

HB(OH)₂

BH OH/2

(number 6380) 1978

Kawashima Yoshiyuki, et al

M.N.

XV-3621

Chem. Phys. Lett., 1978,
57, N1, 145-147



с.с. BFHOH - III

KB (AK)₂

omm. 10803

1980

Fjeldberg T. i gr.

ab initio
parret



Ch.

H₂BOH.

KB(OH)₂

отв. 11880

1981

Boggs J. E., et al.

THEOCHEM 1981, 1 (4), 329-347.

теор. расчет
от р

сш.

K₂BOH

ВН(OH)₂

1986

11 Б1280. Структура метастабильных молекул. Микроволновые спектры $\text{ВН}(\text{ОН})_2$ и $\text{ВНF}(\text{ОН})$. Kawashima Y., Takeo H., Matsumura C. «Ниппон кагаку кайси, J. Chem. Soc. Jap., Chem. and Ind. Chem.», 1986, № 11, 1465—1475 (яп.; рез. англ.).

На микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 18—60 ГГц с точностью 0,1 МГц измерены вращат. спектры 18 изотопич. образцов цис,транс- $\text{ВН}(\text{ОН})_2$ и 10 изотопич. образцов цис- $\text{ВНF}(\text{ОН})$ в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен с учетом квадратичного центробежного искажения и В-ядерного квадрупольного взаимодействия. Для цис,транс- $^{11}\text{ВН}(\text{ОН})_2$ и цис- $^{11}\text{ВНF}(\text{ОН})$ соотв., определены вращат. постоянные в МГц $A=61912,3$ (45) и $71468,56$ (12), $B=10281,14$ (5) и $10271,221$ (21), $C=8804,55$ (7) и $8965,371$ (15) и дипольные моменты $\mu=1,465$ (10) и $2,370$ (52) D. Для обеих молекул определены r_s - и r_o -структуры. Полученные эксперим. результаты хорошо согласуются с расчетными МО-данными из первых принципов.

С. Н. Мурзин

М.Н.

41

X. 1987, 19, N 11

BH(OH)₂

DM-25258

1986

106: 57948b Structure of metastable molecules. The microwave spectra of BH(OH)₂ and BHF(OH). Kawashima, Yoshiyuki; Takeo, Harutoshi; Matsumura, Chi (Natl. Chem. Lab. Ind., Yatabe, Japan 305). *Nippon Kagaku Kaishi* 1986, (11), 1465-75 (Japan). Various isotopic species of *cis*, *trans*-BH(OH)₂ and *cis*-BHF(OH) produced as reaction intermediates between B₂H₆ and H₂O, and between BHF₂ and H₂O, resp., were obsd. by microwave spectroscopy. The *r_s* and *r₀* structures were derived from the rotational consts. obtained. Since the Kraitchman's equation gives imaginary values for some coordinates, the double substitution method was applied to the detn. of these coordinates. The detd. *r_s* structural parameters are in agreement with the *r₀* parameters detd. by least squares fitting of all the obsd. rotational consts. The dipole moments and their directions were obtained from the measurements of the Stark effect. These mol. parameters show agreement with those predicted by ab initio MO calcs.

уВ спектр,
структура

(H) ~~AT~~



BHF(OH)

C.A. 1987, 106, N 8