

BF₂



BF_2^+

1956.

R. W. Law,
et al.

"J. Chem. Phys."
1956, 25, 1086 -

A. P.

139p-537-V

BF_2^+

BF_3

Kreuzer H

1957

Z. Naturforsch. 12^a, 519

Измерения работы BF_3^+ и BF_2^+
при ионизации газа BF_3 .

$$U(\text{BF}_3) = 15,5 \pm 0,3 \text{ eV}$$

$$U(\text{BF}_2) = 16,25 \pm 0,2 \text{ eV}$$

} измерения
ионизации

BF₂
BF₃

coll. Henry Gussess.

1961

Evans W.H.

Preliminary Report on the
Thermodynamic Properties of
Selected Light-Element and
Some Related Compounds.

US.NBS, Report N7093, 1961.

*Dr. Maxine
Hepburn*

1962

22 Б41. Спектроскопическое исследование металло-органических соединений. VII. Исследование методом электронного удара некоторых борорганических дифторидов. Steele W. C., Nichols L. D., Stone F. G. A. Spectroscopic studies on organometallic compounds. VII. An electron impact investigation of some organoboron difluorides. «J. Amer. Chem. Soc.», 1962, 84, № 7, 1154—1158 (англ.)

На масс-спектрометре с немопознергетич. пучком электронов измерены потенциалы появления (ПП) ионов, образующихся из молекул $R-BF_3$, где $R = CH_3$ (I), C_2H_5 (II), $CH_2=CH$ (III) и $(CH_3)_2CH$ (IV). В качестве стандартов использовались Ar и Kr. Значения ПП определялись методами исчезающего тока и экстраполируемой разности. С потенциалами появления сопоставлены процессы, по которым идет образование ионов. Из термодим. величины энергии связи BF_2-F и из ПП иона BF_2^+ оценены потенциал ионизации радикала $BF_2: I(BF_2) = 9.3-9.5$ эв. Эта оценка позволила

BF₂

Потенц. ионизации

ж. 1963-22

См. и др.

авторам рассчитать энергию связи С—В в исследованных соединениях, которая составляет для I 95—100, для II 101, для III 111 и для IV 96 ккал/моль. По мнению авторов, относительно большая величина энергии связи С—В объясняет специфику р-ций данного типа соединений. Авторами обнаружено, что при действии электронов на II и IV с большой вероятностью происходит одновременный отрыв радикалов Н и BF_2 , чем только BF_2 . Часть VI см. РЖХим, 1963, 1Ж231.

Ю. Ходеев

BF₂

Nagarajan G.

см. ноев.

Australian J. Chem. 16(4), 717.

ноев. Копие.
грамм.

Potential constants and Coriolis coupling constants for some nonlinear symmetrical XY₂-type molecules.

C. A. 1963. 59. 12

13457 h

(см. WO₂)

1964

BF₂

18 Б140. Средние амплитуды колебаний двуфтористых бора, углерода, азота, алюминия, фосфора и циркония. Nagajana G. Mean amplitudes of vibration for the difluorides of boron, carbon, nitrogen, aluminium, phosphorus and zirconium. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1964, 2, № 11, 341—343 (англ.)

Для т-р 0° и 298° вычислены средние амплитуды колебаний, соответствующие связанным парам X—X и несвязанным парам X—Y атомов BF₂, CF₂, NF₂, AlF₂, PF₂ и ZrF₂. Все молекулы имеют нелинейную структуру типа XY₂ и принадлежат к точечной группе симметрии C_{2v}. Число основных частот равно трем. Вычислены элементы матрицы средних квадратичных амплитуд колебаний в координатах симметрии и получены численные значения этих амплитуд в декартовых координатах.

В. Березин

X.1965.18

1964

BF₂

CF₂

NF₂

AlF₂

PF₂

ZrF₂

(mean.)

Mean amplitudes of vibration for the difluorides of B, C, N, Al, P, and Zr. G. Nagarajan (Oklahoma State Univ., Stillwater). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 2(11), 341-3(1964)(Eng). The mean amplitudes of vibration for the difluorides of B, C, N, Al, P, and Zr, possessing a nonlinear structure with the point group, C_{2v}, were evaluated by Cyvins' method at 0 and 298°K. (CA 54, 5235d).
D. H. De Voe

(buv)

C.A. 1965.62.9

9931 B

7

1964

CF₂

8 Д120. Средние амплитуды колебаний двуфтористого бора, углерода, азота, алюминия, фосфора и циркония. Nagaraian G. Mean amplitudes of vibration for the difluorides of boron, carbon, nitrogen, aluminium, phosphorus and zirconium. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1964, 2, № 11, 341—343 (англ.)

(исслед.)

Для т-р 0 и 298° К вычислены средние амплитуды колебаний, соответствующие связанным X—X и несвязанным X—Y парам атомов BF₂, CF₂, NF₂, AlF₂, PF₂ и ZrF₂. Все молекулы имеют нелинейную структуру типа XY₂ и принадлежат к точечной группе симметрии C_{2v}. Число фундаментальных частот равно 3. Вычислены элементы матрицы средних квадратичных амплитуд колебаний в координатах симметрии и получены численные значения этих амплитуд в декартовых координатах.

В. Березин

ф. 1965. 82

X

1966

BF₂
(м.ч)
Кв.мех.
расчет

Peple J.A., Segal G.A.
J. Chem. Phys., 1966, 44,
NG, 3289-3296.

CCN.

См. ВМЗ, III

BF₂ Krishnamachari S.L.N.G. 1987
у.з. Nazasimham N.A., Singh M.
суд. Proc. Intern. Conf. Spectry Vol I,
2130 (Bombay 1987) p. 181.

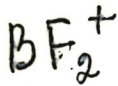
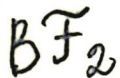
у.з. згорел изограничен. на ν_2 .
(в предисловии ν_2 гами
не нам в BF₃)
(предисловие не отчет сирани).


BF₂

Pople J.A., Beveridge : 1967
D.L., Dobosh P.A.,

copy to

J. Chem. Phys., 1967, 47, 2026.



(I, 70)

Bp. - 5934-XV 1968

Sibeler W. H.; et al.

Inorg. Chem., 1968,
7, 1742 - 46

(see. B_2F_4 ; III)

1969

BF_2

Nelson W., Gordy W.

J.Chem.Phys., 51, 4700

Electron spin resonance and
structure of the BF_2 radical.

1941

Boyd R. Y.
Whitehead M. A.

J. Chem. Soc.,

1941, A, n 22, 3549.

(Ces. Bk) IV

BH

all. no. 05.

14

Сравнение орбит. времени и величин
попыток пометки (24).

Система параметров.

М-ва Орбит. I II III IV Желер.

ВФ ₂	a ₁	10.49		11.14
	b ₂	15.85	-	16.13
	a ₂	16.01		16.24
	b ₂	16.54		17.11
	a ₁	16.90		17.35
	b ₁	17.01		17.56
	a ₁	17.82		18.36
	b ₂	39.46		38.93
	a ₁	40.22		38.40

1971

BF₂

5 Б376. Параметры ЭПР радикала BF₂. Зау-
сер М., Аžman А. ESR parameters of the BF₂ radical.
«Croat. chem. acta», 1971; 43, № 2, 139—140 (англ.; рез.
словен.)

расчет

Полуэмпирическим методом самосогласованного по-
ля ЧПДП с использованием предложенной ранее гео-
метрии выполнен теор. расчет радикала BF₂. Показа-
но хорошее совпадение теор. вычисленных констант СТС
($a_{B^{10}}=322$, $a_{B^{11}}=961$, $a_F=508$ МГц), спиновых плотнос-
тей неспаренного электрона ($\rho_{2s}=0,476$; 0,476; 0,010) и
 g -фактора (2,0009), с соотв. эксперим. найденными зна-
чениями ($a_{B^{10}}=278$, $a_{B^{11}}=826$, $a_F=532$ МГц), ($g=$
 $=2,0012$) и значениями спиновых плотностей (δ , 41;
0,41; 0,011). И. В. Мирошниченко

X. 1972. 5

1941

BF₂

(103345u) ESR parameters of the boron fluoride (BF₂).
Zaucer, M.; Azman, A. (Dep. Chem., Univ. Ljubljana, Ljubljana, Yugoslavia). *Croat. Chem. Acta* 1971, 43, 139-40 (Eng).
The semiempirical SCF method (intermediate neglect of differential overlap) was used to calc. the g factor and the isotopic const. *a* of the BF₂ radical. The results show good agreement with the exptl. values.
L. Klasinc

Kb. mex
paccr

C. A. 1941. 25.16

1972

BF₂

Отчет по научно-иссл. работе
ИВТАН СССР, 1972 г.

Определение мол. пост. и тер-
модинамических свойств веществ

М.И.

BF₂

3691

1972.

169037t Electronic structure and geometry of BF₂ and NF₂.
Thomson, Colin; Brothie, Douglas A. (~~Dep. Chem., Univ. St.~~
Andrews, St. Andrews/Fife, Scot.). *Chem. Phys. Lett.* 1972,
16(3), 573-5 (Eng). Results are presented of ab initio calcns. on
the BF₂ and NF₂ radicals. Geometry predictions for these spe-
cies using different gaussian orbital basis sets are compared.

copy

kb. res.
paper

CCMB
OTIUM
Y Pandey

C. A. 1972. 77, N26

BF_2

1973

Owens F. J. ;

"Chem. Phys. Lett"

рефер.

1973, 18, N2, 158-160.

• (ср. CO_2^- ; III)

BF₂

1973

Синий
запис-
ная

Owens F.J., Adams G.T.

"J. Chem. Phys.", 1973, 59, №2, 981-982.

E
/

не нужно



(см. HCO; III)

Расчет методом УНДО
сверхтонкого рассеяения

аннотация

BF_2 Rodenberg S., Schaefer H.F., 1973
J. Am. Chem. Soc., 1973, 95, 2095.

ab initio
calculations $r = 2.45 \text{ \AA}$, $\theta = 120^\circ$

BF₂

оттиски 1726 а) 1973

Электр.
Строение

5 Д127. Неэмпирическое исследование геометрии, связи и констант взаимодействия для BF₂. Thomson Colin, Brothie Douglas A. An ab initio investigation of the geometry, bonding and coupling constants of BF₂. «Theor. chim. acta», 1973, 32, № 2, 101—109 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО исследовано электронное строение радикала BF₂. Использовано 5 базисов гауссовых ф-ций: 5s2p и 7s3p, сгруппированные в минимальные; 7s3p, 9s5p и 11s7p, сгруппированные в 4s2p, 4s3p и 6s4p соответственно; первый из них несколько хуже минимального слэтеровского, а последний приводит к результатам, близким к хартри-фоков-

Ф. 1974
н 5

скому пределу. Все базисы, кроме второго, приводят к близкой равновесной геометрии (длина связи 2,495 ат. ед., валентный угол 120° — для наибольшего базиса) для основного X^2A_1 состояния. Для возбужденных A^2B_1 , 2A_2 и 2B_1 состояний расчеты с наименьшим базисом приводят к длинам связей 2,55, 2,79 и 2,90 ат. ед. и валентным углам 180° , 90° и 99° соответственно. Проведен также анализ заселенностей и рассчитаны константы сверхтонкого взаимодействия (близкая к опыту для В и заниженная почти вдвое для F) и дипольные моменты.

В. Л. Лебедев

BF₂

ommuca 1726a)

1973

101730v Ab initio investigation of the geometry, bonding, and coupling constants of boron difluoride. Thomson, Colin; Brochie, Douglas A. (Purdie Build., Univ. St. Andrews, St. Andrews, Scot.). *Theor. Chim. Acta* 1973, 32(2), 101-9 (Eng).
M.N. Comparative calcs. by 5 different basis sets of contracted
parent Gaussian functions were carried out for geometry, bonding, and
hyperfine coupling consts. of BF₂. The best calcn. by a near
Hartree-Fock at. basis predicts bond angle 120° and bond length
2.50 a.u. for the X²A₁ ground state. The geometries of 3 low-
lying excited states are reported.

C.A. 1974. 80. N18

оттиски 1726 а)

1973

BF₂

11 Б20. Неэмпирическое исследование геометрии, связывания и констант взаимодействия в BF₂. Thomson Colin, Brotchie Douglas A. An ab initio investigation of the geometry, bonding and coupling constants of BF₂. «Theor. chim. acta», 1973, 32, № 2, 101—109 (англ.)

геометрия

Методом ССП МО ЛКАО рассчитано электронное строение основного и трех низколежащих возбужденных состояний σ -электронного радикала BF₂. Расчеты выполнены с использованием пяти наборов базисных гауссовских функций (ГФ), наилучший из к-рых содержал 11s- и 7-ГФ на каждом атоме, сгруппированных в 6s-, 4p-функции и не включал поляризац. функции. В результате расчета для основного состояния ²A₁ радикала BF₂ найдены значения длины связи B—F (2,5 ат. ед.) и угла FBF (120°), к-рые несколько больше, чем величины (~2,4 ат. ед. и 112°), оцененные из эксперим. данных для BF и BF₂. Предсказано, что геометрия радикала в первом возбужденном состоянии

X. 1974 № 11

должна быть линейной с длиной связи В—F равной 2,55 ат. ед. Отмечено, что полученное зарядовое распределение в BF_2 почти такое же, как в BF_3 . Рассчитаны константы изотропного сверхтонкого взаимодействия (ИСТВ) с ядрами атомов бора и фтора. Проведено сопоставление с экспериментом и с опубликованными ранее результатами расчета констант ИСТВ в этом радикале, найденными методом ССП МО ЛКА в валентных приближениях ЧПДП и ППДП/СП.

Н. Д. Чувылкин

30426.8762
TE, SIS, Ch, Ph,
EX-C

BF₂ 40771
гип. момент, зам.

23-359

Rothenberg Stephen, Schaefer Henry F.,
III.

Molecular properties of the triatomic
difluorides BeF₂, BF₂, CF₂, NF₂, and OF₂.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1973, 95, N 7,
2095-2100

(англ.)

0863 БИК

850 852

856

см BeF₂, III) ВИНТИ

40418.3698

Ch, Ph, TE

BF₂

96200 02

1974

5-4647

Brown R.D., Williams G.R. Ab initio cal-
culations on some small radicals by the
unrestricted Hartree-Fock method. "Chem.
Phys.", 1974, 3, N 1, 19-34

(англ.)

0008 мкк

074 074 080

ВИНИТИ

1974

BF_2

Srivastava R. D.
Uy O. M. et al.

(Ae^-)

J. Chem Soc. Faraday Trans
1, 1974, 70(6) 1033-8 (Eng)

C.A. 1974. 81, N16.

(all BF_2 ; III)

40805.1275

Ch, TC

29862
 BF_2 ($Al\bar{e}$)^{0.2}

1974

2267

Srivastava R.D., Uy O.M., Farber Milton.
Experimental determination of heats of
formation of negative ions and electron
affinities of several boron and aluminium
fluorides. "J. Chem. Soc. Faraday Trans.",
1974, Part I, 70, N 6, 1033-1038
(англ.)

140 141

i 51

0 1 1 0

ВИНИТИ

BF₂

1974

Takahata Yuuzi

"Chem. Phys. Lett." 1974

26, N4, 557-560 (англ.)

(модель гравитационного)

(с BF₂; III)



2. 1975. N1

сборник 4349

1974

BF_2

Thomson Colin, Brothie

Douglas.

расчет E:

"Mol. Phys" 1974, 28, N1, 301-303
(англ)

Теоретическое обоснование не-
которых новых возбужденных
состояний NH_2 и BF_2 .

ж. 1975. N1.

(см NH_2 ; III)

BF₂

Omnicek 15904

1975

Cradock S., Minchcliffe A. J.

Matrix isolation.

A technique for the study
of reactive inorganic
species.

Cambridge University Press, 1975

ВФ₂

1975

Научн. руководитель

Матвеевский В. М.

(vi)

Отчет по теме:

Триблнтенский расклет
Нормализованных колеблений
некоторых неавтономных
радиальных.

Исполн. Вейс И. В.

Зурвал Л. В.

Амстердам 1955.

51002.458

Ph, Ch, TC

49587

BF₂

1975

#4-10045

Hudson Andrew, Treweek Roger F., Wiffen
John T. Structure and magnetic properti-
es of some boron containing radicals:
a molecular orbital study. "Theor. chim.
acta", 1975, 38, № 4, 355-358

(англ.)

0482 стик

430 432

1 5 1 (см. ВД; 14)

ВИНИТИ

BF₂

*4-16821

1976

Burton B; et al.

инфркт.
кв. асн.
факт

J. Chem. Soc. Dalton

Trans. 1976, N23,

2446-49

ЗСР.

(см. BH₂; III)

B $\overline{F}_2$

1976

Чаркин О. П., и др.

М. журн. хим. 1976,
21, № 8, 2022-9

(проект
эл. сеп.)

(all B $\overline{e}t_2$) III

B F₂

1976

(Dacron
zn. chip)

Рябов М.А. и др.

рыб. ген. б. Беллун
N 3625 - 76 DE17

(all. Bet) III

B F₂

Kyalo^v M. A.

1977

кв. мех.
растет
электроны.
структ.

Zh. Fiz. Khim 1977,

57(3) 770 (Russ)

(see B F₂ III)

BF₂

Sreedagar M. K.

1977

curr. no. 17, 27-38.
J. Shivaji Univ. Sci.,
1977, 17, 27-38.

• /curr Cl₂O) III

1978

Д151. Динамика нелинейных молекул типа XY_2 .
 Mohan S., Manickkavachagam R. Molecular
 dynamics of nonlinear XY_2 system. «Indian J. Pure and
 Appl. Phys.», 1978, 16, № 1, 55—57 (англ.)

По литературным данным для частот колебаний вы-
 числены силовые постоянные, средние амплитуды коле-
 баний и постоянные кориолисова взаимодействия и
 центробежного искажения ряда нелинейных трехатом-
 ных молекул (MX_2 с $M = B, C, N, Al, Zn$; $X = F, Cl,$
 Br, J). М. Р. Алиев

⊗

сил. пост.
 центроб.
 искаж.

$\left. \begin{array}{l} C \\ N \\ Al \\ Zn \end{array} \right\} X_2 \quad X = F, Cl, Br, J.$

ф. 1079, N3

Bf2

Gingerich K. A.,

1980

Current Topics in Materials
Science, Volume 6, edited by
Kaldes E.

Do;

North-Holland Publishing
Company, 1980.

(есть отпечаток в коробке
отпечатков ● Gingerich).

BF₂

Lammich 10625 1980.

Jug K., et al.

(y)

Theor. chim. acta,

kv. mex.
jacet

1980, 57, 131-144

BF-F

12 D215. Термохимические исследования радикала BF_2 . Thermochemical studies of the BF_2 radical. Lau K. H., Hildenbrand D. L. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 9, 4928—4931 (англ.)

Для получения термохимич. данных о радикале BF_2 масс-спектрометрич. способом изучен равновесный состав газовой фазы высокотемпературной ячейки Кнудсена. Значительный выход радикалов BF_2 достигнут в результате подбора компонент, заполняющих ячейку: CaF_2 и элементарный бор в твердой фазе, а также SF_6 и BF_3 — в газовой фазе. Получен потенциал ионизации радикала: $8,84 \pm 0,10$ эв, а также температурная зависимость константы равновесия $\text{BF} + \text{CaF} \rightleftharpoons \text{BF}_2 + \text{Ca}$ в газовой фазе и определена энтальпия образования $\Delta_f H_{298}^\circ(\text{BF}_2) = -124 \pm 5$ ккал/моль, что на 20 ккал/моль ниже значения, принятого для этой величины в настоящее время. На основании измеренных величин получена последовательность энергий диссоциации с разрывом связей (в ккал/моль): $D_0^\circ(\text{F}_2\text{B}-\text{F}) = 169$; $D_0^\circ(\text{FB}-\text{F}) = 110$ и $D_0^\circ(\text{B}-\text{F}) = 180$, которая обсуждается с точки зрения возможных электронных конфигураций радикалов и молекул рассмотренного ряда.

Г. А. Вомпе

D; J;

 BF_2
 (71) (44f)

 1980
 N12

 1980
 om. N27 / 1980 Hildenbrand

BF₂

Ommuck 10392

1980

veomemp.
empyrypa,
neop.
pavem

Lawlor L., Vasude-
van K., et al.,

Chem. Phys. Lett.,
1980, ● 75, N1, 79-83.

BF_2

1984

Farber M., Srivastava
R. D.

J. Chem. Phys., 1984,
81, N1, 241-244.

y;

● (corr. BF; III)

FBF

[от. 27553]

1987

Зюбина Т.С., Чаркин О.Б.,
Зюбин А.С.,

струк-
тура
и
стабильн.

Же. Неорг. химии,
1987, 32, N 11, 2616-

● - 2624.

BF₂

1989

Baird N. Colin, Kuehn
Markus, et al.

w.n.

Can. J. Chem. 1989. 67,
N.H. C. 1952-1958.

(see  BH₂; iii)

BF_2

1990

Suto Masako, Ye C.
Lee L.C.

Электрон-
ный спектр

Phys. Rev. A 1990, 42
(1), 424-31.

(сеч.  BF_3 ; III)

BF_2

1991

Dixie A. N.

M

Indian J. Pure and Appl.

Phys. 1991. 29, N 1. C:

41-42.

(cur. ● BeH_2 ; III)

1993

F: BF2

P: 3

4B145. Изучение четырех низколежащих электронных состояний радикала BF[2] методом КВ по отношению к нескольким исходным конфигурациям с учетом одно- и двухкратных возбуждений. MRSDCI studies of 4 low lying electronic states of BF[2] radical / Cai Z. L. // Int. J. Quantum Chem. - 1993. - 45, N 3. - С. 295-301. - Англ.

Р.М.Х. N4, 1996.

BF₂

1993

Квант.
Электрон.
состоян.,
структур,
т_р, теор. расч.

118: 67130r MRSD-CI studies of four low-lying electronic states of the difluoroborane (BF₂) radical. Cai, Z. L. (Dep. Chem., East China Inst. Technol., Nanjing, Peop. Rep. China 210014). *Int. J. Quantum Chem.* 1993, 45(3), 295-301 (Engl). The equil. geometries, excitation energies, force consts., and vibrational frequencies for four low-lying electronic states X²A₁, ²B₁, ²B₂, and ²A₂ of the BF₂ radical have been calcd. at the MRSDCI level with a double zeta plus polarization basis set. The calcd. excitation energy for X²A₁ → ²B₁ is in agreement with available exptl. data. The electronic transition dipole moments, oscillator strengths for the ²B₁ → X²A₁ and ²B₂ → X²A₁ transitions, radiative lifetimes for the ²B₁ and ²B₂ states, and the spin properties for the X²A₁ state were calcd. based on the MRSDCI wave functions, predicting results in reasonable agreement with available exptl. data.

C. A. 1993, 118, N 8

Bf₂

1993

Creasey I.C., Hatherly P.A.,
Jones H.M., Lambert I.R.,
Tuckett R.P.,

u.n. Mol. phys. - 1993, 78, N4,
C. 837-854.

(ill. Bf₃; ● III)

BF₂

1993

118:243652y Ab initio CI investigation of the electronic spectrum of difluoroborane(2) (BF₂). I. Calculation of the potential surfaces and the transition moments for the valence and Rydberg doublet electronic states. Peric, M.; Peyerimhoff, S. D. (Inst. Phys. Theor. Chem., Univ. Bonn, D-5300 Bonn, 1 Germany). *Mol. Phys.* 1993, 78(4), 855-75 (Eng). Results of large-scale CI calcns. of the potential surfaces for the doublet electronic states and of the corresponding transition moments in the P⁺ radical are presented. All computations are carried out in the int group. Special attention is paid to the study of interactions valence and Rydberg states.

(теорет.
расчет
потенц.
поверхности)

С. А. 1993, 118, N 24

BF₂

1993

11Д162. Неэмпирическое КВ исследование электронного спектра BF₂. I. Расчеты потенциальных поверхностей и моментов переходов для валентных и ридберговых дублетных электронных состояний. Ab initio CI investigation of the electronic spectrum of BF₂. I. Calculation of the potential surfaces and the transition moments for the valence and Rydberg doublet electronic states / Peric M., Peyerimhoff S. D. // Mol. Phys.. — 1993. — 78, № 4. — С. 855—875. — Англ.

Results of large-scale configuration interaction calculations of the potential surfaces for the doublet electronic states and of the corresponding transition moments in the BF₂ radical are presented. All computations are carried out in the C_{2v} point group. Special attention is paid to the study of interactions between valence and Rydberg states.

М.А.

1993, N11-12

BF₂

1993

11Д163. Неэмпирическое КВ исследование электронного спектра BF₂. II. Интерпретация и предсказание свойств системы поглощения и излучения $1^2A_1 \rightarrow 1^2B_1$, 2^2A_1 . Ab initio CI investigation of the electronic spectrum of BF₂. II. Interpretation and prediction of features of the $1^2A_1 \rightarrow 1^2B_1$, 2^2A_1 absorption and emission system / Perić M., Peyerimhoff S. D. // Mol. Phys.. — 1993. — 78, № 4. — С. 877—892. — Англ.

Potential energy surfaces for the 1^2A_1 , 1^2B_1 , and 2^2A_1 electronic states of BF₂ and corresponding electronic transition moment functions obtained from ab initio calculations are employed to calculate the vibronic structure of the u. v. absorption and emission spectra. The results of the calculations are employed to explain available experimental findings; they predict further spectral features not yet accessible by measurements.

М.А.

Ф. 1993, N 11-12

BF₂

1993

118: 243653z Ab initio CI investigation of the electronic spectrum of difluoroborane(2) (BF₂). II. Interpretation and prediction of features of the 1^2A_1 - 1^2B_1 , 2^2A_1 absorption and emission system. Peric, M.; Peyerimhoff, S. D. (Inst. Phys. Theor. Chem., Univ. Bonn, D-5300 Bonn, 1 Germany). *Mol. Phys.* 1993, 78(4), 877-92 (Eng). Potential energy surfaces for the 1^2A_1 , 1^2B_1 , and 2^2A_1 electronic states of BF₂ and the corresponding electronic transition moment functions obtained from ab initio calcs. are employed to calc. the vibronic structure of the UV absorption and emission spectra. The results of the calcs. are employed to explain available exptl. findings; they predict further spectral features not yet accessible by measurements.

1^2A_1 , 1^2B_1 ,
(2^2A_1 , multiplet)

C.A. 1993, 118, N24

BF₂

Om 38088

1995

122: 250777d Matrix isolation study of the interaction of excited neon atoms with BF₃: infrared spectra of BF₂, BF₂⁺, BF₂⁺, and BF₂⁻. Jacox, Marilyn E.; Thompson, Warren E. (Mol. Physics Div., Natl. Inst. Standards Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 102(12), 4747-56 (Eng). When a Ne:BF₃ sample is codeposited at ~5 K with a beam of Ne atoms that were excited in a microwave discharge, the IR spectrum of the resulting solid deposit shows prominent absorptions of BF₂. All three vibrational fundamentals and the $\nu_1 + \nu_3$ combination band of BF₂ isolated in solid Ne are identified, and a normal coordinate anal. is conducted. IR absorptions of the BF₂⁺, BF₂⁺, and BF₂⁻ mol. ions are assigned, and the processes which occur when the solid deposit is exposed to visible and UV radiation are considered.

lik currenly to
reampuse

ⓧ (+3) BF₂⁺, BF₂⁺, BF₂⁻

C.A. 1995, 122, N 20

BF₂

1995

Su, Leri; Deakne, C.A.,
et al.

(9) Wuli Huaxue Xuebao
1995, 11(10), 865-9.

(all. BF; I)

BF₂

[Om. 38656] 38761 1997

Atkinson D.B., Irikura K.K.
et al.,

Ионно-
струйная,
аб иници-
рация
у, Ae

J. Phys. Chem., 1997,
A101, 2045-2049

BF₂

От 38761, 38656 1997

19Б129. Электронная структура радикала BF₂ на основе данных неэмпирических расчетов и спектроскопии резонансно-усиленной многофотонной ионизации. Electronic structure of the BF₂ radical determined by *ab initio* calculations and resonance-enhanced multiphoton ionization spectroscopy / Atkinson Dean B., Irikura Karl K., Hudgens Jeffrey W. // J. Phys. Chem. A [J. Phys. Chem.]. — 1997. — 101, № 11. — С. 2045-2049. — Англ. Место хранения ГПНТБ России

М.Л.

X. 1997, N 19

BF₂

Om 38761, 38 856 1997

126: 244358j Electronic Structure of the BF₂ Radical Determined by ab Initio Calculations and Resonance-Enhanced Multiphoton Ionization Spectroscopy. Atkinson, Dean B.; Irikura, Karl K.; Hudgens, Jeffrey W. (Physical and Chemical Properties Division, National Institute of Standards and Technology Gaithersburg, Gaithersburg, AR 20899 USA). *J. Phys. Chem. A* 1997, 101(11), 2045-2049 (Eng), American Chemical Society. The electronic absorption spectrum of the BF₂ radical is reported. This spectrum appeared in mass-selected multiphoton ionization spectra at 235-420 nm. Strong bent-linear structure changes prevented observations of electronic origin bands. EOM-CCSD ab initio calcns. suggest that the obsd. vibrational bands arise from $\tilde{A}^2B_1 - \tilde{X}^2A_1$ ($T_{\text{vert}} = 35,100 \text{ cm}^{-1}$) 1-photon absorption and from $\tilde{B}^2A_1$ (3s) $\longrightarrow \tilde{X}^2A_1$ ($T_{\text{vert}} = 59,100 \text{ cm}^{-1}$) and $\tilde{C}$ (3p) $\longrightarrow \tilde{X}^2A_1$ ($T_{\text{vert}} = 63,100 \text{ cm}^{-1}$) 2-photon transitions. Ab initio calcns. predicted the geometries and vibrational frequencies of the ground states of the BF₂ radical, cation, and anion. Ab initio calcns. predicted the vertical transition energies to the excited electronic states from the ground state radical. QCISD(T) calcns. est. ionization potentials for BF₂ radicals of $IP_a = 8.66 \text{ eV}$ and $IP_v = 10.44 \text{ eV}$ and adiabatic and vertical electron detachment energies for BF₂⁻ of $EA = 1.14 \text{ eV}$ and $VDE = 1.64 \text{ eV}$. These ionization and detachment energies are estd. to be reliable to -0.05 and 0.10 eV, resp.

смыслу,
чекрп, J

C. A, 1997, 126, N 18

FBF

1999

Petrie, Simon;

meopem.
pacem
cmp- μ k,
 $\Delta_f H$

Int. J. Mass Spectrom.
1999, 184 (2-3), 191-199

(all. FBa^{+} , III)