

1975

 BF_3 Кв. мех.
факт

168783v Boron-fluorine bond moment in boron trifluoride from CNDO/2 calculations and infrared band intensities. De Mandirola, Olga B. (Fac. Cienc. Exactas Nat., Univ. Buenos Aires, Buenos Aires, Argent.). *An. Asoc. Quim. Argent.* 1975, 63(1), 1-7 (Eng). The effective bond moment for BF_3 mols. for the A'' and E' modes were calcd. from ir intensities using the zero order theory. The CNDO/2 theory was used to calc. the hybridization contribution to the effective bond moment as -2.2 and -1.3 D for A'' and E' modes, resp. The static bond moment was calcd. as 2.9 D for both modes.

C. A. 1975. 83. N20

8662

1975

BF₃

ВФ-2273-ХV

(м.п.)

1975 №8

8 Д422. Анализ спектров комбинационного рассеяния симметричного волчка. Чисто вращательные спек-

тры ¹¹BF₃. Freedman P. A., Jones W. Jeremy. The analysis of symmetric rotor Raman spectra the pure rotational spectrum of ¹¹BF₃. «J. Mol. Spectrosc.», 1975 54, № 2, 182—190 (англ.)

Изучены вращательные спектры комб. рас. молекул ¹¹BF₃ при возбуждении линией Ar⁺-лазера 488 нм. Установлено, что молекула имеет плоскую структуру с группой симметрии D_{3h}. Отмечено сильное перекрытие R- и S-ветвей, а также наличие низколежащих колебательных уровней, комб. рас. с которых надо учитывать. Для разделения перекрывающихся линий предполагалось, что их контур может быть описан суперпозицией доплеровского и лоренцевского контуров (учитывалось также преобразование, вносимое спектрометром). Процедура разделения необходима для правильного вычисления молекулярных постоянных. Получены значения $B_0 = 0,34502 \text{ см}^{-1}$, $D_J = 4,38 \cdot 10^{-7} \text{ см}^{-1}$, $D_{JK} = -9,1 \cdot 10^{-7} \text{ см}^{-1}$. Оценена длина связи B—F — 1,31 Å. Библ. 15. В. Б.

BF₃

Чисто-
вращательный
спектр

ВФ-2.2-3-ХУ

X1975 N 16

16 Б223. Анализ спектров комбинационного рассеяния света симметричного волчка. Чисто вращательный спектр ¹¹BF₃. Freedman P. A., Jones W. Jeremy. The analysis of symmetric rotor Raman spectra the pure rotational spectrum of ¹¹BF₃. «J. Mol. Spectrosc.», 1975. 54, № 2, 182—190 (англ.)

С помощью 5 Вт Ag-ионного лазера на 1 м спектрографе с голографич. дифракционной решеткой сфотографирован чисто вращательный спектр комбинац. рассеяния света ¹¹BF₃. Измерены частоты линий и проведена идентификация спектра с учетом эффектов центробежного искажения. Из анализа вращательного спектра определены постоянные центробежного искажения, усредненные для S- и R-ветвей: $D_J = 4,38 \pm 0,10 \times 10^{-7} \text{ см}^{-1}$, $D_K = 3,6 \pm 0,1 \times 10^{-7} \text{ см}^{-1}$, $D_{JK} = -9,1 \pm 1,0 \times 10^{-7} \text{ см}^{-1}$, а также определена вращательная постоянная $B_0 = 0,34502 \pm 0,00003 \text{ см}^{-1}$. Полученные данные согласуются с результатами других авторов и с вычисленными из анализа ИК-спектров. Ввиду плоской симметрии BF₃, установленной по интенсивностям линий вращательного спектра, определен единственный структурный параметр молекулы: $r_z(\text{B-F}) = 131,10 \pm 0,01 \times 10^{-9} \text{ мм}$, к-рый очень хорошо согласуется с данными, полученными с помощью электронной дифракции.

С. Н. Мурзин

1975
XU-8662

BF₃

X4-8662

1975

(min)

147534d Analysis of symmetric rotor Raman spectra. Pure rotational spectrum of boron-11 fluoride. Freedman, P. A.; Jones, W. Jeremy (Dep. Phys. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, Engl.). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 54(2), 182-90 (Eng). The pure rotational Raman spectrum of ¹¹BF₃ was photographed. Great care was taken in the anal. to consider all the unresolved components under each observed Raman line profile. If this is ignored, systematic errors result. The final set of mol. consts. obtained was $B_0 = 0.34502(\pm 3 \times 10^{-5})$, $D_J = 4.38(\pm 0.10) \times 10^{-7}$, and $D_{JK} = -9.1(\pm 1.0) \times 10^{-7} \text{ cm}^{-1}$.

C.A. 1975. 82. N22

51013.9152

Ph, Ch, DB, TC

96615

BF_3 (сильно поет)

1975

3412

Isotani S.

A study on constrained
methods for the ^aevaluation of force
fields. "J. Mol. Struct.", 1975, 28,
N 1, 61-76
(англ.)

0487 гик

435 438

4 59

ВИНИТИ

51114.1288

Ch, TC, MGU

29857 фотогра.

BF₃ (у) спектр

1975

*4-10415

Kroto Harold W., Lappert Michael F.,
Maier Michael, Pedley J. Brian, Vidal Maria
no, Guest Martyn F. The He I photoelect-
ron spectra of mixed boron trihalides
and the microwave spectrum of BC1F₂.

"J. Chem. Soc. Chem. Commun.", 1975, N19, 810-812
(англ.)

473

474

480

0488

ММ

ВИНИТИ

BF₃

QUMS 4468

1975

BF₄

Kulkarni K.S. et al.

Indian J. Pure and
Appl. Phys. 1975, 13,
N11, 780-2.

(parent
on CF₃)

(on CF₃) III

50507.7646

Ch, Ph, TC

дискр. орбит. эл. 1
29864

BF₃

1975

*13-8935

Lloyd D. Robert, Roberts Peter J.,
Hillier Ian H. Electronic structure of
nitric acid studied by photoelectron spect-
roscopy and molecular orbital calculation.
"J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1975,
Part 2, 71, N 3, 496-503 (англ.)

335 338 03 5 1 0359 пик ВИНТИ

ВФ₃

Макив Т. Н.

1975

" Докл. АН СССР "

1975, 222, N 1, 151-154

спектр
полюс

fmn

(см К₂ F₂; III)

BF₃

1975(76)

14 Б35. Исследование некоторых ионизированных и возбужденных состояний BF₃ ССП-Х_α методом рассеянных волн. Pincelli U., Ravaldi R. MSX_α study of some ionized and excited states of BF₃: «Sci. natur. e mat. modena», 1975(1976), 106, 213—223 (англ.; рез. итал.)

С помощью ССП-Х_α метода рассеянных волн изучено электронное строение молекулы BF₃. Для обменных параметров α взяты атомные значения Шварца. Расчеты проведены для нескольких значений отношения радиусов касающихся сфер. Вычисленные по методу переходного состояния энергии ионизации составляют 16,5 эв (1a₂''), 16,6 эв (1e''), 17,0 эв (4e') и 18,1 эв (1a₂'') для верхних заполненных уровней (отклонения от эксперим. ПИ не превышают 1 эв, однако уровни 1e'' и 4e' в расчете инвертированы по сравнению с экспериментом). По методу переходного состояния в спин-поляризованном варианте получены энергии первых синглетных переходов (11,6; 13,6; 14,5; 16,4; 16,6 и 17,4 эв). Проведено обсуждение природы соответствующих возбужденных состояний и сравнение результатов расчетов с УФ- и рентгеновскими спектрами BF₃.

М. Гофман

Электрон.
строение

X.1977. N14

50812.7224
Ch, TC

BF₃ 40534
(A H⁺)

1975
3239

Pierce Robert C., Porter Richard F.

Ion-molecule chemistry of BF₃ and HBF₂
in hydrogen.

"Inorg. Chem.", 1975, 14, N 5, 1087-1093

(англ.)

0421 пик

404 404 41 0

ВИНИТИ

B₂F₃

1975

Runtz G. R.

кв. мех.
фрагмент

"Mol. Phys" 1975, 30, 12,
129-146 (англ)

(см BH₃; III)

BF₃, BCl₃, BBr₃, BI₃

• 1975

13 Б69. Изучение силового поля некоторых молекул и ионов типа XY₃. Ramaswamy K., Karunanthi S. Force field study of some XY₃ type molecules and ions. «Acta chim. Acad. sci. hung.», 1975, 87, № 2, 129—135 (англ., рез. рус.)

Методом параметрич. представления силовых постоянных вычислены силовые постоянные, средние амплитуды колебания и постоянные кориолисова взаимодействия и центробежного искажения для молекул BX₃ (X=F, Cl, Br, I) и ионов NO₃⁻, BO₃³⁻ и CO₃²⁻. Показано, что параметр формы Ф для BBr₃ и BI₃ составляет около 10°, а для остальных молекул и ионов от 20 до 29°.

М. Р. Алнев

Сил. поле

Ср. и ии.

Железач.

X 1976 № 13

(+6) 8

ВФ₃

* У-11220

1975

5 Д213. Однозначное силовое поле для тригалогенидов бора. Ramaswamy K., Jayagan L. Unique force field for boron trihalides. «Indian J. Phys.», 1975, 49, № 1, 1—8 (англ.)

Св. пост.

Методом параметрич. представления силовых постоянных по эксперим. значениям частот колебаний изотоп-замещенных молекул и кориолисовых постоянных вычислены гармонич. силовые постоянные молекул BX_3 с $X = F, Cl, Br$. Вычислены также постоянные четвертого порядка центробежного искажения и средние амплитуды колебаний этих молекул. М. Р. Алиев

(42) ☒



ф. 1976. N 5.

1975

 BF_3

* U-11220

 BCl_3 BBr_3

/33305v Unique force field for Boron trihalides. Rameswamy, K. Jayaraman, L. (Dep. Phys., Annamalai Univ., Annamalainagar, India). *Indian J. Phys.* 1975, 49(1), 1-8 (Eng). The parameter representation method was used to fix the unique force field for BF_3 , BCl_3 and BBr_3 using spectroscopic frequencies and obsd. Coriolis coupling consts. The parameter ϕ was $26^\circ 16'$, 14° , and 9° for BF_3 , BCl_3 and BBr_3 resp. Mean amplitude of vibration and rotational distortion consts. were also calcd.

E. O. Foster

(corr. noct.,
u.n.)


C.A. 1975. 93. NY

60503.7243
Ch, Ph, TC

BF_3

40892

1976

*4-12608

Bruns Roy E., Bassi A.B.M.S.

The theoretical calculation of polar
tensors and dipole moment
derivatives: BF_3 and BCl_3 .

"J.Chem.Phys.", 1976, 64, N 7, 3053-3056
(англ.)

0805 г.к.

591 592

597

ВИНИТИ

BF₃

1976

Burdett J. L.

Struct. and. Bond. 31

Berlin. e.a. 1976, 67-105.

(revised)

(all. BeF₂; III)

Оптическое 4396

1976

BF₃

24 B245. Постоянная центробежного искажения D_K молекул типа симметричного волчка. Duncan J. Lindsay. The centrifugal distortion constant D_K of symmetric top molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 60, № 1—3, 225—238 (англ.)

Вычислены значения постоянных D_T , D_{TK} и D_K кватричного центробежного искажения молекул типа симм. волчка BF_3 , SO_3 , AN_3 , AF_3 ($A=N, P, As$), BH_3D ($B=C, Si, Ge$), CH_3X ($X=F, Cl, Br, J$), CH_3CN , CH_3CCH , $H_2C_3H_2$, C_3H_6 и ряда их изотопич. разновид-

ностей. При этом использованы лит. данные по значениям гармонич. силовых постоянных и структурных параметров: для нек-рых из этих молекул использованы вновь вычисленные силовые постоянные. Вычисленные значения D_T и D_{TK} (а для отдельных молекул и D_K) согласуются с эксперим. данными: расхождение не превышает 5%.
М. Р. Алиев

мин

412

X. 1976. №24

11X
59-7575-XII

BF₃

СТУДЕН 4396

1976

✓ 171587k The centrifugal distortion constant D_K of symmetric top molecules. Duncan, J. L. (Dep. Chem., Univ. Aberdeen, Old Aberdeen, Scot.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 60(1-3), 225-38 (Eng). Centrifugal distortion consts. D_K were calcd. for the sym. top mols. RE₃, SO₃, NH₃, PH₃, AsH₃, PF₃, AsF₃, MeD, SiH₃D, GeH₃D, MeCl, MeBr, MeI, MeCN, MeCCH, H.CaH₂, cyclo-C₃H₆, and isotopic modifications thereof, in terms of their quadratic force consts. In all cases the force consts. used are reliably detd. by existing spectroscopic data. Where direct comparison is possible, good agreement with exptl. D_K values is found, and the calcd. consts. are considered reliable to $\sim \pm 5\%$.

The consts. are intended to be of assistance in future spectroscopic and structural studies on the mol. listed. Structural applications to MeI, SiH₄, and cyclopropane are considered.

(D_K)
(константы
центробежной
деформации)

С.А. 1976 84 N24

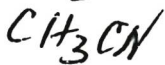
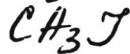
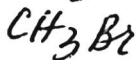
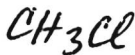
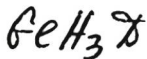
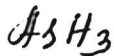
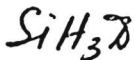
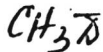
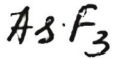


+13



(см. на стр.)

111-545-11
B99-1545-11



(конст. центр.
расшир., др.)

BF₃

мтиса 4396 1976

12 Д159. Постоянная центробежного искажения D_K молекул типа симметричного волчка. Duncan J. Lindsay. The centrifugal distortion constant D_K of symmetric top molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 60, № 1—3, 225—238 (англ.)

Вычислены значения постоянных центробежного искажения D_J , D_{JK} и D_K молекул типа симметричного волчка BF₃, SO₃, NH₃, AF₃ (A=N, P, As), BH₃D (B=C, Si, Ge), ~~CH₃X (X=F, Cl, Br, J), CH₃CN, CH₃CCl, H₂C₂H₂, C₃H₆~~ и ряда их изотопич. разновидностей. При этом использованы литературные данные о значениях гармонич. силовых постоянных и структурных параметрах; для некоторых из этих молекул использованы вновь вычисленные силовые постоянные. Вычисленные значения D_J и D_{JK} (а для отдельных молекул и D_K) согласуются с эксперим. данными; расхождение не превышает 5%. М. Р. Алиев

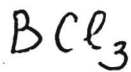
M, N.

ф 1976 N 12

(416)

11X-5751-XI
BP-1575-41

1976



18 Б74. Теоретический расчет тензоров полярности и производных дипольных моментов: BF_3 и BCl_3 . Bruns R o y E., Bassi A. B. M. S. The ~~theoretical~~ calculation of polar tensors and dipole moment derivatives: BF_3 and BCl_3 . «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 7, 3053—3056 (англ.)

кв. мех.
расчет

Сопоставлены эксперим. и рассчитанные в рамках метода ППДП значения тензоров полярности (ТП) (см. РЖХим, 1975, 4Б419) для молекул BF_3 и BCl_3 . Предложен метод преобразования элементов ТП $\partial p / \partial x_i$ (пр-ных дипольного момента по декартовым координатам данного атома) к $\partial p / \partial \theta_i$ (пр-ных дипольного момента по нормальным координатам) и $\partial p / \partial S_i$ (пр-ных дипольного момента по координатам симметрии). Найдено, что расчет по методу ППДП удобен для выбора знаков элементов ТП $\partial p / \partial \theta_i$. Приведены значения эффективных зарядов ξ_α , средних значений пр-ных

х. 1976, 18



дипольных моментов $\bar{\rho}_\alpha$ и анизотропий β_α для атомов $\alpha = \text{B}, \text{F}$ и Cl в молекулах BF_3 и BCl_3 . Эксперим. значения $\bar{\rho}_\text{F}$, ξ_F значительно больше, чем $\bar{\rho}_\text{Cl}$ и ξ_Cl , в то время как β_F и β_Cl почти одинаковы, опытное значение β_B чувствительно к замене F на Cl. Рассчитанные значения $\bar{\rho}_\alpha$, ξ_α и β_α для молекулы BF_3 достаточно хорошо согласуются с экспериментальными, для BCl_3 соответствие менее удовлетворительно.

Н. М. Клименко

BF₃
BCl₃
BBr₃

13 Б27. Расчеты тригалогенидов бора ССП X_{α} -методом рассеянных волн и сопоставление с их фотоэлектронными спектрами. Preston Harry J. T., Kaufman Joyce J., Keller Jaime, Danese J. Bryan, Connolly John W. D. MS- X_{α} calculations on boron trihalides and comparison with their photoelectron spectra. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 37, № 1, 55—59 (англ.)

С помощью ССП X_{α} метода рассеянных волн проведены вычисления электронного строения тригалогени-

дов бора BX_3 ($X=F, Cl, Br, I$). Радиусы соприкасающихся ат. сфер выбраны пропорционально соотв-щим ковалентным радиусам. Обменные параметры α взяты по Шварцу (в межсферной области — взвешенные ср. значения). Приведены энергии ионизации, вычисленные по методу переходного состояния. Их порядок согласуется с эксперим. отнесениями (за исключением близлежащих уровней $3e'$ и $1e''$, для к-рых расчет дает обратный порядок во всех случаях). Вычисл. и эксперим. ПИ согласуются в большинстве случаев в пределах 1 эв, причем согласие улучшается при переходе к более тяжелым галогенам.

М. Гофман

1976

8968
3768
677

(+2)

☆

расчет
электр.
строени.

X1976
N13

BF₃

ATTACH 3768

1976

BCl₃

BBr₃

BI₃

84: 81860q MS-X α calculations on boron trihalides and comparison with their photoelectron spectra. Preston, Harry J. T.; Kaufman, Joyce J.; Keller, Jaime; Danese, J. Bryan; Connolly, John W. D. (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, Md.). Chem. Phys. Lett. 1976, 37(1), 55-9 (Eng). The multiple-scattering X α model was applied to the sequence of boron trihalides BX₃ where X = F, Cl, Br, and I. Transition state calcs. show good agreement with the exptl. ionization potentials measured by photoelectron spectra.

(y)

(73)



C.A. 1976. 84 W12

отт. 3768

1976

BF₃

6 Д144. Расчеты тригалогенидов бора методом РВ- X_{α} и сравнение с фотоэлектронными спектрами. Preston Harry J. T., Kaufman Joyce J., Keller Jaime, Danese J. Bryan, Connolly John W. D. $MS-X_{\alpha}$ calculations on boron trihalides and comparison with their photoelectron spectra. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 37, № 1, 55—59 (англ.)

Методом рассеянных волн X_{α} , произведены расчеты потенциалов ионизации (ПИ) соединений бора типа BX_3 ($X=F, Cl, Br, J$). В каждом случае расчет производился только для одного переходного состояния, соответствующего удалению $1/2$ электрона с некоторой валентной орбитали. Результаты расчета сравниваются с определенными экспериментально методом фотоэлектронной спектроскопии ПИ; расхождения не превышают 1 эв.

В. И. Барановский

(у)

(+3)



от 1976 № 6

ВТЗ

1976

Рябов М. А.: и др.

(электр. строк.)
М. И.

Сб. Современ.
задачи в точных
науках. Вып. 2,
М. 1976, 131 - 8.



(all ВТЗ; IV)

70613.350

Ph, Ch, TC

75189

1977

BF3 (ссыл. и. и. и.) OT 5356

Alain Alain J. P., Eysel. Hans H.

L-triangular matrices in the theory
of molecular vibrations." J. chim. phys.
et phys.-chim. biol.", 1977, 74, № 2, 143-
147 (англ., рез. франц.)

0894 пер

837 848 885

ВИНИТИ

BT₃

[num 5315] / 1977

Fontal B, et al.

Spectrochim. Acta, 1977,

33A, 507-15

(Raman-спектр
поглощения)

BF₃

Xc-18897

1977

10 Д211. Критерий усредненной потенциальной энергии. Силовые поля некоторых плоских XY₃- и тетраэдрических XY₄-молекул. Girijavallabhan C. P., Joseph K. Babu, Nair S. Sasidharan. Average potential energy criterion force fields of some planar XY₃ and tetrahedral XY₄ molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 65, № 1, 142—146 (англ.)

СССР, МОСТ

Модель, основанная на усреднении потенц. энергии колебаний по нулевым колебаниям, применена для оценки силовых постоянных молекул BX₃ (X=F, Cl, Br, J), SO₂, CF₄, CCl₄, SiF₄, SiCl₄, OsO₄, RuO₄, TiCl₄, SnCl₄. Полученные значения силовых постоянных удовлетворит. согласуются с их точными значениями. Показано, что минимизация усредненной потенц. энергии деформационных колебаний, по отношению к параметру смещения координат симметрии, является лучшим критерием для оценки силовых постоянных. Этот критерий приводит к таким же соотношениям между силовыми постоянными, как и модель гибридизации Линнета.

(4/12) ☒

ф. 1977

№ 10

Xc-188972

М. Р. Алиев

$\text{BF}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

1977

$\text{H}_3\text{O}^+ \cdot \text{BF}_3\text{OH}^-$

Chemical R.P.

Ji -

87: 29724w Fluoroboric acid and its hydroxy derivatives--solubility and spectroscopy. Maya, L. (Chem. Div., Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, Tenn.). *J. Inorg. Nucl. Chem.* 1977, 39(2), 225-31 (Eng). The compn. of fluoroboric acid and its hydroxy derivvs was studied in the $\text{H}_3\text{OBF}_4\text{-HBO}_2\text{-H}_2\text{O}$ system. Soly. isotherms were detd. at 25 and 65°. H_3BO_3 is the equil. solid phase at high H_2O concns. whereas HBO_2 is the solid phase at low H_2O concns. Dihydroxyfluoroboric acid is a metastable species at 25° which disproportionates into $\text{H}_3\text{OBF}_3\text{OH}$ and HBO_2 . Trihydroxyfluoroboric acid does not exist in the pure state. NMR, IR, and Raman spectra were obtained for dihydroxyfluoroboric acid, $\text{BF}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, and intermediate compns. The fundamental vibrations in the Raman spectra of $\text{BF}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ($\text{H}_3\text{OBF}_3\text{OH}$) are almost identical with those of an aq. soln. of NaBF_3OH . Dihydroxyfluoroboric acid appears to be tetrahedral.

C.A. 1977 87 24

BF₃

omneee 5792

1974

madusa

✓

Shimanouchi T.

J. Phys. Chem. and Ref. Data,
1977, 6, 995-1102.

1977

 BF_3 SO_3

8 Б65. Пути диссоциации и молекулярные колебания. Коэффициенты влияния и координаты с минимальной энергией для BF_3 и SO_3 . Swanson B. I., Ralfalko J. J., Rzepa H. S., Dewar M. J. S. Dissociative Pathways and Molecular Vibrations. Compliance Constants and Minimum Energy Coordinates for BF_3 and SO_3 . «J. Amer. Chem. Soc.», 1977, 99, № 24, 7829—7834 (англ.)

(нужны
диссоциации)
до

С помощью расчетов коэф. влияния из данных по колебательным спектрам и расчетов по полуэмпирич. методу МПДП (модифицированное пренебрежение двухатомным перекрыванием) в приближении ССП исследованы пути с миним. энергией (ПМЭ) для мономолек. диссоциации SO_3 и BF_3 . Коэф. влияния рассчитаны по методу наименьших квадратов из частот, постоянных корриолиса взаимодействия, а также (в случае BF_3) из средних амплитуд колебаний. В методе МПДП, к-рый отличается от МЧПДП/3 сохранением большого числа двухцентровых двухэлектронных интегралов и двухцентровых интегралов при-

(+1) ☒

2, № 2/1978

тяжения электронов остовами, для ряда фиксированных значений межъядерных расстояний $B-F$ и $S-O$ приведена минимизация энергии по отношению ко всем другим координатам. Из исследования координат с миним. энергией, полученных из спектроскопич. данных, сделан вывод о гетеролитич. характере ПМЭ на начальной стадии диссоциации, что приводит к образованию BF_2^+ и SO_2^+ , и ковалентном характере на последующих стадиях, когда образуются радикалы как термодинамически более выгодные продукты р-ции. Найдено, что ПМЭ для BF_3 , рассчитанный методом МПДО, в пределах изменения расстояния $B-F$ на 0,25 Å от равновесного значения расположен параллельно ПМЭ, вычисл. по колебательным данным. Показано, что при больших смещениях включение конфигурац. взаимодействия в расчеты по методу МПДО или использование неограниченного метода Хартри—Фока, приводит к увеличению вклада возбужденных ковалентных электронных конфигураций в волновую функцию. Обсуждены области применения расчетов координат путей с миним. энергией как модели для исследования путей диссоциации.

Ю. Н. Панченко

1978

BF₃фотоэлектрон-
спектроскопия

5 Д366. Процессы фотоионизации вблизи порога.
 Ч. II. Фотоэлектронные, фотоионизационные спектры и
 спектры фотоэлектрон-фотоионных совпадений молеку-
 лы BF₃. Batten C. F., Taylor J. Ashley, Tsai
 B. H. P., Meisels G. G. Photoionization processes
 at threshold. II. Threshold photoelectron, photoionization,
 and coincidence ion-threshold photoelectron spectra of
 BF₃. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 6, 2547—2552
 (англ.)

В области от порога ионизации (~15,6 эв) до 19,7 эв
 получены фотоэлектронные спектры и кривые эффек-
 тивности фотоионизации газообразных молекул BF₃.
 Обнаружены четыре полосы, соответствующие образо-
 ванию молекулярного иона BF₃⁺ в нижних электрон-
 ных состояниях. Относит. интенсивности полос, за ис-

Ф. 1978, 115

включением второй, согласуются с ранее полученными в HeI-фотоэлектронном спектре. Вертикальные потенциалы ионизации молекулы BF_3 равны (в эв): 15,96; 16,7; 17,12 и 19,181. Анализ тонкой структуры полос позволил высказать предположение о существенном изменении геометрии молекулы при фотоионизационных переходах в три первые состояния иона. Методом фотоэлектрон-фотоионных совпадений установлено, что стабильный ион BF_3^+ образуется только при переходе в основное состояние (ниже $\sim 16,62$ эв). Результаты сопоставлены с данными других авторов. Библ. 18. Ч. I. См. Batten C. F. et al., «J. Chem. Phys.», 1976, 65, 3316. М. Т.

BT₃

1948

Chinnappan V. Q. et al

Indian J. Pure and Appl.
Phys., 1948, 16, n^o 7, 668-672.

u.n., vi:

(see. H₂O; III)

1949

BF₃

BCl₃

BI₃

BBr₃

SO₃

*расчет
(конст. центроб. перемещения)*

($\epsilon_{\alpha, \beta, \gamma, \delta}$)

C.A. 1949, 90, N2

90: 12630b Direct calculation of centrifugal distortion constants and inertia defects of flat molecules of XY₃ type from experimental data. Pulin, V. F.; Kredentser, E. I.; Sverdlov, L. M. (Sarat. Politekh. Inst., Saratov, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Fiz.* 1978, 21(8), 110-12 (Russ). A simple direct method is proposed for calcg. consta. of centrifugal distortion $\tau_{\alpha\beta\gamma\delta}$ and inertia defects of flat sym. XY₃-type mols. by using exptl. Coriolis coeffs. of frequencies and geometric parameters. The calcs. were performed on BF₃, BCl₃, BI₃, BBr₃, and SO₃.



(+4)



BF₃

1978

2 Д192. Прямое вычисление постоянных центробежного искажения и дефектов инерции плоских молекул типа XY₃ из экспериментальных данных. Пулин В. Ф., Креденцер Е. И., Свердлов Л. М. «Изв. вузов. Физика», 1978, № 8, 110—112

Предлагается простой прямой метод вычисления постоянных центробежного искажения $\tau_{\alpha\beta\gamma\sigma}$ и дефектов инерции плоских симметричных молекул типа XY₃ из эксперим. частот кориолисовой постоянной ζ_{33} и геометрич. параметров. Приводятся расчетные ф-лы и результаты расчета молекул BF₃, BCl₃, BJ₃, BBr₃ и SO₃.

Резюме

(+4) ☒



Ф. 1979.2

расчет
постоян.
центроб.
искажен.

1978

 BF_3 BCl_3 BJ_3 BBr_3 SO_3

(20183.) Прямое вычисление постоянных центробежного искажения и дефектов инерции плоских молекул типа XY_3 из экспериментальных данных. Пулин В. Ф., Креденцер Е. И., Свердлов Л. М. «Изв. вузов. Физика», 1978, № 8, 110—112

Предлагается простой прямой метод вычисления постоянных центробежного искажения $\tau_{\alpha\beta\gamma\delta}$ и дефектов инерции плоских симм. молекул типа XY_3 из эксперим. частот кориолисовой постоянной ζ_{33} и геометрич. параметров. Приводятся расчетные ф-лы и результаты расчета молекул BF_3 , BCl_3 , BJ_3 , BBr_3 и SO_3 . Резюме

(м.п.) (+4)

х. 1979 № 2

BF₃

1979

18 Б9. Образование жестких молекул из фрагментов. Boyle L. L. The formation of rigid molecules from fragments. «Mol. Phys.», 1979, 37, № 3, 855—862 (англ.)

Предложен метод определения разрешенных по симметрии состояний жесткой молекулы, образованной из двух или трех тождественных фрагментов в одинаковых электронных состояниях. Метод является обобщением правил Вигнера—Витмера на случай произвольных молек. фрагментов, обладающих заданной точечной группой симметрии, и основан на использовании соотношений между группой симметрии фрагментов и группой симметрии всей молекулы. В кач-ве примера рассмотрено построение возможных типов электронных состояний для молекулы BF₃.

Б. И. Жилинский

Электр.
состояние

2:1979/18

BF₃

ommuch 8327 / 1979

кв. мех.
факт,
E

Castro E.A.
Int. J. Quant. Chem.,
1979, 15, 355-358.

B F₃

1979

Chellam C. E., et al

J. phys. Chem. (D.D.R.)
1979, 260, N1, 47-80

расчет
эмиссии
последних

сдл. СН₄-III

BF₃

Um. 8053

1979

10 Д421. К вопросу о чисто вращательном спектре BF₃ в основном вибронном состоянии. Köppel Horst, Coulson C. A. On the pure rotational spectrum of BF₃ in its vibronic ground state. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 1, 64—69 (англ.)

Рассчитаны частоты и интенсивности линий вращательного спектра BF₃, индуцированного центробежным возмущением, при т-рах 200 и 293° К и давлении 1 атм. Индуцированный вращательный спектр состоит из линий, соответствующих правилам отбора $\Delta J = 0 \pm 1$ и $\Delta K = \pm 3$. Линии, обладающие максим. интенсивностью, лежат в области 20—40 см⁻¹. Если предположить, что контур линий является лоренцовым с полушириной 0,05 см⁻¹, то их интенсивность в максимуме достигает $3 \cdot 10^{-5}$ (моль/л)⁻¹ см⁻¹ при т-ре 293° К. Рассмотрена закономерность распределения интенсивности по отдельным линиям в спектре. Библи. 31. Н. Филиппов

ф. 1979, 110

BF₃

ommuck 8053 } 1979

7
Spaegam,
noem.

90:159496w On the pure rotational spectrum of boron trifluoride in its vibronic ground state. Koepfel, Horst; Coulson, C. A. (Phys.-Dep., Tech. Univ. Muenchen, Garching, Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 75(1), 64-9 (Eng). The centrifugally induced pure rotational absorption spectrum of BF₃ in its vibronic ground state was computed using the theory of J. K. G. Watson (1971). The max. absorption of order 10⁻⁵ (mol/L) 1 cm⁻¹ occurred in a frequency region ~30 cm⁻¹. Due to the coincidence of the Q and R branches the full spectrum exhibits an intensity alternation of the individual lines which is not present in the case of T_d mols. studied previously; it could facilitate the exptl. detection of the spectrum.

C.A. 1979, 90, 120

BF₃

Оттиски 8053

1979

20 Б217. О чисто вращательном спектре BF₃ в основном колебательном состоянии. Köppel Horst, Coulson C. A. On the pure rotational spectrum of BF₃ in its vibronic ground state. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 1, 64—69 (англ.)

На основе теории Уотсона и принятых оценок вычислен чисто вращательный спектр поглощения ¹⁰BF₃ при T=293 К в области частот от 15 до 45 см⁻¹ в основном колебательном состоянии, вызванный эффектом центробежного искажения. При давл. P=1 атм максим. поглощение достигает величины ~10⁻⁶ см⁻¹. Максимум поглощения приходится на область частот между 20 и 40 см⁻¹. Результаты расчетов хорошо согласуются с данными Алиева и Михайлова, ранее проводившими вычисления тем же методом (Aliiev M. R., Mikhail-

М. П.

Х. 1979, №20

lov V. M., «Opt. Spectrosc.», 1973, 35, 147). Обсуждается
возможность эксперим. обнаружения спектра погло-
щения $^{10}\text{BF}_3$. С. Н. Мурзин

BF₃

Commerce 9/25/

1979

37916

Karunarithi S

Chm. 12-07

Dr

Bull. Soc. chim. Belg.

1979, 88 (9), 653-655

ВФ₃ Оттис
9125

сил. пост.
Д.

1979
11 Б198. К расчету изотопных частот и силовых постоянных параметрическим методом. — Кагипапи-
thi S. On the calculation of isotopic frequencies and
force constants by parametric method. «Bull. Soc. chim.
belg.», 1979, 88, № 9, 653—655 (англ.)

По аналогии с работой Иорданова и Николовой
(Jordanov B., Nicolova B. «J. Mol. Struct.», 1973, 15,
7) предложено использовать одну и ту же ортогональ-
ную матрицу C в общем выражении для матрицы форм
колебаний как основной, $L=L_0=C$, так и изотопной,
 $L^*=L_0^*=C$, молекул. Исходные матрицы форм колеба-
ний L_0 и L_0^* получены в виде нижних треугольных
матриц путем разл. соотв-щих матриц кинематич. коэф.
 G и G^* . Рассмотрено применение такого подхода к пло-

В

Х. 1080. N 11

ским молекулам типа $\Lambda 1_z$ (матрицы 2-го порядка).
Путем варьирования в пределах от -90 до $+90^\circ$ угло-
вого параметра, входящего в матрицу собственных
вращений S , рассчитаны наборы частот изотопных мо-
лекул $^{10}\text{BF}_3$, $^{10}\text{BCl}_3$, $^{10}\text{BBr}_3$, $^{10}\text{BJ}_3$, $^{10}\text{BO}_3^-$, $^{14}\text{N}^{18}\text{O}_3^-$,
 $^{15}\text{N}^{18}\text{O}_3^-$ и $^{15}\text{N}^{16}\text{O}_3^-$. Из полученных наборов частот
отобраны по две пары частот и соотв. паре значений
углового параметра, отвечающих правильному и обрат-
ному отнесению частот. Результаты расчетов приведе-
ны в виде значений углового параметра, изотопных ча-
стот колебаний и наборов силовых постоянных.

Ю. Н. Панченко

BF_3

¹⁹⁷⁹
Liegener C., et al.

paper
(Y)

Theor. chim. acta,
1979, 52 (2), 103-111.



(com. HF; III)

Витинен 8262.

1079

12 Д164. Квадратические силовые постоянные для тригалогенидов бора. Quadratic potential functions for the boron trihalides. Rafalko J. J., Rzepa H. S., Swanson B. I. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 3, 363—367 (англ.)

По эксперим. данным для частот колебаний (включая изотопич. частоты) и постоянных кориолисова взаимодействия вырожденных колебаний вычислены силовые постоянные и коэф. влияния для молекул BX_3 с $X = F, Cl, Br, J$. Расчет коэф. влияния выполнен также полуэмпирич. методом МО и получено удовлетворительное согласие между результатами двух расчетов.

М. Р. Алиев

М. 17; ссл. пост.



Ф. 1079, 112

summary 8262

1949

BF₃

BCl₃

Ch. N. N. N.

90: 212446h Quadratic potential functions for the boron trihalides. Rafalko, J. J.; Rzepa, H. S.; Swanson, B. I. (Chem. Dep., Univ. Texas, Austin, Tex.). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 75(3), 363-7 (Eng). General quadratic compliance consts. were evaluated for the B trihalides by using frequency data and Coriolis coupling consts. obtained from a variety of sources. Coriolis data from band contour anal. are too imprecise to help det. the *E'* symmetry potential consts. Solns. obtained using Cyvin's (Cyvin, S. J., 1968) Coriolis consts. appear to be reasonable on the basis of trends in the valence compliants and interaction displacement coordinates. The semiempirical SCF-MO scheme MNDO was employed to established prior constraints of the interaction displacement coordinates in the est. of the quadratic potential consts. for BF₃ and BCl₃.

(+1) ☒



C.A. 1949, 90, N25

Оттиск. 8262

1979

BF₃

1 Б40. Квадратичные потенциальные функции для тригалогенидов бора. Rafalko J. J., Rzepa H. S.,

BCl₃

Swanson B. I. Quadratic potential functions for the boron trihalides. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 3, 365—367 (англ.)

BBr₃

Проведен расчет квадратичных силовых постоянных для BF₃, BCl₃, BBr₃ и (BJ₃) использующий эксперим. значения частот и постоянных кориолисова взаимодействия, ζ . Рассмотрено несколько независимых наборов ζ -постоянных. Для BF₃ и BCl₃ выполнен также полуэмпирич. расчет силовых постоянных в рамках модифицированного метода пренебрежения двухатомных дифференциальным перекрыванием. Отмечено, что для BF₃ и BCl₃ наилучшая оценка силового поля получена с помощью полуэмпирич. расчета. Для молекул BBr₃ и BJ₃ более предпочтительным является силовое поле, найденное при использовании данных Сивина по постоянным кориолисова взаимодействия.

Б. И. Жилинский

расчет
сир. 1980
написан
Р-Жилин.

(12) X

X. 1980. N1

BF₃

1949

Sellers H. L., Schäfer L.

J. mol. Spect., 1949, 51,
vol. 1, 117-128.

see. norm.

see. H₂O; III)

BF₃

Lommuu 8837

1979

Tossell J. A.

paerer
g.v. ebyu

Chem. Phys. Lett.

1979, 67 (2,3), 359-64

BF₃

Spiridonov V.P.; Zashurin E.Z., 1979

Modern high-temperature electron diffraction.

10th Materials Research Symposium
on characterization of high temperature, Vapors and Gases.

NBS Special Publication 561.

Volume 1, 1979, 711-756.

(у Типовира)

(2Vi, 2e,
Cul. nom.)

BF3

Gingerich R.A., 1980
Current Topics in Materials
Science, Volume 6, edited by
Kaldes E.

Do;
North-Holland Publishing
Company, 1980.

(есть оттиск в коробке
оттисков ● gingerich).

BF₃

1980

гуг К, et al.

кв. мех.
расн, I;
м. свези

Theor chim. acta, 1980,
57, №2, 131-44

см FH-III

BF₃

Qmmlca 9955

1980

BCl₃

BBr₃

BCl₂Br

BClBr₂

169363f Measurement of boron trihalide electron affinities: correlation with boron-nitrogen adduct strengths. Rothe, Erhard W.; Mathur, B. P.; Reck, Gene P. (Res. Inst. Eng. Sci., Wayne State Univ., Detroit, MI 48202 USA). *Inorg. Chem.* 1980, 19(4), 829-31 (Eng). The adiabatic electron affinities of several B trihalides were measured from the detn. of threshold kinetic energies for the reaction $Cs + BX_3 \rightarrow Cs^+ + BX_3^-$. A crossed-mol.-beam app. was used. The electron affinities are <0.0, 0.33, 0.69, 0.94, and 0.62 eV for BF₃, BCl₃, BCl₂Br, BClBr₂, and BBr₃, resp., with an error est. of about ± 0.2 eV. These electron affinities are used to obtain B-N bond energies for adducts of B trihalides with Me₃N by using an ionic energy cycle. Values are compared to direct measurements and to those estd. from NMR shift measurements.

(Ae)

(+3) ☒

CA 1980 92 N20

оттиски 9955

1980

BF₃BCl₃

Ae,

(43)



21 Б88. Измерение энергий сродства к электрону для тригалогенидов бора: корреляция со стабильностью аддуктов, обладающих связью бор — азот. Rothe E. W., Mathur B. P., Reck G. P. Measurement of boron trihalide electron affinities: correlation with boron-nitrogen adduct strengths. «Inorg. Chem.», 1980, 19, № 4, 829—831 (англ.)

Методом скрещенных молек. пучков измерены пороговые значения кинетич. энергий атомов Cs в р-циях $Cs + BX_2Y \rightarrow Cs^+ + BX_2Y^-$ (X, Y = F, Cl, Br). Из полученных эксперим. данных рассчитаны с точностью $\pm 0,2$ эВ адиабатич. энергии сродства к электрону для BF₃, BCl₃, BCl₂Br, BClBr₂ и BBr₃ оказавшиеся > 0 ; $0, -0,33, -0,69, -0,94$ и $-0,84$ эВ соотв. Эти величины использованы при расчете энергий связи B—N в аддуктах тригалогенидов бора с Me₃N. Применяемый при вычислениях энергетич. цикл включал образование ионов BX_2Y^- и Me₃N⁺, оценки энергий связи к-рых основывались на простейшей электростатич. модели. Обсуждены основные преиму-

X. 1980 N 21

щества и недостатки использованной нонной схемы энергетич. цикла по сравнению с др. схемами. Проведено сопоставление полученных результатов с данными прямых экспериментов по измерению энергии связи В—N и с оценками на основе данных ЯМР спектроскопии.

О. А. Басченко

BF₃

1981

фотоэлектр.
спектр

10 Б109. Фотоэлектронные спектры с возбуждением He-II (30,4 нм) органических молекул. Часть V. Гетеросоединения, содержащие элементы второго периода (C, H, B, N, O, F). Asbrink Leif, Svensson Agneta, Von Niessen Wolfgang, Bieri Gerhard. 30,4-nm He(II) photoelectron spectra of organic molecules. Part V. Hetero-compounds containing first-row elements (C, H, B, N, O, F). «J. Electron. Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1981, 24, № 3, 293—314 (англ.)

Измерены фотоэлектронные спектры (ФЭС) молекул BF_3 , B_2H_6 , CFN , CH_3NO , CH_3NO_2 , C_2F_2N , $C_2HF_3O_2$, $C_2H_4F_3NO$, $C_3F_3N_3$, C_3H_3NO , C_3H_5NO , $C_4F_2O_3$, C_4F_3N , C_5H_5N и $C_6H_4O_2$. Интерпретация ФЭС основана на расчетах энергий ионизации валентных МО многочастичным методом функций Грина. Часть IV см. J. El. Spectr. Relat. Phenom., 1981, 23, 281. И. А. Тополь

X. 1982, 19, N 10.

BF_3

оценка 12815

1981.

Bohm M.C., Gleiter R.

Theor. chim. acta, 1981,
59 (2), 153 - 179.

обзор,
теорет.
расч.
молеку.
орбиталей,
геометрия

1981

BF₃

Brunel Y., et al

2i

J. chim. phys. et phys.-chim.
biol., 1981, 78, n°2, 119-125

● (all H₂) III

BF_3

Оммул 11551 1981

SnCl_4

SbBr_3

32670w The harmonic force fields of boron trifluoride, tin(IV) chloride and antimony(III) bromide obtained by the joint use of electron diffraction and vibrational spectroscopy data. Gershikov, A. G.; Spiridonov, V. P. (Dep. Chem., Moscow State Univ., 117234 Moscow, USSR). *J. Mol. Struct.* 1981, 73, 91-8 (Eng). The recently developed technique of joint anal. using electron diffraction and vibrational spectroscopy data for detg. mol. force fields was demonstrated for BF_3 and SnCl_4 . The technique is based on harmonic force consts. being common parameters in the interpretational methods of both components. The general harmonic force field of SbBr_3 is obtained by using electron diffraction and recently available in phase spectroscopic frequencies of vibration.

компьютер,
суд. мет.

Dr

(+2) 

C.A. 1981, 95 NY

Оттиск 11551

1981

BF_3

SnCl_4

SbBr_3

сил. пост.
геометрич.
м.п.; $\bar{V}_i$

10 Д396. Гармонические силовые поля BF_3 , SnCl_4 и SbBr_3 , определенные при сопоставлении данных электронной дифракции и колебательной спектроскопии. The harmonic force fields of BF_3 , SnCl_4 and SbBr_3 obtained by the joint use of electron diffraction and vibrational spectroscopy data. Gershikov A. G., Spiridonov V. P. «J. Mol. Struct.», 1981, 73, 91—98 (англ.)

Проведен теоретич. анализ гармонических силовых полей молекул BF_3 (I), SnCl_4 (II) и SbBr_3 (III) путем сопоставления данных электронной дифракции и колебательных спектров I—III. Предположено, что молекулы I и II обладают плоской и тетраэдрич. структурой соответственно. Определены значения силовых постоянных связей I—III с использованием формализма численного решения по методу наименьших квадратов. Параметры обобщенного гармонич. силового поля III определены на основании данных электронной дифракции и колебательных спектров газообразного

9.10.1981

(+2) X

III. Показано, что использование общих параметров при анализе данных электронной дифракции и спектров комб. рас. и ИК-поглощения I и II позволяет повысить точность определения параметров и силовых полей этих молекул, а также оценить перспективы использования метода электронной дифракции для установления молекулярных силовых полей и частот колебаний исследуемых молекул. Библ. 60. И. В. А.

BF_3

SnCl_4

SbBr_3

Сил. пост.

(+2) ☒

Х. 1981 № 17

Оттиск 11551

1381

17 Б136. Гармонические силовые поля BF_3 , SnCl_4 и SbBr_3 , полученные при совместном использовании данных электронографии и колебательной спектроскопии. Gershikov A. G., Spiridonov V. P. The harmonic force fields of BF_3 , SnCl_4 and SbBr_3 obtained by the joint use of electron diffraction and vibrational spectroscopy data. «J. Mol. Struct.», 1981, 73, 91—98 (англ.)

На примере BF_3 и SnCl_4 изучены возможности недавно разработанной методики совместного анализа данных электронографии и колебательной спектроскопии, основанной на использовании силовых постоянных гармонич. приближения в кач-ве уточняемых параметров. С помощью этой методики уточнено обобщенное силовое поле SbBr_3 с использованием данных электронографии и недавнего измерения колебательного спектра в газовой фазе.

В. Спиридонов

BF₃

Оттиск 13002

1981

8 Б248. Измеренные и предсказанные модельные параметры полосы BF₃(ν₃) при высоких температурах. Gersh Michael E., Bernstein Lawrence S., Peterson Lauren M. Measured and predicted band model parameters of BF₃(ν₃) at high temperatures. «J. Quant. Spectrosc. and Radiol. Transfer», 1981, 26, № 5, 411—429 (англ.)

Измерены коэф. ИК-поглощения для полосы ν₃ молекулы BF₃ при высоких т-рах. Описаны два варианта аппаратуры и методики определения коэф. поглощения BF₃. Первый метод заключается в измерении ИК-поглощения в проточном реакторе с нагревом газовых смесей вплоть до 1500 К (для BF₃—Ar). Измерения проводились в условиях аэродинамически ограниченного потока с использованием многоходовой беззаконной ИК-ячейки. Второй метод основан на измерении испускания и поглощения BF₃ в пламени при

ν_i, м.п;

Х. 1982, 19, № 8

2400 К. Проанализирована т-рная зависимость контура полосы ν_3 BF_3 в интервале т-р от комн. до 2400 К. Предложен обобщенный формализм для расчета усредненного коэф. поглощения полосы s/d и усредненной по полосе плотности линий $1/d$ для перпендикулярных полос молекул типа MeF_3 . С. Б. Осин

BF₃

Оттиск 13002

1981

4 Д520. Предсказанные и измеренные модельные параметры полосы BF₃ (ν_3) при высоких температурах. Measured and predicted band model parameters of BF₃ (ν_3) at high temperatures. Gersh Michael E., Bernstein Lawrence S., Peterson Lauren M. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1981, 26, № 5, 411—429 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения BF₃ в газообразном состоянии в области колебательной полосы ν_3 BF₃. Измерения велись в газовом потоке при т-рах 295, 585, 870, 1150 и 1440 К. Получен также спектр испускания BF₃ в той же области частот в газовом потоке при т-ре 2400 К. Эксперим. контур исследованной полосы сопоставлен с рассчитанным при помощи модельных параметров S/d (усредненная интенсивность) и l/d (средняя плотность линий), вычисленных по ф-лам для полос перпендикулярных колебаний молекул MX₃ типа симметричного волчка. Для всех т-р наблюдается хо-

ИК спектр
поглощения

ф. 1982, 18, № 4.

рошее согласие расчета с экспериментом. Произведен
учет спиновой статистики ядер. Отмечено, что учет спи-
новой статистики оказывает заметное влияние лишь на
величину параметра l/d при нулевых спинах ядер.
Библ. 52. Н. Филиппов

BF₃

1981

95: 209827f Ab initio calculations of the π -bond contribution in trifluoroborane and trichloroborane. Kosmus, Walter; Kalcher, Kurt (Inst. Anorg. Anal. Chem., Karl-Franzens-Univ. Graz, A-8010 Graz, Austria). *Monatsh. Chem.* 1981, 112(10), 1123-8 (Ger). Ab initio gradient calcns. were performed on BF₃ and BCl₃ to evaluate the π -contribution in these compds. The influence of the basis set was studied for BF₃. For BCl₃, the π -contribution is smaller than for BF₃.

неопре-
делен

☒
(+1) BCl₃

C.A. 1981, 95, ~24

BF₃

1981

1) 5 Б24. Неэмпирические расчеты вкладов π -связей в BF₃ и BCl₃. Kosmus W., Kalcher K. Ab-initio-Berechnungen des π -Bindungsbeitrages in BF₃ und BCl₃. «Monatsh. Chem.», 1981, 112, № 10, 1123—1128 (нем.)

С помощью градиентного метода Пулан рассчитаны полные энергии и π -электронные энергии молекул BF₃ (I) и BCl₃ (II) в различных сгруппированных гауссовых базисах двухэкспонентного типа. Полученные результаты сопоставлены с данными ранее проведенных расчетов, в том числе в миним. базисе и полуэмпирич. расчетов. Исследовано влияние базисного набора на полную и π -электронную энергии молекулы I. Отмечено аномально сильное изменение π -электронной энергии и малое изменение полной энергии при переходе от миним. базиса к расширенному базисному набору [(9,5)/[5,3] для B, (13,8)/[5,3] для F и (13,10)/[6,5] для Cl]. Указаны наиболее вероятные значения π -электронной энергии. Результаты расчета обсуждены в



(4)

Кв. мех.
расчет

Х. 1982, 19, N 5.

терминах поляризуемости валентных электронов атомов галогенов, перекрывания их орбиталей с p_z -орбиталями атомов бора и к-тности в ряду BVg_3 , II и I.

Ю. Н. Панченко

BF₃

54097
ш. 16045

Оттиск 12721

1981

8 Д136. Исследование геометрического строения и деформационных колебаний молекул трифторидов и трихлоридов бора, алюминия и скандия методом CNDO/2. Соломоник В. Г., Озерова В. М., Са-
зонава И. Г., Краснов К. С. «Ж. структур. хи-
мии», 1981, 22, № 1, 155—157

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ППДП/2 исследовано электронное строение BF₃, BCl₃, AlF₃, AlCl₃, ScF₃, ScCl₃. Оптимизация валентных углов при фиксированных длинах связей показала, что все системы обладают плоской треугольной равновесной структурой. Рассчитаны частоты и силовые постоянные деформационных колебаний, проведен анализ заселенностей по Малликену. Отмечено существенное уменьшение полярности связей при переходе от AlX₃ к BX₃ и от MF₃ к MCl₃ и увеличение — при переходе от AlCl₃ к ScCl₃. Детально проанализирована структура ScF₃.
В. Л.

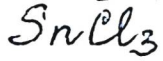
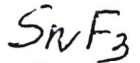
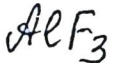
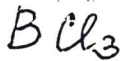
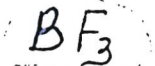
54897
ш. 15875

исв. лав.
жидкост.
вкл. масел
вкл. глицерина
и др.

Ф. 1981/18

(15)





кв. мех.
расчет

(15)

г. 1981. N 16

15878

om.

16 Б38. Исследование геометрии строения и деформационных колебаний молекул трифторидов и трихлоридов бора, алюминия и скандия методом CNDO/2. Соломонзон И. Г., Краснов К. С. «Ж. структур. химии», 1981, 22, № 1, 155—157

В полуэмпирич. приближении ПДП/2 метода МО ЛКАО исследована равновесная конфигурация ядер и характеристики деф. кол. молекул AX_3 ($A=B, Al, Sn$; $X=F, Cl$). Расстояния $A-X$ в расчете не варьировались. Равновесной конфигурацией для всех молекул является плоский треугольник симметрии D_{3h} . Вычисленные силовые постоянные и частоты плоских и неплоских деф. кол. хорошо согласуются с эксперим. данными. Эти характеристики слабо зависят от включения в базисный набор d -функций. Анализ заселенностей по Малликену показал существенное уменьшение полярности связей при переходе $AlX_3 \rightarrow BX_3$ и $AlF_3 \rightarrow AlCl_3$. Заряды на атомах металла в AlF_3 и ScF_3 близки, а в трихлоридах наблюдается заметное увеличение полярности связи при переходе $AlCl_3 \rightarrow ScCl_3$. Проведено сопоставление с имеющимися структурными данными и результатами неэмпирич. расчетов.

om.

16045

Оммух 12721

1981

BF_3

BCl_3

AlF_3

AlCl_3

ScF_3

ScCl_3

Ommuck 12721

1981

94: 182864f Study of the geometric structure and deformation vibrations of molecules of boron, aluminum, and scandium trifluorides and trichlorides by the CNDO/2 method. Solomonik, V. G.; Ozerova, V. M.; Sazonova, I. G.; Krasnov, K. S. (Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanov, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1981, 22(1), 155-7 (Russ). The force consts., deformation frequencies, and charge on metal atom were calcd. for BX_3 , AlX_3 , and ScX_3 ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}$) by the CNDO/2 method and the values were compared with the exptl. data. According to the calcs., the equil. configuration for all the mols. studied in the planar trigonal symmetry D_{3h} .

cur. no. 1000.

(15) ☒

om. 16045

C.A. 1981, 94, N22

om.

BF_3

1981

Spiridonov V. P., et al.

Difr. Stud. Non-Cryst.

Subst. Budapest, 1981,

159-195.

св. лосі.,
реферат,
структура,
М.И.

● (св. HgI_2 ; III)

BF₃

1981

3 Д469. Проявления резонанса формы в спектрах поглощения BF₃. Shape resonance effects in the photoabsorption spectra of BF₃. Swanson John R., Dill Dan, Dehmer J. L. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 2, 619—624 (англ.)

Приведены результаты расчетов спектральных зависимостей сечений дипольных переходов с заполненных орбиталей молекулы BF₃ в нейтральные возбужденные состояния и состояния, находящиеся в ионизационном континууме (до 30 эВ). Определены параметры асимметрии угловых распределений фотоэлектронов, образующихся при ионизации всех занятых молекулярных орбиталей. Отмечено хорошее соответствие расчетных результатов для внутренних К-оболочек атомов В и F и соответствующих эксперим. данных. Вблизи порога ионизации обнаружены два резонанса формы: a_1' - и e' -симметрии. Локализация p -волн на атомах фтора и l -волн вне молекулы BF₃ свидетельствуют, по мнению автора, о существенном отличии природы обнаруженных резонансов от резонансов, ранее наблюдавшихся при исследовании двухатомных молекул. Библ. 29. М. Т.

Спектр
поглощения.

ф. 1982, 18, №3.

BF₃

1982

Achiba Yohji, et al.

фотозелектр. J. Phys. Chem,
спектр, 1982, 86, N5, 681-
J. - 684.

●
(сер. (CH₃)₂O ; III)

BF_3

1982

Frost D.C., Lear W.M.,
et al.

y,

J. Phys. Chem., 1982,
86, N10, 1917-1921.

($\text{c.c.}(\text{CH}_3)\text{O} \cdot \text{BF}_3$; III)

BF₃

1982

' 96: 77105c Excitation of degenerate vibrations in nondegenerate electronic bands. Haller, E.; Koepfel, H.; Cederbaum, L. S.; Bieri, G.; Von Niessen, W. (Phys. Chem. Inst., Univ. Heidelberg, D-6900 Heidelberg, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 85(1), 12-16 (Eng). The vibrational line structure of the $2A_1'$ band in the photoelectron spectrum of BF₃ was analyzed. By using ab initio calcd. coupling consts., it is shown that some lines of this spectrum represent excitation of single quanta of the degenerate stretching vibration. They borrow their intensity from the adjacent $2E'$ state via a pseudo-Jahn-Teller interaction.

кон. и стук
тура $2A_1'$
полосы в фото
электроном.
спектре

C. A. 1982, 96, N 10.

BF₃

1982

6 Б21. Электронные эффекты координации. Перенос и поляризация электронной плотности в донорно-акцепторных комплексах оснований Шиффа с галогенидами металлов III группы. Харабаев Н. Н., Коган В. А., Осипов О. А. «Ж. общ. химии», 1982, 52, № 11, 2617—2620

На основании расчета методом ПДП электронного строения ряда галогенидов металлов MX_3 ($\text{M}=\text{B}, \text{Al}$; $\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$) и их молек. комплексов с бензальанилином показано, что относит. локализация акцептированной электронной плотности на атомах M и X существенно меняется в рядах M и X , причем степень ее локализации на атоме галогена растет в рядах $\text{M}=\text{Al}$, B и $\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$. На основании рассчитанных дипольных моментов донорно-акцепторного взаимодействия сопоставлены между собой акцептирующие св-ва молекул MX_3 и показано усиление их в ряду $\text{MF}_3, \text{MCl}_3, \text{MBr}_3$ для бора и алюминия.

Из резюме.

электрон.
эффекты
координации

45

Х. 1983, 19, 116

(III К.) $\text{BCl}_3, \text{BBr}_3, \text{AlF}_3,$
 $\text{AlCl}_3, \text{AlBr}_3$

BF₃

1982

97: 190599a Matrix isolation spectroscopic study of the boron trihalide-dimethyl ether 1:1 adducts. Hunt, Robin L.; Ault, Bruce S. (Dep. Chem., Univ. Cincinnati, Cincinnati, OH 45221 USA). *Spectrosc.: Int. J.* 1982, 1(1), 45-61 (Eng). The matrix isolation technique was coupled with IR spectroscopy to study the 1:1 adducts of the B trihalides with Me₂O and its perdeutero analog. The Ar matrix spectrum of the BF₃.Me₂O

complex was in good agreement with the thin film spectrum obtained previously, although much sharper bands were obtained. IR spectra of the BCl₃.Me₂O complex were obtained for the 1st time, and were dominated by intense B-Cl stretches at 777 and 815 cm⁻¹, while the B-O stretch was identified at 608 cm⁻¹, for the ¹¹B compd. Similarly, the 1st spectra of the 1:1 adduct BBr₃.Me₂O were recorded, and were highlighted by moderately intense B-Br stretching modes at 680 and 722 cm⁻¹, again for the ¹¹B isotope. In addn., the sym. C-O-C stretching mode of the coordinated ether was obsd. for each complex, and the position of this mode correlated well with the Lewis acidity of the B trihalide. This suggests that the sym. C-O-C stretch of Me₂O might be used as an addnl. empirical probe of the relative Lewis acidities of compds. coordinated to Me₂O.

CH₃CH₂MP

f. sample

(4) ²⁷

C.A. 1982, 97, 122

(CH₃)₂O

BF₃

1982

8 Б213. Изучение силового поля некоторых молекул типа $XY_3(D_{3h})$ методом параметрического приближения. Force field studies of some $XY_3(D_{3h})$ -type molecules by parametric representation method. Mohan S., Rajagaman S. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1982, 20, № 3, 230—232 (англ.)

Рассчитано силовое поле для плоских молекул ионов XY_3 (симметрия D_{3h}), используя метод параметрич. приближения. Расчеты проведены для BY_3 ($Y=F, Cl, Br, J$) BO_3^- и NO_3^- с использованием частот изотопозамещенных. Все недиагональные силовые постоянные связь—связь уменьшаются с уменьшением электроотрицательности центрального атома. Величины недиагональных силовых постоянных связь—угол все меньше нуля. Вычислены средние амплитуды колебаний при 298 К, константы сокращения связей, Корнелисовы постоянные (ξ) и константы центробежного искажения. С ростом массы центрального атома амплитуды колебаний уменьшаются; падают также значения ξ_3 , тогда как величины ξ_{24} возрастают.

Е. Разумова

М.П., см.
лост.

15

X. 1983, 19, N 8.

 $BAl_3, BBr_3, BF_3, BO_3^-, NO_3^-$

BF₃

1982

4 Д45. Изучение силового поля некоторых молекул типа XY_3 симметрии (D_{3h}) методом параметрического представления. Force field studies of some XY_3 (D_{3h})-type molecules by parametric representation method. Mohan S., Rajaraman S. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1982, 20, № 3, 230—232 (англ.)

Изучены силовые поля молекул BF_3 , BCl_3 , BBr_3 , BJ_3 и ионов BO_3^{3-} , NO_3^- на основе параметрич. подхода к анализу колебаний молекул. Для получения лучшего варианта силового поля в качестве дополнительных эксперим. данных использованы частоты колебаний изотопозамещенных молекул. Вычислены силовые постоянные, средние амплитуды колебаний и постоянные сжатия, кориолисовы постоянные взаимодействия и постоянные центробежного искажения. И. П. Яковлев

Vi, M. N.,
См. пост.

45 12
ф. 1982, 18, № 4.

ВФ

Отпуск 14789

1982

ав initio
расчет

Озерова В.М., Соломо-
нчук В.П. . и др.,

Цв. вузов . Химия
и хим. технол., 1982,
25, №9, ● 1078-1080.

BF₃

Om. 16047

1982

97: 205063x Theoretical study of the force field and vibrational spectrum of a boron trifluoride molecule by the MO LCAO SCF method. Ozerova, V. M.; Solomonik, V. G.; Krasnov, K. S. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Khim. Khim. Tekhnol.* 1982, 25(9), 1078-80 (Russ). MO LCAO SCF ab initio calcs. using 3 different sets of grouped Gaussian functions gave values of equil. internuclear distances, force consts., frequencies of normal vibrations, isotope shifts, and IR vibrational intensities for BF₃ mol. All 3 bases gave results which are in good agreement with exptl. data.

calc. no cm,
12;

C.A. 1982, 97, N24

BF₃

От. 16047

1982

4 Б82. Теоретическое исследование силового поля и колебательного спектра молекулы BF₃ методом МО ЛКАО ССП. Озерова В. М., Соломоник В. Г., Краснов К. С. «Изв. вузов. Химия и хим. технол.», 1982, 25, № 9, 1078—1080

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП с использованием 3 базисных наборов сгруппированных гауссовых функций, двухэкспонентном DZ (9s5p/4s2p), трехэкспонентном TZ (10s6p/5s3p) и расширенном поляризационными функциями (10s6p1d/5s3p1d) найдены равновесные межъядерные расстояния (R_e), силовые постоянные, частоты нормальных колебаний ν_i , изотопич. сдвиги и интенсивности колебаний в ИК-спектре молекулы BF₃. Все три базиса приводят к результатам, хорошо согласующимся с эксперим. данными. Отклонения теор. значений от эксперим. составляют для R_e 0,025, 0,012, —0,010 Å и для ν_i в среднем 3,2; 2,4 и 7% в базисах DZ, TZ и TZ+P соответственно. Автореферат

колебат.
спектр.

X. 1983, 19, и 4

ВТЗ

ноября 5/II-1982г.
(в печати)

авирицио
расчет.

В.Т. Соломонов,
независимые МОЛКАО
расчеты силовых полей и
колебаний спектров летного-
аппаратов морган. молекул.

BF₃

1983

✓ 17 Б1205. Спектры комбинационного рассеяния кристаллического трифторида бора. Raman spectra of crystalline boron trifluoride. Binbrek O. S., Anderson A. «Can. J. Spectrosc.», 1983, 28, № 6, 173—176 (англ.; рез. фр.)

Изучены спектры КР (λ 514,5 нм) поликрист. образцов BF₃ (I) при 20 и 80 К. Обнаружен сложный спектр в области НЧ-колебаний крист. решетки (20—130 см⁻¹) и колебания ν_3 I (~1350—1550 см⁻¹). Проведен теоретико-групповой анализ спектров внутр. и внешн. кол. (симметрия кристалла C_i^1 или $C_1^1Z_8$, позиц. симметрия молекул в кристалле C_1 , фактор-группа C_1), и проведено отнесение линий в спектрах к различным типам колебаний. Полученные данные сопоставлены с результатами исследования ИК-спектров I.

А. В. Бобров

X. 1984, 19, N 17

BF₃

1983

10 Д111. Влияние эффектов конечного состояния на формирование К-оболочечных спектров в молекуле BF₃. Final-state effects on the assignment of boron K-shell spectra in BF₃ molecules. Gianturco F. A., Semp-rini E., Stefani F. «Nuovo cim.», 1983, D2, № 3, 687—696 (англ.; рез. ит.)

спектр
поглощения

Для объяснения спектров поглощения в молекуле BF₃ выше и ниже порога ионизации предложена простая модель, в которой образование дырки в К-оболочке атома В эквивалентно изменению заряда его ядра. Предполагается, что возбуждаемый электрон испытывает действие двухямого потенциала, причем внутренняя яма локализована вблизи ядра В, внешняя — при удалении от молекулы, а барьер — в местах расположения атомов F. В рамках этой модели вычислены энергии перехода из К-оболочки на виртуальные орбитали двухямого потенциала и проведена со-

р. 1983, 18, N 10

ответствующая идентификация спектра поглощения молекулы BF_3 . Показано, что вычисленные спектры поглощения хорошо согласуются с эксперим. данными. Отмечаются недостатки предыдущих расчетов, основанных на модели «замороженного» остова. А. Воронин

BF₃

1983

7 Д268. Многомодовые эффекты Яна — Теллера и псевдоэффект Яна — Теллера в BF₃⁺. Multimode Jahn-Teller and pseudo-Jahn-Teller effects in BF₃⁺. Haller E., Köppel H., Cederbaum L. S., Von Niesen W., Bieri G. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 3, 1359—1370 (англ.)

спектр

Выполнен анализ 6 полос He II фотоэлектронных спектров молекулы BF₃, учитывающий многомодовые эффекты Яна — Теллера и псевдоэффект Яна — Теллера для возбужденных состояний иона BF₃⁺: 1A₂' , 1E'' , 3E' , 1A₂'', 2E' , 2A₁'. Положения этих состояний, ян-теллеровские и псевдо-ян-теллеровские константы линейной связи определены неэмпирически с помощью техники ф-ций Грина. Рассмотрены различные механизмы 6 указанных состояний посредством четырех мод BF₃⁺: ν₁(a₁'), ν₂(a₂''), ν₃(e'), ν₄(e'). Показано, что обе вырожденные моды ν₃ и ν₄ активны в каждом вырож-

ср. 1983, 18, № 7

BF₃⁺ (Э.и. м.п.)

денном E -состоянии, поэтому фотоэлектронные спектры существенно отличаются от спектров, полученных сверткой одномодовых спектров. Двухмодовое псевдо-Ян-теллеровское взаимодействие $1A_2'$ и $3E'$ приводит к сильному искажению потенц. поверхности $1A_2'$ и понижению ее симметрии от D_{3h} к C_{2v} . А. Воронин



BF₃(Kp)

1983

/ 100: 129058n Raman spectra of crystalline boron trifluoride. Binbrek, O. S.; Anderson, A. (Dep. Phys., Univ. Waterloo, Waterloo, ON Can. N2L 3G1). *Can. J. Spectrosc.* 1983, 28(6), 173-6 (Eng). Raman spectra of solid BF₃ at 80 and 20 K are reported. Features in the lattice and ν_3 regions were obsd. for the 1st time. The results were compared with earlier Raman and IR studies and analyzed by use of the correlation method. The origins of the main features are discussed in terms of symmetry, frequency and intensity arguments.

CKP

C.A. 1984, 100, N 16

BF_3

BF_3^+

1983

15 Б24. Многомодовый эффект Яна — Теллера и псевдоэффект Яна — Теллера в BF_3^+ . Multimode Jahn—Teller and pseudo-Jahn—Teller effects in BF_3^+ . Hal-ler E., Köppel H., Cederbaum L. S., von Nies-sen W., Bieri G. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 3, 1359—1370 (англ.)

(vi), 

В рамках теории эффекта и псевдоэффекта Яна — Теллера изучены вибронные электронно-колебательные взаимодействия в состояниях, возникающих при ионизации молекулы BF_3 и иона BF_3^+ . Расчеты энергий ионизации и констант вибронного взаимодействия проведены методом гриновских функций. Найдено, что два активных в эффекте Яна-Теллера колебания во всех состояниях симметрии E приводят к интерференц. эффектам. В ионном состоянии симметрии A_1' ($2A_1'$) возбуждаются вырожденные колебания, к-рые имеют по-

X. 1983, 19, N 15

вышнейшие интенсивности из-за наличия соседнего $2E'$ -состояния вследствие псевдоэффекта Яна-Теллера. Показано, что симметрия положит. иона в невырожденном основном состоянии должна быть ниже D_{3h} из-за двухдомодового вибронного взаимодействия со вторым возбужденным состоянием. С использованием указанных расчетов проведена интерпретация всех шести полос в фотоэлектронном (HeП) спектре BF_3 с определением тонкой колебательной структуры полос. На основании проведенного анализа эти полосы, лежащие в интервале 22—16 эВ, отнесены соответственно к $2A_1'$, $2E'$, $1A_2''$, $3E'$, $1E''$ и $1A_2'$ ионным состояниям.

С. Долин



BF_3

1983

Imai Masaru, Iizuka
Takeshi., et al.

see.
Kocur

J. Chem. Inf. Comput.
Sci. 1983, 23(1), 53-56.

(see. H_2O ; III)

XY_3

1983

BF_3

ном. Корно-
мис. Ганноф

парем

99: 184135w Empirical relations for Coriolis coupling constants of XY_3 type of molecules. Sengodan, V.; Ramalingam, P. (Dep. Phys., P.S.G. Coll. Arts Sci., Coimbatore, 641 014 India). *Bull. Soc. Chim. Belg.* 1983, 92(8), 691-4 (Eng). For calcg. the Coriolis coupling const. ξ_{ij} of planar XY_3 -type mols. (D_{3h} symmetry), new empirical relations in terms of the reduced mass and the principal

quantum no. were obtained, and were used to calc. ξ_{ij} values for the mols. MF_3 [$M = B, Sc, Y, \text{ and } La$], MCl_3 [$M = Sc, Ga, Y, \text{ and } In$], MBr_3 [$M = Sc, Ga, Y, \text{ and } In$], and MI_3 [$M = B, Sc, \text{ and } La$]. Comparisons are made with other existing calcns., and with the available exptl. data in the case of BF_3 and BI_3 .

(44) 

C. A. 1983, 99, N 22

BF₃

1983

12 Б1067. Колебательная потенциальная энергия многоатомной молекулы в пространстве зависимых внутренних координат. Смирнов М. Б. «Оптика и спектроскопия», 1983, 55, № 6, 1017—1023

Рассмотрены линейные члены потенциальной функции многоатомной молекулы в пространстве зависимых внутренних координат. Дано прямое доказательство корректности использования силовых полей Юри—Брэдли и предложена геометрич. интерпретация проблемы для случая двух зависимых координат. Вопрос о физ. содержательности учета внутренних напряжений при построении эмпирических силовых полей рассмотрен на примере молекулы BF₃. Резюме

расчет V_i ,
см. пост.
Жел., стр.

Х. 1984, 19, № 12

BF₃

1983

4 Д56. Колебательная потенциальная энергия многоатомной молекулы в пространстве зависимых внутренних координат. Смирнов М. Б. «Оптика и спектроскопия», 1983, 55, № 6, 1017—1023

Рассмотрен вопрос о линейных членах потенц. ф-ции многоатомной молекулы в пространстве зависимых внутренних координат. Дано прямое доказательство корректности использования силовых полей Юри—Брэдли и предложена геометрич. интерпретация проблемы для случая двух зависимых координат. Вопрос о физич. содержательности учета внутренних натяжений при построении эмпирич. силовых полей рассмотрен на примере молекулы BF₃.

Резюме

Колебательная
потенциальная
энергия

фр. 1984, 18, 44

BF₃

1983

100: 147578m Vibrational potential energy of a polyatomic molecule in the space of dependent internal coordinates. Smirnov, M. B. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1983, 55(6), 1017-23 (Russ). The question was examd. on linear terms of potential function of polyat. mols in space of dependent interval conduction Direct evidence is given of the corrections of the use of strong fields of the type of Yuri and Bredly and geometric interpretation is given of the problem for the case of 2 dependent coordinates. The BF₃ mol was studied as an example.

Chem. NOCM.

C.A. 1984, 100, N 18

ВТЗ

Итиск 16426

1983

Соломонов В. Г.

ab initio
расчет

Журн. структурн.

хим., 1983, 24, N1,

29-38.

BX_3

От. 21100

1984

$X = F, Cl, Br, I$

спектры,
энергии связи,
 I

11 Б1184. Основные энергии связи тригалогенидов бора, льюисовские кислотности тригалогенидов бора и теплоты образования ионов карбония. Core binding energies of the boron trihalides, Lewis acidities of the boron trihalides, and heats of formation of carbonium ions. Beach David B., Jolly William L. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 20, 4647—4649 (англ.)

В результате измерения рентгеноэлектронных спектров (РЭС) определены энергии связи (ЭС) основных Fls -, $Cl2p_{3/2}$ -, $Br3d_{5/2}$ - и $I3d_{5/2}$ -уровней в тригалогенидах BX_3 ($X = F, Cl, Br, I$). С использованием измеренных и известных из лит-ры основных ЭС соединений BX_3 и HX , а также Пт ионизации неподеленной пары в соединениях HX вычислены «потенциалы ионизации локализованных орбиталей» (ПИЛО) для валентных p -орбиталей атомов галогенов в тригалогенидах BX_3 . Анализ ПИЛО показал, что во всех молекулах BX_3 π -связь между атомами B и X сильная, причем она усиливается

Х. 1985, 19, № 11

при переходе от BJ_3 к BF_3 . Изменения прочности π -связи позволили объяснить изменения льюисовых кислотностей в тригалогенидах бора, возрастающих в ряду $\text{BF}_3 \ll \text{BCl}_3 < \text{BBr}_3$. В результате сопоставления ПИЛО и центров тяжести энергий связи полос валентных РЭС проведена новая интерпретация валентных РЭС в BX_3 . С использованием $\text{B } 1s$ -ЭС и теплот образования соединений бора $\Delta H_f^\circ (\text{B})$ и соотв. ионов карбония $\Delta H_f^\circ (\text{карб.})$ вычислены энергии замещения остова $\Delta_c = E(\text{B } 1s) + \Delta H_f^\circ (\text{B}) - \Delta H_f^\circ (\text{карб.})$ для соединений BX_3 и BN_3CO . Средняя энергия замещения остова в этих соединениях составила 186,91 эВ. И. А. Тополь.



BF₃

от. 19288

1984

11 Д93. Формализм внутренних координат для колебательно-вращательных энергий многоатомных молекул. Ч. II. Молекулы типа симметричного волчка с осью симметрии третьего порядка. Internal coordinate formulation for the vibration-rotation energies of polyatomic molecules. II. Symmetric top molecules with a threefold axis. Clodius William B., Quada Richard. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 8, 3528—3539 (англ.)

С использованием криволинейных внутренних координат для колебательных степеней свободы развита теория колебательно-вращательных взаимодействий в молекулах типа симметричного волчка. Для плоских и неплоских молекул типа XY₃ получены общие выражения для коэф. инерции, коэф. кориолисовой связи, ангармонич. коэф. колебательной кинетич. энергии. Для определения теоретических вращательно-колебательных и ко-

и-и.

НМЗ

⊗
(4)

ср. 1984, 18, 11

лебательных ангармонич. спектроскопич. коэф. использована схема возмущений Ван-Флека. Полученные результаты применены для анализа эмпирич. спектроскопич. коэф. молекул BF_3 и NH_3 и для нахождения бесконечных наборов уточненных коэф. ангармонич. потенц. энергии. Найдено, что во многих аспектах приближение криволинейных внутренних координат, использованное для исследования колебательно-вращательных взаимодействий, имеет преимущества перед приближением декартова распределения координат для деформационных мод в молекулах типа симметричного волчка.

Н. В. В.

BF_3

1984

2 Д55. Трифторид бора. Применение изгибов Кетинга к вырожденным состояниям. Boron trifluoride. Application of the Keating bendings to the degenerate vibrations. Cyvin S. J. «Spectrosc. Lett.», 1984, 17, № 9, 493—509 (англ.)

Силовое поле молекулы BF_3 определено в трех базисах координат симметрии вырожденного пространства E' : валентный, центральный и координаты Кетинга. Показано, что при расчете силовых полей молекул в вырожденном состоянии предпочтительнее использование координат Кетинга. Приведена библиография 85 названий и сводка эксперим. значений колебательных частот и констант Кориолиса молекулы BF_3 .

Е. О. Воронков

В. И. М. П.

ф. 1985, 18, № 2.

BF_3

1984

101:160297j Boron trifluoride: application of the Keating bendings to the degenerate vibrations. Cyvin, S. J. (Div. Phys. Chem., Univ. Trondheim, N-7034 Trondheim, Norway). *Spectrosc. Lett.* 1984, 17(9), 493-509 (Eng). The harmonic force field of the E' species of BF_3 was studied. The Keating force field (KFF) is defined in analogy with the familiar force fields. In this connection, 3 different coordinate sets are introduced. All of them contain bond stretchings. The exptl. data of vibrational frequencies and Coriolis consts. are reviewed extensively, as well as previous normal coordinate analyses. The different coordinate sets are tested for their usefulness as basis of force field approxns. For this purpose, 2 different sets of exptl. data were applied. The general conclusion goes in favor of the Keating coordinates.

Chem. no. cm.

C.A. 1984, 101, N18

BF₃

Om. 20360

1984

101:160299m Planar symmetrical XY₃ and boron trihalides: mean-square amplitudes and Keating coordinates. Cyvin, S. J.; Cyvin, B. N. (Div. Phys. Chem., Univ. Trondheim, N-7034 Trondheim, Norway). *Spectrosc. Lett.* 1984; 17(9), 525-35 (Eng). The *E'* block of the mean-square amplitude matrix (Σ) for the planar sym. XY₃ mol. model was treated theor. in terms of the Keating coordinates. A numerical example for ¹¹BF₃ is given. Also the mean amplitudes of vibration and Bastiansen-Morino shrinkage effect are considered. New relations which connect the mean-square amplitudes and force consts. are given. Previous works on mean amplitudes and related quantities for boron trihalides from vibrational spectroscopy and gas electron diffraction are discussed, and some new calcs. are reported.

Anal. NDCM.

C.A. 1984, 101, N18

BF₃

(Dm. 20360)

1984

3 Б1169. Плоские симметричные молекулы XY_3 и тригалогениды бора. Среднеквадратичные амплитуды колебаний и координаты Китинга. Planar symmetrical XY_3 and boron trihalides: mean-square amplitudes and keating coordinates. Cyvin S. J., Cyvin B. N. «Spectrosc. Lett.», 1984, 17, № 9, 525—535 (англ.)

С использованием координат Китинга рассмотрен блок E' -матрицы среднеквадратичных амплитуд колебаний (Σ) молекул $XY_3(D_{3h})$ в частности тригалогенидов бора. Численные расчеты проведены для молекулы BF₃. Рассмотрены также средние амплитуды колебаний и эффект сокращения (Δ) Бастиансена — Морино. Получены соотношения между среднеквадратичными амплитудами колебаний и силовыми постоянными. Дан обзор работ по экспериментальным (электронографическим) и расчетным средним амплитудам колебаний тригалогенидов бора. Библ. 42.

В. М. Ковба

М. Л., теоретр.
структура

X. 1985, 19, № 3.

BF₃

001. 20360

1984

2 Д58. Плоские симметричные молекулы XY_3 и тригалогениды бора: средние квадратичные амплитуды и координаты Кетинга. Planar, symmetrical XY_3 and boron trihalides. Mean-square amplitudes and Keating coordinates. Cyvin S. J., Cyvin B. N. «Spectrosc. Lett.», 1984, 17, № 9, 525—535 (англ.)

Получены соотношения между координатами симметрии типа E' Кетинга и валентными координатами симметрии плоских молекул XY_3 . Матрицы средних квадратичных амплитуд в координатах симметрии Кетинга Σ^k выражены через средние квадратичные амплитуды в валентных координатах Σ . Для матрицы Σ^k составлено и решено вековое уравнение с коэф., зависящими от масс X, Y и от частот колебаний и т.р. Приводятся численные значения элементов Σ^k и Σ амплитуд типа σ в естественных валентных координатах и координатах Кетинга для $^{21}\text{BF}_3$. Приведен список 39 статей, содержащих значения σ и средние колебательные амплитуды.

расчет М.П.,
ссыл. помет.

(43) ☒

$\text{BCl}_3, \text{BBr}_3, \text{BI}_3$

ф. 1985, 18, N3.

туды l тригалогенидов бора. Новые значения l_{BF} и l_{FF} в $^{11}BF_3$ получены с использованием частот изотопич. молекул и постоянных Кориолиса. Найденные силовые постоянные применены к расчету средних амплитуд колебаний $^{10}BF_3$. Вычислены значения l_{XY} и l_{YY} для всех четырех BY_3 ($Y=F, Cl, Br, J$). Рассчитан также эффект сокращения Бастиансена—Морино в $^{11}BF_3$ и $B_{10}F_3$. Получены новые соотношения между элементами матрицы Σ и силовыми постоянными. Библ. 42.

М. А. Ковнер

BF₃

1984

3 Д290. Исследование разрешаемых по углу фотоэлектронов валентных уровней BF₃ в диапазоне $17 \leq h\nu \leq 18$ эВ. Angle-resolved photoelectron study of the valence levels of BF₃ in the range $17 \leq h\nu \leq 28$ eV. Dehmer J. L., Parr A. C., Southworth S. H.,

Holland D. M. P. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1984, 30, № 4, 1783—1790 (англ.)

фотоэлектр.
спектр

Описанный ранее прибор (Parr A. C. et al. «Nucl. Instrum. Methods», 1980, 172, 357), основанный на использовании синхротронного излучения со спектральным разрешением 0,4 Å на полной ширине полумаксимума и анализом испускаемых электронов полусферич. анализатором с разрешением ~110 мэВ, применен для измерений отношений интенсивностей и угловых распределений фотоэлектронов для 6 наиболее удаленных уровней BF₃ в диапазоне $17 \leq h\nu \leq 28$ эВ. При каждой



ср. 1985, 18, №3

из рассматриваемых длин волн и всех валентных состояниях фотоэлектронные спектры регистрировались при углах вылета электронов $\theta = 0, 45$ и 90° . Для каждого из 4 разрешенных и 2 частично разрешенных фотоэлектронных пиков представлены зависимости от энергии отношений интенсивностей, рассчитанных парциальных сечений фотоионизации и параметров фотоэлектронной асимметрии, форма которых различна для различных орбиталей BF_3 . Обсуждается роль формы резонанса в динамике процессов фотоионизации BF_3 .

И. П. Флакс

BF₃

[Om 20107]
20028

1984

Dwivedi C.P.D.

геометр.,
энергии
связи, J,
и, теор.
расчет.

Pramāṇa, 1984, 23,
N 4, 529 - 539.

BF_3

1984

Farber M., Srivastava
R.D.

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

● (cor. BF; III)

BF₃

1984

3 Д291. Зависимость от энергии фотонов электронного спектра BF₃ в области энергии ионизации K-оболочки бора. Photon energy dependence of the electron spectra of BF₃ near the boron K ionisation energy. Kanamori Hideto, Iwata Suehiro, Mikuni Akira, Sasaki Taizo. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1984, 17, № 19, 3887—3900 (англ.)

фотоэл.
спектр

Измерены фотоэлектронные спектры BF₃ при энергиях фотонов 192,3; 195,9; 206 и 221 эВ. Обнаружено несколько процессов эмиссии электронов. Разрешены некоторые спектральные линии и проведена их интерпретация в рамках неэмпирич. теории МО. Четко наблюдался резонансный оже-спектр при возбуждении квазидискретного перехода ниже потенциала ионизации K-оболочки бора. Норм. оже-спектр наблюдался при возбуждении резонанса формы выше энергии ионизации. Оба спектра интерпретированы с использованием лока-

ср. 1985, 18, №3

лизированных дырочных состояний. Обсуждаются возможности применения синхротронного излучения для увеличения информативности эксперимента. Требуются также более детальные расчеты с учетом корреляции валентных электронов и смешивания непрерывных и квазидискретных состояний.

Г. К.



BF₃

1985

3 Д152. Изучение с помощью метода ССП-МР- $X\alpha$ связывания и ядерной квадрупольной связи в тригалогенидах бора. An SCF-MS- $X\alpha$ study of the bonding and nuclear quadrupole coupling in boron trihalides. Bowmaker Graham A., Boyd Peter D. W., Sorrenson Richard J. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1985, Pt2, 81, № 7, 1023—1034 (англ.)

Расчеты с помощью метода ССП-МР- $X\alpha$ проведены для тригалогенидов бора BX_3 ($X=F, Cl, Br, I$) с целью исследования химич. связей и ядерного квадрупольного взаимодействия в этих молекулах. Получено разумное совпадение (в пределах 30%) для констант галогенной связи в случае $X=Cl, Br, I$. Согласно для констант бора хуже, но они больше зависят от радиуса сферы, используемой для расчета. Представлены данные для плоскостных и внеплоскостных π -связей в этих молекулах, свидетельствующие о переносе заряда порядка 0,1e с $p\pi$ -орбиталей галогена на соответствующие p -орбитали бора. Показано, что предшествующие ре-

М.П., стук
тура

ср. 1986, 18, N3

BCl_3, BBr_3, BI_3

зультаты, основанные на данных ЯКР для галогенов и касающиеся внеплоскостного π -связывания, только случайно оказались правильными, т. к. параметры асимметрии градиента поля галогенов не определяются разностью заселенностей p_π -орбиталей галогенов. Показано, что существующие трудности в согласовании параметров квадрупольной связи галогенов и бора частично вызваны пренебрежением плоскостной π -связью, а частично — сжатием p -орбиталей.

Л. Д. Б.



BX_3

BF_3

1985

$X = F, Cl, Br, I$

4 Б1106. Исследование связи и ядерного квадрупольного взаимодействия в тригалогенидах бора методом ССП- $X\alpha$ -РВ. An SCF-MS- $X\alpha$ study of the bonding and nuclear quadrupole coupling in boron trihalides. Bowmaker Graham B., Boyd Peter D. W., Sorrenson Richard J. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1985, Pt 2, 81, № 7, 1023—1034 (англ.)

Методом ССП- $X\alpha$ рассеянных волн ($X\alpha$ -РВ) рассчитаны электронное строение и константы ядерного квадрупольного взаимодействия (КЯКВ) в молекулах BX_3 ($X = F, Cl, Br, I$). Исследована зависимость КЯКВ и др. вычисляемых характеристик от радиусов атомных сфер. КЯКВ атомов галогенов в BX_3 в пределах 30% согласуются с эксперим. значениями. Согласно между теорет. и эксперим. КЯКВ атома В несколько хуже, чем для атомов X, однако КЯКВ атома В существенно более сильно зависит от радиуса атомной сферы В в

структура

(+3)

x. 1986, 19, N 4

BCl_3, BBr_3, BI_3

молекулах. На основе анализа распределения заряда показано, что в BX_3 « π -связь» в плоскости молекулы столь же важна как и « π -связь» вне плоскости. В отличие от пред. теорет. результатов установлено, что параметры асимметрии градиента поля на ядрах X в BX_3 не определяются исключительно разностями заселенностей p_π -орбиталей галогена. Обнаружен перенос 0,1 e с p_π -орбиталей галогена на p -орбитали бора.

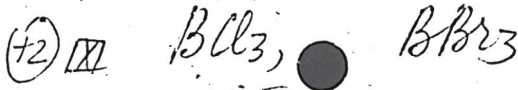
И. А. Тополь

BF₃

1985

103: 168833t An SCF-MS-X α study of the bonding and nuclear quadrupole coupling in boron trihalides. Bowmaker, Graham A.; Boyd, Peter D. W.; Sorrenson, Richard J. (Dep. Chem., Univ. Auckland, Auckland, N. Z.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1985, 81(7), 1023-34 (Eng). SCF-MS-X α MO calcns. were carried out for BX₃ (X = F, Cl, Br, I) in order to investigate their bonding and nuclear quadrupole coupling. Reasonable agreement (to within 30%) is obtained between the calcd. and obsd. halogen coupling consts. for X = Cl, Br, I. The agreement is poorer for the B coupling consts., but these are more dependent on the sphere radii used in the calcns. Similar degrees of in-plane and out-of-plane ' π bonding' are present in these mols. and result in transfer of $\sim 0.1 e$ from the halogen p_z orbitals to the appropriate B p orbitals.

meo/m
p/c/cm



C.A. 1985, 103, N20

ВТЗ

Дм. 20865

1985

Гришиков А.П., Стеризонов
В.П.,

ссыл. пост.,
структ.,
Vi

(электро-
ноугад. +
спектрск.)

Вестн. МГУ. Химия,
1985, 26, N1, 15-20.

ВТЗ

/От. 23000/

1985

Гершиков А.Т., Спирого-
нов В.П. и др.,

Расчет
центробеж.
поправок
к структ.
и колебат.
парамет-
рам.

Вестн. МТУ. Химия,
1985, 26, № 6, 531-534.

BF₃

1985

Chau F.T., McDowell
C.A.

Chem. Process.

I, re;

J. Mol. Struct.

1985, 129 (1-2), 169-
-73.

(Chem. F₂; III)

BF₃

1985

13 Б1084. Определение постоянных гармонического потенциала молекулы BF₃ совместным анализом данных электронографии и спектроскопии. Гершиков А. Г., Спиридонов В. П. «Вестн. МГУ. Химия», 1985, 26, № 1, 15—20

М. П., ссм. пост. С использованием в кач-ве параметров постоянных гармонич. потенциальной функции проведен совместный анализ эксперим. данных по интенсивностям рассеяния электронов, частотам колебаний и их изотопным сдвигам, постоянным. Кориолиса, вращат. и центробежной постоянным молекулы BF₃. Показано, что полученное значение равновесного межъядерного расстояния В—F и набор силовых постоянных характеризуется меньшей погрешностью, чем определенные из отдельных измерений. В. П. Спиридонов

Х. 1985, 19, N 13

BF₃

1985

/ 102: 194112f Determination of harmonic force constants of the boron fluoride molecule by combined analysis of electron diffraction and spectroscopic data. Gershikov, A. G.; Spiridonov, V. P. (Mosk. Univ., Moscow, USSR). *Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim.* 1985, 26(1), 15-20 (Russ). In the harmonic potential approxn., exptl. values, measured by electron diffraction and absorption spectrometry, were related functionally to the equil. internuclear distances and the force consts. of the BF₃ with D_{3h}.

(all. nocm.)

C.A. 1985, 102; N22

BF₃

1985

6 Д73. Определение постоянных гармонического потенциала молекулы BF₃ совместным анализом данных электронографии и спектроскопии. Гершиков А. Г., Спиридонов В. П. «Вестн. МГУ. Химия», 1985, 26, № 1, 15—20.

С использованием в качестве параметров постоянных гармонич. потенц. ф-ции приведен совместный анализ эксперим. данных по интенсивностям рассеяния электронов, частотам колебаний и их изотопным сдвигам, постоянным Кориолиса, вращательной и центробежной постоянной молекулы BF₃. Показано, что полученное значение равновесного межъядерного расстояния B—F и набор силовых постоянных характеризуются меньшей погрешностью, чем определенные из каждого измерения в отдельности. Выполнен также анализ относит. чувствительности постоянных потенциала к разнородным эксперим. данным.

Автореферат

м.п., геометр.
структура

ф. 1985, 18, № 6

BF_3

1985

Rosenthal G. L.

Energy Res. Abstr.

1985, 10 (1), Abstr. N° 988.

(A_F^-)

(ene. PF_5 ; III)

BF₃

1985

7 Б1099. Сопоставление модельных описаний колебательных потенциальных функций многоатомных молекул на основе квантовомеханических расчетов. Смирнов М. Б. «Применение колебат. спектров к исслед. неорган. и координац. соедин. 10 Всес. науч. совещ. Тез. докл.» Б. м., 1985, 7

Предложена схема анализа потенциальной функции (ПФ) многоатомной системы, определенной методом НДП, делающим возможным разложение ПФ на одно- и двухцентровые вклады и рассмотрение зависимости матрицы плотности от малых деформаций. Схема предусматривает разложение ПФ и ее первых и вторых пр-ных по деформациям на пространственно локализованные вклады. Анализ такого разложения для первых пр-ных обеспечивает возможность колич. оценки внутр. натяжений, а аналогичное рассмотрение вторых пр-ных позволяет охарактеризовать роль различных факторов в структуре силового поля молекулы. Численные расчеты проведены для молекул BF₃, CF₄ и SF₆. Из резюме

расчет
структур

⊗ (+2)

х. 1986, 19, N 7.

BF₃

1985

5 Л179. Наблюдение чисто вращательных переходов в основном колебательном состоянии молекулы ¹⁹BF₃ методом инфракрасно-микроволнового двойного резонанса. Pure rotational transitions in the ground vibrational state of ¹⁰BF₃ observed by infrared-microwave double resonance. Yamamoto Satoshi, Nakanaga Taisuke, Takeo Harutoshi, Matsumura Chi, Takami Michio, Kuchitsu Kozo. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 122, № 1-2, 9-11 (англ.)

Методом ИК-МВ-двойного резонанса с использованием перестраиваемого диодного лазера для ИК-зондирования и клистронов для МВ-накачки исследован чисто вращательный спектр неполярной молекулы BF₃. Идентифицированы линии переходов с $K=0 \leftarrow 3$ и $\Delta J=0$ ($J=29 \div 39$) вблизи 46 ГГц. Определены значения вращательных и центробежных постоянных ($B_0=10343,080$, $C_0=5161,40$, $D_K=0,0107$, $D_{JK}=-0,0226$ МГц) и постоянной K -удвоения $\Delta_3=0,54 \cdot 10^{-8}$ МГц. М. Р. Алиев

(B₀, D₀)

ср. 1986, 18, 15

BF₃

DM 23037

1985

8 B1206. Чисто вращательные переходы в основном колебательном состоянии $^{10}\text{BF}_3$ наблюдаемые методом инфракрасного-микроволнового двойного резонанса. Pure rotational transitions in the ground vibrational state of $^{10}\text{BF}_3$ observed by infrared-microwave double resonance. Yamamoto Satoshi, Nakanaga Taisuke, Takeo Harutoshi, Matsumura Chi, Takami Michio, Kuchitsu Kozo. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 122, № 1—2, 9—11 (англ.)

Методом двойного ИК-микроволнового резонанса с использованием перестраиваемого полупроводникового лазера измерены вращат. переходы в молекуле $^{10}\text{BF}_3$, проявляющиеся за счет дипольного момента, индуцированного центробежным искажением в основном колебат. состоянии ($\mu_{\text{эф.}} \approx 0,006 \text{ D}$ для $J=33$). Значение аксиальной вращат. постоянной $C_c = 5161,40 \pm \pm 0,05 \text{ МГц}$; расщепление $A_1 - A_2$ уровня $K=3$ составляет $20,4 \pm 3,8 \text{ МГц}$ для $J=39$; $\Delta_3 = (0,54 \pm 0,10) \cdot 10^{-8} \text{ МГц}$ (при анализе B_0 , D_{JK} , D_K фиксировались, а H_{JKK} и H_{KKK} не учитывались). В. М. Ковба

M. N.

X. 1986, 19, № 8

BF₃

292368
om.

М.П.

~~ИИХ АСБ~~ 1985

9 Б1273. Спектроскопия инфракрасного-микроволнового двойного резонанса полосы ν_3 $^{11}\text{BF}_3$ с использованием перестраиваемого диодного лазера. Infrared-micro-wave double resonance spectroscopy of the ν_3 band of $^{11}\text{BF}_3$ using a tunable diode laser. Yamamoto S., Kuchitsu K., Nakanaga T., Takeo H., Matsumura C., Takami M. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 4, 1444—1448 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

С использованием микроволновых (МВ) источников в обл. частот 20—55 ГГц и перестраиваемого диодного лазера в диапазоне длин волн вблизи 7 мкм методом ИК—МВ двойного резонанса измерен чисто вращат. спектр $^{11}\text{BF}_3$ в возбужденном ν_3 колебат. состоянии. Дипольный момент, перпендикулярный плоскости молекулы симметрии D_{3h} , индуцирован за счет вырожденной ν_3 колебат. моды. С учетом анализа ИК-спектра ν_3 полосы $^{11}\text{BF}_3$ определены вращат. постоянная $S_0 = 5138,546$ (7) МГц, квартичные и секстичные постоянные центробежного искажения. Из анализа уширения линий за счет эффекта насыщения оценена величина колебательно индуцированного дипольного момента $0,04D$ с неопределенностью $0,03—0,06D$. С. Н. Мурзин

Х. 1987, 19, № 9

BF₃

(Dm. 23037)

1985

104: 26304t Pure rotational transitions in the ground vibrational state of boron-10 trifluoride observed by infrared-microwave double resonance. Yamamoto, Satoshi; Nakanaga, Taisuke; Takeo, Harutoshi; Matsumura, Chi; Takami, Michio; Kuchitsu, Kozo (Fac. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 113). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 122(1-2), 9-11 (Eng). Rotational transitions of ¹⁰BF₃ due to the centrifugal distortion-induced dipole moment in the ground vibrational state were obsd. by IR-microwave ODR using a tunable diode laser. The axial rotational const., C₀, is 5161.40 ± 0.05 MHz. The A₁-A₂ splitting of the K = 3 level is 20.4 ± 3.8 MHz for J = 39.

мембрана-
улам. черк,
флам-
номоти.

c.A. 1986, 104, NY

BF₃

(Om. 23836)

1985

(D₃)

/ 103: 112418u Infrared-microwave double resonance spectroscopy of the ν_3 band of boron-11 trifluoride using a tunable diode laser. Yamamoto, Satoshi; Kuchitsu, Kozo; Nakanaga, Taisuke; Takeo, Harutoshi; Matsumura, Chi; Takami, Michio (Fac. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 113). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(4), 1444-8 (Eng). Pure rotational transitions in the ν_3 state (E') of ¹¹BF₃ due to vibrationally induced dipole moment were obsd. by IR-microwave double resonance using a tunable diode laser. The induced dipole moment is $0.04 \pm 0.02_{-0.01}^{+0.02}$ D from the power broadening of the double resonance signals. The rotational const. C_0 was detd. exptl. by use of the obsd. IR and microwave transitions to be 5161.4(6) MHz.

C. A. 1985, 103, N 14.

BF₃

1986

Durrant M.C.,
Megde M.S., et al.

et al.
J. Chem. Phys., 1986,
85, N 11, 6356-6360.

(cu. ● H₂O · BF₃; III)

BF_3

1986

Lohr Lawrence L.,
Popa Jean Michel Y.

(2y)

J. Chem. Phys. 1986,
84 (8), 4196-204.

(cer. NH_3 ; III)

BF₃

1986

8 Д71. Расчет силового поля некоторых плоских молекул типа XY_3 параметрическим методом. Parametric approach to the force field study of some XY_3 planar molecules. Mohan S., Durai S., Dwarakanathan S. P. «Acta phys. pol.», 1986, A 69, № 2, 319—324 (англ.)

Методом параметрич. представления формы колебаний из эксперим. данных по частотам колебаний и средним амплитудам колебаний вычислены силовые постоянные, постоянные корриолисова взаимодействия и квартичного центробежного искажения молекул BX_3 ($X=F, Cl, Br, I$), $FeCl_3$ и GaI_3 . М. Р. Алиев

(М.П.)

(75) 

ср. 1986, 18, № 8

 BCl_3, BBr_3, BI_3
 $FeCl_3, GaI_3$

BF₃

1986

14 Б1216. Параметрический подход к изучению силовых полей некоторых плоских молекул XY₃. Parametric approach to the force field study of some XY₃ planar molecules. Mohan S., Durai S., Dwarakanathan S. P. «Acta phys. pol.», 1986, A69, № 2, 319—324 (англ.)

Для расчета силовых полей молекул BF₃, BCl₃, BBr₃, BJ₃, FeCl₃, GaJ₃ симметрии D_{3h} применен параметрич. подход, заключающийся в данном случае в использовании экспериментально определенных амплитуд колебаний помимо данных о геометрич. структуре и частотах колебаний. Значения полученных силовых постоянных $f_d, f_{dd}, f_\alpha, f_{d\alpha}, f_\delta$ (в 10⁵ дн/см): BF₃ — 9,08159; —0,04543; 0,38948; —0,95329; 0,29431; BCl₃ — 3,88415; 0,34407; 0,14890; —0,17059; 0,13807; BBr₃ — 4,87476; —0,58636; 0,23000; —0,78926; 0,09977; BJ₃ — 2,56199; 0,06859; 0,08583; —0,16549; 0,07908; FeCl₃ — 2,51862; —0,06749; 0,04034; —0,14276; 0,03255; GaJ₃ — 1,86760; —0,11187; 0,03639; 0,15502; 0,01544. Приведены также рассчитанные постоянные кориолисова взаимодействия и центробежного искажения.

В. М. Ковба

45

В. М. К.,
сил. пост.,
геометр.,
структура

Х. 1986, 19, N 14

BF₃

(Om. 25383)

1986

Novick S.E.,

J. Phys. Chem., 1986, 90,
N 17, 3871-3873.

оценки
молекул.
квадратич.
момента
и попереч-
ности

ВФЗ

совместн.
анализ
электро-
нограф.
и спектр.
данных.

Спирidonов В. П., Тер- 1986
шиков А. П. и др.,

Исследование структуры
и энергетической молекулы.

Межвузовский сборник
научных трудов Ивановского
химико-технологического
института, Иваново, 1986,
53-64.

(есть в картотеке) 53-64

BF₃

DM. 23392

1986

104: 195623b Molecular potential functions from joint analysis of gas electron diffraction and spectroscopic data. Spiridonov, V. P.; Gershikov, A. G. (Dep. Chem., Moscow State Univ., V-23; Moscow, USSR). *J. Mol. Struct.* 1986, 140(3-4), 173-91 (Engl). A joint anal. of electron diffraction and spectroscopic data was made for BF₃, PBr₃, AsBr₃, SbCl₃, SeO₂, and ClO₂ in terms of the harmonic force fields. The scheme of anal. was extended to include the following spectroscopic observables: vibrational frequencies, rotational Coriolis coupling and centrifugal distortion consts. and, whenever available, those for the isotopic species. For ClO₂ a simplified anharmonic anal. was also performed, the anharmonic spectroscopic observables being involved in this case. Compelling evidence is presented that the conventional harmonic approxn. for the force field in terms of rectilinear internal coordinates yields the simplest satisfactory representation of diffraction and spectroscopic observations. However, a consistently better fit to exptl. data was found when natural curvilinear internal coordinates were used. For the systems considered the joint anal. of data from various sources ensures that reliable and accurate values for equil. distances and force field parameters are obtained. The optimized values of spectroscopic consts., structural and force field parameters obtained are presented and compared with those available from the literature.

nometic. p-ue,
Di, cur. no cm

(15) 10

e. A. 1986, 104, N 22

BF₃

1986

Д7 Д42. Получение информации о молекулярных потенциальных функциях с помощью совместного анализа данных по дифракции электронов и спектроскопических данных. Molecular potential functions from joint analysis of gas electron diffraction and spectroscopic data. Spiridonov V. P., Gershikov A. G. «J. Mol. Struct.», 1986, 140, № 3—4, 173—191 (англ.)

Для получения сведений о молекулярных потенциальных функциях BF₃, PBr₃, AsBr₃, SbCl₃, SeO₂ и ClO₂ в рамках приближения гармонических силовых полей проведен совместный анализ данных по дифракции

(М.П.)

(15) 17

ср. 1986, 18, № 7

электронов и спектроскопич. результатов. Рассматривались колебательные частоты, вращательные константы, константы кориолисова взаимодействия и центробежного возмущения. Для ClO_2 проводился анализ с учетом ангармоничности колебаний. Наилучшее совпадение экспериментальных и расчетных данных получается при использовании в расчетах естественных криволинейных внутренних координат. Показано, что совместный анализ обеспечивает получение наиболее точных величин параметров рассмотренных молекул. Приводятся оптимизированные величины спектроскопич. констант, параметров структуры и силового поля. Г. К.

BF₃

DM 23392

1986

13 Б1114. Молекулярные потенциальные функции из совместного анализа электронографических и спектральных данных. Molecular potential functions from joint analysis of gas electron diffraction and spectroscopic data. Spiridonov V. P., Gershikov A. G. «J. Mol. Struct.», 1986, 140, № 3—4, 173—191 (англ.)

Совместный анализ электронографич. и спектроскопич. данных проведен для BF_3 , PBr_3 , AsBr_3 , SbCl_3 , SeO_2 и ClO_2 в терминах гармонич. силовых полей. Из спектроскопич. данных учитывались частоты колебаний, вращательные, кориолисовы константы и постоянные центробежного растяжения, в т. ч. для изотопозамещ. соединений. Для ClO_2 проведен упрощенный анггармонич. анализ. Показано, что гармонич. приближение для силового поля в линеаризованных внутр. координатах позволяет удовлетворительно интерпретировать дифракционные и спектроскопич. данные. Существенно лучшее согласие с эксперим. данными достигнуто при использовании естественных криволинейных внутр. координат. Для всех рассмотренных систем совместный анализ данных различных методов гарантирует получение более надежных и точных значений равновесных расстояний и параметров силового поля. Б. Бутаев

м.п., ν_i ,
см. пост.

Х. 1986, 19, № 13

BF₃

[om. 25007]

1986

Tossell J. A., Lazzeret-
ti P.

построен-
ного
квадратной
расширен-
ав initio
расширен

J. Phys. B: Atom and
Mol. Phys., 1986, 19,
N 20, ● 3217 - 3226.

BF₃

1986

21 Б1274. Изучение полосы ν_3 молекулы BF_3 методом инфракрасно-микроволнового двойного резонанса с использованием перестраиваемого диодного лазера. Infrared—microwave double resonance spectroscopy of the ν_3 band of BF_3 using a tunable diode laser. Yamamoto S., Kuchitsu K., Nakanaga Harutosni T., Matsumura Chi, Takami M. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 11, 6027—6033 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Исследован чисто вращат. спектр неполярной молекулы BF_3 в основном и возбужденном ($\nu_3=1$) колебат. состояниях методом двойного ИК—МВ-резонанса с использованием полупроводникового диодного лазера для накачки ИК-переходов: вращат. спектр основного состояния появляется за счет центробежного искажения, а возбужденного состояния — за счет мех. и электрооптич. ангармоничности. В диапазоне 20—53 ГГц идентифи-

М.А.

X. 1986, 19, N21

цированы линии 55 переходов с $J \leq 29$ состояния $v_3=1$ $^{10}\text{BF}_3$, 50 переходов с $J \leq 22$ $^{11}\text{BF}_3(v_3=1)$ и 6 переходов ($J \leq 39$) основного состояния $^{10}\text{BF}_3$. При анализе спектров привлечены также лит. данные по вращат. структуре ИК-полосы v_3 (1506 см^{-1}) и частоты ранее измеренных МВ-спектров основного состояния. Анализ проведен с учетом резонансов Ферми между v_3 и $3v_3$ и между v_3 и v_1+v_4 . Определены значения колебат. вращат. постоянных. В частности для вращат. и центробежных постоянных основного состояния получены величины: $C_0=0,1721658$, $B_0=0,345008$, $D_J=0,4338 \cdot 10^{-6}$, $D_{JK}=-0,7530 \cdot 10^{-6}$, $D_K=0,3526 \cdot 10^{-6}$, Δ_3 (константа $K=3$ -удвоения) $=0,1791 \cdot 10^{-12}$ (все в см^{-1}). Е. В. Алиева

BF₃

1986

7 Л182. ИК-диодно-лазерная спектроскопия полосы ν_2 BF₃. Infrared diode laser spectroscopy of the ν_2 band of BF₃. Yamamoto Satoshi, Kuwabara Rika, Takami Michio, Kuchitsu Kozo. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 115, № 2, 333—352 (англ.)

Методом диодно-лазерной спектроскопии в области 740—650 см⁻¹ исследованы ИК-спектры поглощения колебательно-вращательных полос ν_2 , $\nu_2 + \nu_4 - \nu_4$, $2\nu_2 - \nu_2$ ¹⁰BF₃, ¹¹BF₃ и $\nu_1 + \nu_2 - \nu_1$ ¹¹BF₃. При комнатной т-ре и давл. BF₃ 0,1—1,0 мм рт. ст. с разрешением, ограниченным доплеровским пределом (0,001 см⁻¹), измерены положения вращательных линий и с учетом l-резонансных взаимодействий между ν_4 и $\nu_2 + \nu_4$ выполнен анализ наблюдаемых вращательных структур. Определены положения начала полос и значения молекулярных постоянных ¹⁰BF₃, ¹¹BF₃ для ряда возбужденных колебательных состояний. Найдены значения некоторых кубических постоянных силового поля и равновесного расстояния В—F, 1,3070 Å. В. К.

(Ге, М.П.)

ф. 1986, 18, № 7.

BF₃

1986

У 10 Л141. Изучение спектра ИК-микроволнового двойного резонанса полосы ν_3 молекулы BF₃ с использованием перестраиваемого диодного лазера. Infrared-microwave double resonance spectroscopy of the ν_3 band of BF₃ using a tunable diode laser. Yamamoto Satoshi, Kuchitsu Kozo, Nakanaga Taisuke, Takeo Hargetoshi, Matsumura Chi, Takami Michio. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 11, 6027—6033 (англ.)

М.А.

Методом двойного ИК-МВ-резонанса с использованием перестраиваемого диодного лазера для накачки ИК-переходов исследован чисто вращательный спектр первого возбужденного состояния (1454 см^{-1}) колебания ν_3 молекулы BF₃, разрешенный за счет электрооптического и механич. ангармонизма. Идентифицирова-

ср. 1986, 18, n 10

ны линии переходов с $\Delta K = \pm 1$, $\Delta l = \mp 2$, $\Delta J = 0 \pm 1$ с $J \leq 29$, $K \leq 9$ $^{10}\text{BF}_3$ и $J \leq 22$, $K \leq 11$ $^{11}\text{BF}_3$ в состоянии с $v_3 = 1$ и 6 переходов с $J \leq 39$, $K \leq 3$, $\Delta K = -3$ основного колебательного состояния $^{10}\text{BF}_3$. Анализ спектров выполнен совместно с литер. данными по ИК-спектрам полосы v_3 и по МВ-спектрам основного состояния с учетом резонанса Ферми между v_3 и $v_1 + v_4$ и между $3v_3$ и $3v_4$. Определены значения вращательных и центробежных постоянных, постоянных кориолисового взаимодействия и l -удвоения, резонансных параметров. М. Р. Алиев

BF₃

DM-24681

1986

(P₃)

105: 32017p Infrared-microwave double resonance spectroscopy of the ν_3 band of trifluoroborane (BF₃) using a tunable diode laser. Yamamoto, Satoshi; Kuchitsu, Kozo; Nakanaga, Taisuke; Takeo, Harutoshi; Matsumura, Chi; Takami, Michio. (Fac. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 113). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(11), 6027-33 (Eng). Pure rotational transitions allowed by vibrationally induced dipole moment were obsd. in the ν_3 state (E') of ¹⁰BF₃ by IR-microwave ODR using a tunable diode laser. The obsd. rotational transitions were analyzed simultaneously with the IR vibration-rotation transitions and pure rotational transitions in the ground state to obtain the mol. consts. for the ground and ν_3 states. The C_0 and D_K consts. are 0.172 165 83(8) and $3.526(14) \times 10^{-7}$ cm⁻¹, resp. Rotational transitions in the ν_3 state of ¹¹BF₃ reported previously were also analyzed with IR vibration-rotation transitions including the Fermi resonance with $3\nu_4$.

ИК-МВ
двойной
резонанс

С.А. 1986, 105, N 4

BF₃

(Om. 23280)

1986

104; 118869] Infrared diode laser spectroscopy of the ν_2 band of boron trifluoride. Yamamoto, Satoshi; Kuwabara, Rika; Takami, Michio; Kuchitsu, Kozo (Fac. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 113). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 115(2), 333-52 (Eng). The vibration-rotation spectra of the ν_2 , $\nu_2 + \nu_4 - \nu_4$, and $2\nu_2 - \nu_2$ bands for $^{10}\text{BF}_3$ and $^{11}\text{BF}_3$, and the $\nu_1 + \nu_2 - \nu_1$ band for $^{11}\text{BF}_3$ were measured by a tunable diode laser with Doppler-limited resolu. (0.001 cm^{-1}). The $\nu_2 + \nu_4 - \nu_4$ band is perturbed significantly by the l -resonance interactions in the ν_4 and $\nu_2 + \nu_4$ states. By analyzing this interaction explicitly, the l -type doubling consts. for the ν_4 state of $^{10}\text{BF}_3$ and $^{11}\text{BF}_3$ and $^{11}\text{BF}_3$ were 0.000694(4) and 0.000670(3) cm^{-1} , resp. The equil. B-F distance, 1.3070(1) Å, and several cubic force consts. were obtained from the detd. rotational consts.

(UK encomp)

C. A. 1986, 104, N 14.

BF_3

1987

9 Б4313. Спектроскопия двойного (ИК-СВЧ) резонанса ν_3 -полосы $^{11}\text{BF}_3$ с использованием перестраиваемого диодного лазера. Nakagawa T., Takeo H., Matsumura S. «Кагаку гидзюцу кэнкюдзё хококу, J. Nat. Chem. Lab. Ind.», 1987, 1987, 82, № 10, 451—456 (яп.; рез. англ.)

Изучены чисто вращат. переходы за счет колебательно-индуцируемого дипольного момента (КИДМ) в состоянии $\nu_3(E')$ $^{11}\text{BF}_3$. Применен метод двойного — ИК—СВЧ-резонанса с использованием перестраиваемого диодного лазера. Измеренный по уширению линий КИДМ равен 0,04D. Измерена вращат. постоянная $S_0 = 5161,4$ (6) МГц. Аналогичную публикацию авторов см. «J. Chem. Phys.», (1985), 83, 1444. Л. Ю. Мельников

Вращат.
постоян.

X. 1988, 19, 29

BF₃

1987

15 Б1238. Чисто вращательный спектр трифторида бора-¹¹B по данным микроволновой фурье-спектроскопии. Pure rotational spectrum of boron trifluoride-¹¹B observed by microwave Fourier transform spectroscopy. Oldani M., Bauder A. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 2, 624—628 (англ.)

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре высокой чувствительности в области частот 12—18 ГГц с разрешением около 200 кГц измерен вращат. спектр трифторида бора, ¹¹BF₃, в основном колебат. состоянии. Спектр поглощения неполярной молекулы индуцирован за счет центробежного искажения и представляет собой первый непосредственно измеренный чисто вращат. спектр неполярной молекулы типа симм. волчка XY₃ в МВ-области частот. Анализ МВ-спектра выполнен с учетом кватерного и секстичного центробежного искажения. Вращат. постоянные (МГц): равны $B=10344,057(15)$ и $C=5161,6371(79)$. Полученные МВ-результаты существенно уточняют ранее измеренные на основе ИК-данных.

С. Н. Мурзин

М. П.

Х. 1987, 19, № 15

BF₃

1987

- 8 Л177. Чисто вращательный спектр трифторида бора — ¹¹B, наблюдаемый в микроволновой спектроскопии преобразования Фурье. Pure rotational spectrum of boron trifluoride — ¹¹B observed by microwave Fourier transform spectroscopy. Oldani M., Bauder A. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 2, 624—628 (англ.)

В микроволн. области частот (14—17 ГГц) измерены частоты чисто вращательных переходов плоской молекулы ¹¹BF₃ с симметрией D_{3h} в основном колебательном состоянии. Измеренные переходы подчиняются правилам отбора $\Delta k = \pm 3$, где k — квантовое число проекции углового момента молекулы на ось симметрии. Экстремально слабые переходы Q-, R- и P-ветвей наблюдались с использованием импульсного микроволн. фурье-спектрометра. Ветвь Q между $k = \pm 1$ и $k = \mp 2$ отнесена к переходам с числами J от $J = 11$ до $J = 50$, где J — квантовое число углового момента молекулы. Идентифицированы переходы R- и P-ветвей с числами J между 17 и 45 и с числами k между 10 и 32. Частоты измеренных 60 переходов приведены в таблице и соотнесены с молекулярными постоянными B , $C-B$, D_J , D_{JK} , D_K , H_J , H_{JK} , H_{KJ} и H_K .

В. А. Морозов

М. П.

ср. 1987, 18, 18

¹¹BF₃

1987

уعمو fra-
изам. чукр,
М.А.

106: 75264c Pure rotational spectrum of boron trifluoride-¹¹B observed by microwave Fourier transform spectroscopy. Oldani, M.; Bauder, A. (Lab. Phys. Chem., Eidgen. Tech. Hochschule, Zurich, CH-8092 Zurich, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(2), 624-8 (Eng). Pure rotational transitions of ¹¹BF₃ in the ground vibrational state with $\Delta k = \pm 3$ selection rule were measured between 14 and 17 GHz. The extremely weak transitions were obsd. with a pulsed microwave Fourier transform spectrometer. The Q subbranch between $k = \pm 1$ and ∓ 2 was assigned for transitions with $J = 11$ to 50. In addn., an R and a P subbranch were identified for transitions with J between 17 and 45 and k between 10 and 32. A total of 60 measured transition frequencies was combined in a least squares fit of the mol. consts. B, C-B, D_J, D_{KK}, D_K, H_J, H_{JK}, H_{KJ}, and H_K.

C.A. 1987, 106, N10

BF_3

1988

21 Б1142. Инфракрасный спектр матрично-изолированного димера трифторида бора, неэмпирические расчеты и попытка отнесения. Matrix isolation infrared spectrum and ab initio calculations of the boron trifluoride dimer. Tentative assignments. O'Neill F. M. M., Yeo G. A., Ford T. A. «J. Mol. Struct.», 1988, 173, 337—348 (англ.)

Получены ИК-спектры BF_3 (I) в матрице N_2 при ~ 20 К. Варьирование конц-ий I, эксперименты с разогреванием и повторным охлаждением матрицы, а также учет изотопного расщепления $^{10}\text{B}/^{11}\text{B}$ позволили произвести отнесение полос, принадлежащих мостиковому димеру $(\text{BF}_3)_2$ симметрии D_{2h} (II). Неэмпирич. методом ССП МО в базисе 4-31ГФ проведен расчет гармонич. колебат. частот и интенсивностей I и II.

В. Я. Беспалов

М.А.

Х. 1988, 19, N 21

$(\text{BF}_3)_2$

BF₃

1989

№ 12 Б1193. Проявление эффектов вибронного взаимодействия в He-I фотоэлектронном спектре BF₃ с высоким разрешением. Vibronic coupling effects observed in the high-resolution He(I) photoelectron spectra of BF₃ / Hagenow G., Hottmann K., Baumgärtel H. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 164, № 4.— С. 395—399.— Англ.

С высоким разрешением ≈ 15 мэВ исследован фотоэлектронный спектр молекул BF₃ с использованием в кач-ве источника возбуждения резонансной линии He-I. В спектре обнаружены: колебат. структура (КС) полосы $^1A'_2$ (вертикальная энергия ионизации $E_b = 15,9$ эВ) и дополнит. третья серия уровней в обл. полосы $2E'$ ($E_b = 20,08$ эВ). Тонкая структура полосы $^1A'_2$ с интервалами между компонентами $\Delta E = 0,025$ эВ отнесена к неадиабатич. вибронному взаимодействию между первыми тремя состояниями BF₃⁺: 1A_2 , E'' и $3E'$. Дополнит. структура полосы $2E'$ с $\Delta E = 0,092$ эВ отнесена к ян-теллеровскому взаимодействию соседних ионных состояний $2E'$ и $2^1A'_2$. О. А. Басченко

(дл.п.)

X. 1990, N 12

BF₃

1989

112: 65920a Vibronic coupling effects observed in the high-resolution helium (He I) photoelectron spectra of trifluoroborane. Hagenow, G.; Hottmann, K.; Baumgaertel, H. (Inst. Phys. Theor. Chem., Freie Univ. Berlin, D-1000 Berlin, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 164(4), 395-9 (Eng). The He I photoelectron spectrum of BF₃ was measured with an electron energy resolu. of better than 15 meV. The 1A₂' PE band (IP_{vert} v 15.92 eV) reveals vibrational fine structure with intervals of 0.025 eV. For the 21σ' PE band (IP_{vert} = 20.08 eV), an addnl. 3rd progression with intervals of 0.092 eV was obsd. The results are discussed on the basis of vibronic interaction between electronic states using symmetry arguments.

фотометрия
спектр,

М.Н.

С.А. 1990, 112, N 8

BF₃

(Om 32621)

1989

111: 86471z High resolution Fourier transform infrared spectra of boron-10-labelled boron trifluoride. Zeisberger, Eduard; Ruoff, Andreas (Sekt. Schwingungsspektrosk., Univ. Ulm, D-7900 Ulm, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 136(2), 295-316 (Eng). The IR spectra of the ν_2 , ν_3 , ν_4 , $\nu_1 + \nu_4$ and $2\nu_2 - \nu_2$ bands of 95% ¹⁰BF₃ were measured by means of a Fourier transform spectrometer with a resolu. of ~ 0.004 cm⁻¹. A total of $\sim 12,500$ rovibrational transitions were assigned. The shifts of the $K'' = 3$ transitions due to the splitting operators h_{06} and h_{24} were obsd. for the ν_3 , ν_4 , and $\nu_1 + \nu_4$ bands. Ground state consts. and parameters for the excited states $\nu_2 = 1$, $\nu_3 = 1$, $\nu_4 = 1$, and $\nu_2 = 2$ were improved. The parameters for the excited state $\nu_1 = \nu_4 = 1$ were obtained for the 1st time. Moreover, the splitting consts. Δ_3^0 , t_3 , t_4 , t_{14} , and their signs were detd. unambiguously. Spectroscopic consts. for the $\nu_1 = 1$ state were deduced as well as the consts. x_{22} , η_{14} , B_e , and C_e .

(vi)

c.A. 1989, III, N10

BF₃

от 32621

1989

9 Б1314. Инфракрасные фурье-спектры высокого разрешения BF₃, меченого ¹⁰B. High resolution Fourier transform infrared spectra of ¹⁰B-labelled BF₃ / Zeisberger E., Ruoff A. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 136, № 2.— С. 295—316.— Англ.

На ИК-фурье-спектрометре в обл. частот 425—1420 см⁻¹ с разрешением 0,0035—0,0048 см⁻¹ с точностью 0,0002 см⁻¹ измерен колебательно-вращат. спектр ¹⁰BF₃. Идентифицировано около 12500 колебательно-вращат. переходов, принадлежащих полосам ν_3 , ν_4 , $\nu_1 + \nu_4$ и $2\nu_2 - \nu_2$. Анализ ИК-спектра выполнен с учетом кватеричного и секстичного центробежного искажения и сдвига переходов $K''=3$ для полос ν_3 , ν_4 и $\nu_1 + \nu_4$. Для состояний $\nu_1=1$ и $\nu_4=1$ молек. постоянны определены впервые, для остальных состояний существенно уточнены по сравнению с ранее выполненными измерениями. Результаты для ¹¹BF₃ будут опубликованы отдельно.

С. Н. Мурзин

М.А.

X. 1990, N 9

BF_3

1990

Reed A.E., von Rague,
Schleyer P.

(edzop) J. Amer. Chem. Soc. 1990,
112, n4, c. 1434-1445.

(cm.  F_3SiF ; III)

BF₃

1990

113: 141226s Photoabsorption and fluorescence spectroscopy of trifluoroborane in the extreme-vacuum-ultraviolet region. Suto, Masako; Ye, C.; Lee, L. C. (Dep. Electr. Comput. Eng., San Diego State Univ., San Diego, CA 92182 USA). *Phys. Rev. A* 1990, 42(1), 424-31 (Eng). Absorption and fluorescence cross sections of BF₃ were measured in the 45-113-nm region. Partial ionization cross sections are derived from the absorption cross section and the known branching ratios and then compared with theor. calcs. The absorption spectrum shows many vibrational progressions and broad bands that are attributed to the Rydberg and/or valence transitions. Fluorescence from excited BF₂^{*} is obsd. from photoexcitation of BF₃. The fluorescence quantum yield shows two repulsive excited states that give max. yields of 34% at 88 nm and 20% at 96 nm. These two states produce four BF₂^{*} emission bands that are distinguished by different fluorescence spectra and radiative lifetimes. The photoexcitation processes that lead to fluorescence and ionization are discussed.

Электрон-
ный спектр

BF₂

C.A. 1990, 113, 16

BF₃

1991

8 Б1019. Шкала льюисовской кислотности тригалогенидов бора. Неэмпирическое исследование. The Lewis acidity scale of boron trihalides. An ab initio study / Branchadell Vicenc, Oliva Antonio // J. Mol. Struct. Theochem.— 1991.— 236, № 1—2.— С. 75—84.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП с использованием базисных наборов 3—21 ГФ, MIDI-3, 6—31 ГФ*, а также базисов 3—21 ГФ и MIDI-3, дополненных поляризац. *d*-ф-циями на галогенидных атомах, проведены расчеты электронного и геометрического строения тригалогенидов бора BF₃ (I), BCl₃ (II) и BBr₃ (III). Энергии I—III уточнены расчетами с учетом эффектов электронной корреляции в рамках теории возмущений Меллера—Плессета второго порядка. Табулированы значения равновесных геометрич. параметров, энергий нижней вакантной МО, орбитальных заселенностей и энергий пирамидализации, полученные на разных уровнях расчета. Показано, что рост льюисовской к-тности при переходе от BF₃ к BBr₃ может быть понят в терминах сродства к электрону и природы связи бор-галогенидный атом.

И. Н. Сенченя

А.А.А.

☒ (+2)

X.1992, NO

BF₃

1991

115: 290061c The vibrational spectra of the boron halides and their molecular complexes. Part 1. Ab initio predictions of the vibrational spectra of boron trifluoride, chlorodifluoride, fluorodichloride and trichloride. Nxumalo, L. M.; Ford, T. A. (Cent. Mol. Des., Univ. Witwatersrand, Johannesburg, 2050 S. Afr.). *THEOCHEM* 1991, 82(1-2), 135-59 (Eng). The intramol. vibrational band wavenos. and IR and Raman intensities of boron trifluoride, chlorodifluoride, fluorodichloride and trichloride were computed using ab initio MO theory, at the self-consistent-field and second order Moeller-Plesset levels of theory, employing the 6-13G* basis set. The calcd. results were compared with exptl. ones, where available. Force consts., dipole moment derivs. and at. polar tensors were derived and trends in their values, and in those of the wavenos. and intensities, were rationalized on the basis of the varying mol. electronic properties resulting from successive fluorine-chlorine substitution.

Di pacem

(13) BClF_2 ● BFCl_2 , BCl_3
C.A. 1991, 115, N 26,

ВГ-3

1991

№ 3 Д60. Колебательные спектры галогенидов бора и их молекулярных комплексов. Часть I. Неэмпирические расчеты колебательных спектров трифторида, хлордифторида, фтордихлорида и трихлорида бора. The vibrational spectra of the boron halides and their molecular complexes. Part 1. Ab initio predictions of the vibrational spectra of boron trifluoride, chlorodifluoride, fluorodichloride and trichloride / Nxumalo L. M., Ford T. A. // J. Mol. Struct. Theochem.— 1991.— 236, № 1—2.— С. 135—159.— Англ.

С использованием метода Меллера — Плессета 2-го порядка в базисе 6-31 ГФ* рассчитаны волн. числа полос внутримолекулярных колебаний, а также ИК- и КР-интенсивности молекул BF_3 , BClF_2 , BFCl_2 и BCl_3 . Рассчитаны силовые постоянные и дипольные моменты. Тенденции в изменениях всех рассчитанных величин обсуждаются с точки зрения изменений молекулярных электронных свойств, обусловленных последовательным замещением F на Cl.

22.11.

☒ (f3)

Ор 1992, N3.

BF₃

1991

22 Б1046. Множество состояний дикатиона и анализ заселенностей двухдырочных состояний как мостик к пониманию спектров Оже: сильная локализация в BF₃. Many dicationic states and two-hole-population analysis as a bridge to Auger spectra: Strong localization phenomena in BF₃ / Tarantelli F., Sgamellotti A., Cederbaum L. S. // J. Chem. Phys.— 1991.— 94, № 1.— С. 523—532.— Англ.

Методом ф-ции Грина рассчитаны частоты и вероятности 100 переходов, отвечающих двойной ионизации молекул BF₃ из внеш. валентной оболочки. Результаты расчетов использованы для обсуждения эффекта локализации образующихся при ионизации дырочных состояний и ее проявлений в оже-спектрах. Отмечена невозможность описания этой локализации в рамках приближений, не учитывающих корреляцию электронов. Развита новая статистич. подход к расчету формы линий в оже-спектрах, основанный на анализе заселенностей двухдырочных состояний. Разработанный подход с успехом применен к неэмпирич. расчету оже-спектров фтора и бора (KLL) в молекуле BF₃, что позволило полностью интерпретировать известные эксперим. данные.

В. Б. Павлов-Веревкин

М. П.

X. 1991, № 22

ВТЗ

1991

3 Д61. Декартова динамика простых молекул. VIII. Планарные четырехатомные молекулы (симметрия D_{3h}). Cartesian dynamics of simple molecules. VIII. Planar quadratomics (D_{3h} symmetry) / Weng S. X., Binbrek O. S., Anderson A. // Spectrosc. Lett.— 1991.— 24, № 7—8.— С. 959—973.— Англ.

Анализируются колебания планарных молекул типа A_3B симметрии D_{3h} путем рассмотрения этих молекул как особого случая молекул типа A_2BC симметрии C_{2v} . В терминах 4 силовых постоянных получены аналитич. выражения для частот 4 норм. мод колебаний. Для тригалогенидов бора и трехокиси серы определены оптимизированные величины силовых постоянных. Рассчитаны частоты колебаний различных изотопич. модификаций этих молекул.

М.А.

☒ (11)

ф. 1992, №3.

SO₃

BF₃

Om · 36650

1992

★ 19 Б1169. Силовые постоянные, константы кориолисова взаимодействия и особенности строения тригалогенидов типа $XY_3(D_{3h})$ /Ежов Ю. С. //Ж. физ. химии .—1992 .—66 ,№ 5 .—С. 1405—1409 .—Рус.

На основе эксперим. данных рассчитаны полные наборы постоянных гармонич. валентного силового поля молекул типа XG_3 ($X = B, Al, Ga, In$; $G = F, Cl, Br, I$), а также $CrCl_3$ и $FeCl_3$. Обсуждены зависимости силовой постоянной T_r и средней энергии разрыва связи от межъядерного расстояния R (XG), а также зависимость постоянной кориолисова в-вия ξ_3 от масс центр. и концевых атомов. Показано, что модель эффективных ядерных зарядов лишь качественно описывает силовое поле указанных молекул.

М.П.

(17) □

X. 1993, N 19



$Bil_3, BBr_3, BI_3, AlF_3,$
 $AlCl_3, AlBr_3, AlI_3, GaF_3,$
 (см. по в.)

GaCl_3 , GaBr_3 , GaI_3 , InF_3 , InCl_3 ,
 InBr_3 , InI_3 , CrCl_3 , FeCl_3

BF₃

OM 36 650

1992

1 Д63. Силловые постоянные, константы кориолисова взаимодействия и особенности строения тригалогенидов типа XY₃ (D_{3h}) / Ежов Ю. С. // Ж. физ. химии .—

1992 .— 66 , № 5 .— С. 1405—1409 .— Рус.

На основе эксперим. данных рассчитаны полные наборы постоянных гармонич. валентного силового поля молекул типа XΓ₃ (X=B, Al, Ga, In; Γ=F, Cl, Br, I), а также CrCl₃ и FeCl₃. Обсуждены зависимости силовой постоянной f , и средней энергии разрыва связи от межъядерного расстояния R (XΓ), а также зависимости постоянной кориолисова взаимодействия ζ_3 от масс центрального и концевых атомов. Показано, что модель эффективных ядерных зарядов лишь качественно описывает силовое поле указанных молекул.

м.п.

(47)



AlBr₃, AlI₃, BCl₃, BBr₃, BI₃, AlF₃, AlCl₃, GaF₃, GaCl₃, GaBr₃, GaI₃, InF₃, InCl₃, InBr₃, InI₃, CrCl₃, FeCl₃

ср. 1993, N1

BF₃

Om 36650

1992

/ 117: 178699g Force constants and coriolis interaction constants for the structures of XY₃ (D_{3h}) trihalides. Ezhov, Yu. S. (Inst. Vys. Temp., Moscow, Russia). Zh. Fiz. Khim. 1992, 66(5), 1405-9 (Russ). The consts. were calcd. of the harmonic valence force fields of XY₃ mols. (X = B, Al, Ga, In; Y = F, Cl, Br, I), CrCl₃, and FeCl₃ by using exptl. data. The dependencies of the force consts. and the av. bond-dissocn. energy on the internuclear distance and of the interaction consts. on at. masses were considered. The positive-nuclear-charge model only qual. describes the mol. force

Val. NOCM.

(+3) XI

C. A. 1992, 117, N 18

BF₃

1993

11 Б1139. Спектроскопия возбуждения вакуумной УФ-флуоресценции BF₃ в области 45—125 нм. Наблюдение новых электронных переходов в свободном радикале BF₂. Vacuum UV fluorescence excitation spectroscopy of BF₃ in the range 45—125 nm. Observation of new electronic transitions in the BF₂ free radical /Creasey I. C., Hatherly P. A., Jones H. M., Lambert I. R., Tuckett R. P. //Mol. phys. — 1993 .— 78 , № 4 .— С. 837—854 .— Англ.

Измерены спектры ФЛ, возникающие при возбуждении молекул BF₃ в результате столкновений с метастабильными атомами He*(2³S) (детектирование диспергированной ФЛ) либо перестраиваемым вакуумным УФ-излучением синхротронного источника (детектирование недиспергированной ФЛ). В первом случае наблюдались две развитые прогрессии полос в области 200—300 нм, разде-

М.П.



(4)



Х. 1994, N11

ленных интервалом $525 \pm 30 \text{ см}^{-1}$ и отнесенных к деф. кол. $v_2\text{BF}_2$ в состоянии x^2A_1 (вероятное отнесение перехода — $A^2B_1 \rightarrow X^2A_1$). Во втором случае при возбуждении в области 10—28 эВ наблюдалось два различных канала флуоресцентного распада: ФЛ BF_2 при энергиях возбуждающих фотонов ниже 17 эВ и ФЛ BF_2^+ при энергиях больше 21,5 эВ. Первый процесс идет через ридберговы состояния BF_2 ; второй — нерезонансный процесс ионизации с образованием иона в состоянии E^2A_1 . Библ. 33. В. М. Ковба

BF₃

1993

120: 147445d The vibrational spectra of the boron halides and their molecular complexes Part 2. Ab initio predictions of the structure and vibrational spectra of the boron trifluoride dimer. Nxumalo, L. M.; Ford, T. A. (Centre for Molecular Design, Department of Chemistry, University of the Witwatersrand, Johannesburg, Wits, 2050 S. Afr.). *J. Mol. Struct.* 1993, 300(1-3), 325-38 (Eng). Ab initio MO calcns. were performed on a no. of isomers of the dimer of B trifluoride, at the Hartree-Fock level of theory and using the 6-31G* split-valence polarized basis set, to identify the most probable structure of this dimer and to predict the wavenumbers and band intensities of its IR and Raman spectra. The min. energy structure consists of 2 B trifluoride monomer units which retain the planarity of the monomer species, the 2 planes lying parallel to 1 another in a centrosym. arrangement of C_{2h} symmetry. The results will be used in an anal. of some new IR data obtained for samples of this species isolated in Ar and N matrixes.

Ві, клас. рочк.
спроекція,
неоп. рачунок

с.А. 1994, 120, N12

BF₃

1993

22 Б1145. Силловые постоянные и средние амплитуды колебаний некоторых плоских и пирамидальных молекул типа XY_3 . Force constants and mean amplitudes of vibration for some planar and pyramidal molecules of type XY_3 /Singh Prem, Dublsh A. K. //Indian J. Pure and Appl. Phys. .—1993 .—31 ,№ 3 .—С. 193—194 .—Англ.

В приближении расширенной L-матрицы, предложенной в работе //Z. Naturforsch .—1972 .—27 .—С. 129, рассчитаны силловые постоянные молекул XY_3 симметрии D_{3h} ($X=B, Ga, Al; Y=F, Cl, Br, I$) и C_{3v} ($X=N, P, As, Sb; Y=F, Cl, Br, I$). Средние амплитуды колебаний молек. конформаций C_{3v} сопоставлены с соотв-щими величинами для димеров. Получена линейная зависимость между силловыми постоянными для валентных колебаний в мономерах с $X=As$ и Sb и аналогичными постоянными в молекулах с $X=P$.

Н. С.

М.П.

+27

X



X. 1994, N 22

BF₃

1994

121: 21114x Harmonic force constants of boron trihalides and some mixed halides of boron. Anaconda, Juan Roberto; Lorono, Marcos (Dep. Quim., Univ. Oriente, Cumana, Venez.). *THEOCHEM* 1994, 110(3), 279-84 (Eng). A reliable set of harmonic force consts. was calcd. for BF₃, BCl₃, BBr₃, BI₃, BF₂Cl, BF₂Br, BCl₂F, BCl₂Br, BBr₂F, and BBr₂Cl using the obsd. vibrational frequencies of these compds. (contg. ¹⁰B or ¹¹B isotopes) and the iterative consistency method. The final force field reproduces quite satisfactorily the exptl. frequencies. Some of the principal stretching force consts. were found to vary systematically with the electronegativity of the halogen.

(Vi, cum. no)

(49) A

C.A. 1994, 121, N 2

BF₃

1994.

19 Б1036. Гармонические силовые постоянные тригалогенидов бора и некоторых смешанных галогенидов бора.

Harmonic force constants of boron trihalides and some mixed halides of boron / Anaconda Juan Roberto, Loroño Marcos // J. Mol. Struct. Theochem. — 1994. — 304, № 3. — С. 279—284. — Англ.

Рассчитаны силовые постоянные BF_3 , BCl_3 , BBr_3 , BI_3 , BF_2Cl , BF_2Br , BCl_2F , BCl_2Br , BBr_2F и BBr_2Cl с использованием итерационного метода, полученного Панченко и др., и наблюдаемых колебательных частот этих соединений и их ^{10}B - и ^{11}B -изотопозамещенных. Конечное силовое поле хорошо воспроизводит экспериментальные частоты. Найдена корреляция между некоторыми валентными силовыми постоянными и электроотрицательностью атома галогена. Расчет подтвердил надежность итерационного метода для расчета силовых постоянных ряда молекул без использования произвольных предположений, связанных с недиагональными элементами матрицы F_0 .

Н. С.

М.П.

☆

(+9)

Х. 1994, № 19.

BF₃

1994

Liu Yi, Li Lemin.

ссыл. посей.,
ссыл.рукт.,
теор.
расчет

Beijing Daxue Xue.
bao, Lixian Xue-
ban 1994, 30(6),
665-70.

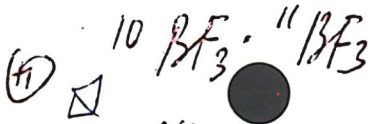
(ссыл. CO₂ ; III)

BF₃

1994

120: 310080s Infrared spectrum of the boron trifluoride dimer. Nxumalo, L. M.; Ford, T. A. (Cent. Mol. Des., Univ. Witwatersrand, Wits, 2050 S. Afr.). *Vib. Spectrosc.* 1994, 6(3), 333-43 (Eng). The IR spectra of BF₃ isolated in N and Ar matrixes were recorded. The spectra were interpreted from the formation of a bridged dimer of C_{2h} symmetry, as predicted by a recent ab initio MO study. Reasonable assignments were made for all 6 IR active modes of the most abundant isotopomer, (¹¹BF₃)₂, expected to appear ≥400 cm⁻¹, 8 bands of the mixed isotopic species, ¹⁰BF₃.¹¹BF₃, and 5 of the least abundant dimer, (¹⁰BF₃)₂. The monomer-dimer waveno. shifts are consistent with the occurrence of a weak electron donor-acceptor interaction, which was predicted by the theor. calcs.

(UK &
manuscript)



C.A. 1994, 120, N 24

BF₃.

1995

124: 156373p Preliminary calculations on the potential stability of BF₃⁻ and BF₃²⁻. Ball, David W. (Department of Chemistry, Cleveland State University, Cleveland, OH 44115 USA). *THEOCHEM* 1995, 358, 95-8 (Eng). Ab initio MP2/6-311+G* energies and structures of BF₃, BF₃⁻, and BF₃²⁻ were calcd. to det. the potential stability of boron fluoride ions. Ion pairs with alkali atoms suggest that such salts may be stable.

Структура

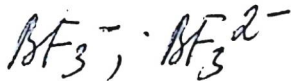
и

энергии

связи,

теоретическим

расчет

(4) C. A. 1996, 124, n12.

BF₃

1995

F: BF₃

P: 3

2B155. Теоретическое исследование и анализ взаимодействий в BF[3], BCl[3], AlF[3] и AlCl[3] с помощью многоцентрового разложения. Theoretical characterization and many-body expansion analysis of BF[3], BCl[3], AlF[3] and AlCl[3] interactions / Shalabi A. S., Kamel K. A., Assem M. M. // Theor. chim. acta. - 1995. - 91, N 1 - 2. - С. 73-81. Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 6-311+ГФ(d) рассчитана равновесная геометрия AX[3]; A=B, Al; X=F, Cl. Проведен анализ полной энергии вз-вия с помощью многоцентрового разложения. Обсуждена сходимость разложения, величины коротко- и дальнедействующих вкладов, проведен теоретико-групповой анализ.

Р.Ж.Х. №2, 1996.

BF₃

1995

F: BF₃

P: 3

06.Д.0196. Теоретическое исследование и анализ взаимодействий в BF₃, BCl₃, AlF₃ и AlCl₃ с помощью многоцентрового разложения. Theoretical characterization and many-body expansion analysis of BF₃, BCl₃, AlF₃ and AlCl₃ interactions / Shalabi A. S., Kamel K. A., Assem M. M. // Theor. chim. acta. - 1995. - 91, N 1-2. - С. 73-81. Англ.

С помощью матричного метода Хартри - Фока изучены взаимодействия металлоид - неметалл и металл - неметалл в BF₃, BCl₃, AlF₃ и AlCl₃. Проанализированы структурные и энергич. параметры, сходимость многоцентрового разложения, коротко- и дальнедействующие компоненты энергий взаимодействия и теоретико-групповые параметры.

Х. 1996, №6

BF₃

1997

127: 25136c Anharmonic force fields and spectroscopic properties of BF₃ and CF₃⁺ using the coupled cluster method. Pak, Youngshang; Woods, R. Claude (Department of Chemistry, University of Wisconsin-Madison, Madison, WI 53717 USA). *J. Chem. Phys.* 1997, 106(15), 6424-6429 (Eng). American Institute of Physics. Anharmonic force fields and rovibrational spectroscopic properties of BF₃ and CF₃⁺ were studied, using the coupled cluster method with single and double substitutions augmented by a perturbative est. of triple excitations [CCSD(T)] with a basis set of 120 contracted Gaussian-type orbitals (cGTOs). A complete set of rovibrational spectroscopic consts. for each species was calcd. using second-order perturbation theory. For BF₃ the CCSD(T) equil. bond distance is larger than the exptl. value by 0.0058 Å, and the fundamental frequencies are within 5 cm⁻¹ of expt., except for ν₁, which shows a deviation of 16 cm⁻¹. The CCSD(T) method yields vibration-rotation interaction consts. α_v in excellent agreement with available exptl. values (within 3 MHz). The CCSD(T) bond distance of CF₃⁺ is 1.2305 Å with a basis set of 220 cGTOs, which is cor. to 1.2272 Å by applying a correction derived from the identical level of calcn. on BF₃. The fundamental frequencies ν₁, ν₂, ν₃, and ν₄ for CF₃⁺ are predicted to be 1044 cm⁻¹, 813 cm⁻¹, 1683 cm⁻¹, and 593 cm⁻¹, resp.

chem. NOCM,

Di



(+) CF₃⁺

C.A. 1997, 127, N2

BF₃

Um 38726

1997

Youngshang Pax and R. Claude
Woods,

U.N.

J. Chem. Phys., 1997, 106(15),
6424 - 6427...

F: BF₃

P: 3

132:70733 The vibrational spectra of the boron halides and their molecular complexes: Part 7. Ab initio predictions of the infrared spectra of the complexes of boron trifluoride with some linear nitrogen donors.

Nxumalo, M.; Andrzejak, M.; Ford, T. A.

Soweto Campus, Department of Chemistry, Vista University Bertsham, S. Afr. J. Mol. Struct., 509(1-3), 287-295 (English) 1999 The IR spectra of the 1:1 mol. complexes of BF₃ with 5 linear N-contg. electron donors (N₂, HCN, CNF, C₂N₂, and HC₃N) were

computed by a series initio MO calcns., at the 2nd order level of Moller-Plesset perturbation using the 6-31G** basis set. This work extends the calcns. of the struct energetics, and Mulliken at. charges of the same series of complexes, rep earlier. The vibrational properties, specifically the complex-monomer wavenumber shifts and the B.cntdot..cntdot..cntdot.N stretching and BF3 librational wavenumbers and their assocd. force consts., were correlated the computed interaction energies, cor. for basis set superposition error for zero-point energy difference.

F: BF3

P: 3

1999

132:70733 The vibrational spectra of the boron halides and their molecular complexes: Part 7. Ab initio predictions of the infrared spectra of the complexes of boron trifluoride with some linear nitrogen donors. Nxumalo, L. M.; Andrzejak, M.; Ford, T. A. Soweto Campus, Department of Chemistry, Vista University Bertsham, S. Afr.

J. Mol. Struct., 509(1-3), 287-295 (English)
1999 The IR spectra of the 1:1 mol. complexes of BF3 with 5 linear N-contg. electron donors (N2, HCN, CNF, C2N2, and HC3N) were computed by a series of ab initio MO calcns., at the 2nd order level of Moller-

C. L. 2000, 132

Plesset perturbation theory, using the 6-31G** basis set. This work extends the calcns. of the structures, energetics, and Mulliken at. charges of the same series of complexes, reported earlier. The vibrational properties, specifically the complex-monomer wavenumber shifts and the B.cntdot..cntdot..cntdot.N stretching and BF3 librational wavenumbers and their assocd. force consts., were correlated with the computed interaction energies, cor. for basis set superposition error and for zero-point energy difference.

F: BF3

1999

P: 3

132:173251 Photoionization studies of BF3 using
synchrotron radiation. Ch Yang; Li, Quanxin; Pei,
Linsen; Chen, Congxiang; Yu, Shuqin; Ma, Xingxiao
Gao, Hui; Qi, Fei; Sheng, Liusi; Zhang, Yunwu

Department of Chemical Physics, University
of Science and Technology of China, Open Laboratory
o Band-Selective Chemistry, Chinese Academy of
Sciences Hefei 230026, Peop. Rep. China

Huaxue Wuli Xuebao, 12(6), 641-645
(Chinese) 1999 Photoionization and
photodissocn. of BF3 were investigated under the
supersonic beam conditions using synchrotron

C-A. 2000, 132

radiation light source at 50 nm. The PIE curves of BF_3^+ and BF_2^+ were obtained, in which some series autoionization structures were obsd. in the range of 50-80 nm. It is suggested that these structures are due to the transition from BF_3 ground state to ns, np and nd Rydberg states. The spectral parameters of these Rydberg states were obtained from spectral anal. Dissocn. dynamics of BF was discussed by comparing the difference of BF_3^+ and BF_2^+ PIE curves. Photoionization is the main process for ns Rydberg series of BF_3 mol. Photodissocn. is the main process for np, nd Rydberg series of BF_3 mol.

BF₃

(Om 41836)

2003

McLain S.E.,
comp-pa J.E. Lienewalt et al.,

J. Chem. Phys., 2003,
119, N13, 6671-6679.

On the st ● ucture of po-

iron trifluoride in liquid
and supercritical phase.
investigated with neutron
diffraction.