314N31H6. Huober, J.; Pfeffer, M.; Ruoff, A. Sektion Schwingungsspektroskopie, Universitat Ulm, Ulm, Germany. Z. Anorg. Allg. Chem. (2001), 627(4), 589-593 in English.

The high-resoln. (0.002  $\text{cm}^{-1}$ ) FTIR spectra of A<sup>2</sup>-fundamental bands  $\nu_8$  and  $\nu_9$  of 10B314N31H6 were investigated for the first time. Both fundamental bands show a typical parallel band structure, thus confirming the D<sub>3h</sub> symmetry of the mol. under consideration. While  $\nu_9$  is unperturbed at the present level of precision,  $\nu_8$  is heavily perturbed, probably by an  $\alpha\text{BB}$ -resonance with the IR-forbidden combination tone  $\nu_{10} + \nu_{17}$ . The mol. consts. of the ground state and of the states  $\nu_8 = 1$  and  $\nu_9 = 1$ , resp. are given.



B<sub>4</sub>N<sub>4</sub>H<sub>4</sub>

2001

теор. расчёт  
структур и  
стабильности,  
П.И. М.О.

(+) C<sub>8</sub>H<sub>4</sub>

С.Д. 2001, 135, №8.

135: 112254y Structure and stability of X<sub>4</sub>Y<sub>4</sub>H<sub>4</sub> (XY = CC, BN). Yin, Ping; Chen, Xian-Yang; Li, Chong-De; Xin, Xin-Quan (State Key Laboratory of Coordination Chemistry, Department of Chemistry, Nanjing University, Nanjing, Peop. Rep. China 210093). *Int. J. Quantum Chem.* 2001, 82(6), 293-298 (Eng), John Wiley & Sons, Inc. Ab initio calcns. were carried out to study the structures and relative stabilities of the planar eight-membered ring B<sub>4</sub>N<sub>4</sub>H<sub>4</sub> and its isoelectronic species C<sub>8</sub>H<sub>4</sub> at the HF/6-31G\*, MP2/6-31G\*, MP2/6-311G\*\*, and MP4SDQ/6-31G\* levels. The anal. of Mulliken populations, vibration frequencies,  $\pi$ -MO components, and orbital energy levels were used to evaluate the relative stabilities of these two similar systems. The homodesmotic reactions were also taken to be a useful index of relative stability for X<sub>4</sub>Y<sub>4</sub>H<sub>4</sub> (XY = CC, BN) and gave the resonance energies with MP4SDQ/6-31G\* of C<sub>8</sub>H<sub>4</sub> (-37.2 kcal/mol) < B<sub>4</sub>N<sub>4</sub>H<sub>4</sub> (-29.2 kcal/mol). We calcd. the thermodyn. functions of these reactions to discuss the influence of temp. B<sub>4</sub>N<sub>4</sub>H<sub>4</sub> may exist in theory and could be a little more stable than C<sub>8</sub>H<sub>4</sub>.