

HBO₂

V4432

1960

HBO_2 (элементарный O-H)

Kadken W.E., Millikan R.C.

J.Chem. Phys., 1960, 32, N 4, 1273-1274

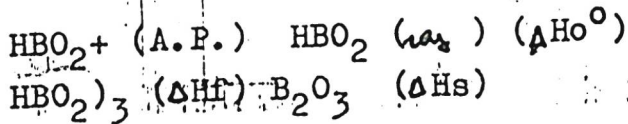
Source of green bands from boron-containing flames.

PJX., 1962, 2547

J

V4234

1960



Messhi D.J., Chupka W.A., Berkowitz J.

J.Chem. Phys., 1960, 33, N 2, 530-533 (англ)

Масс-спектрометрическое исследование гетерогенных реакций. I Реакция B_2O_3 (тв) с H_2O (англ)

PJX., 1961, 24B77

F

J

HBO_2

спектр,
структура,

ΔH_f ,

св. пост.

Р.Н. Химия

1961. 16588

Оттиск 499 1/1960

16588. Инфракрасный спектр испускания газообразного HBO_2 . White David, Mann David E. Walsh Patrick N., Sommer Armin. Infrared emission spectrum of gaseous HBO_2 . «J. Chem. Phys.», 1960, 32, № 2, 488—492 (англ.).—Исследован в области 700—4000 см^{-1} ИК-спектр испускания паров системы B_2O_3 (жидк.) — H_2O (газ) при т-рах 1250—1400° К и давлении паров H_2O 1—15 мм рт. ст. Показано, что все полосы испускания принадлежат молекуле HBO_2 . При использовании изотопов B^{10} и D определены спектры молекул $\text{HB}''\text{O}_2$ (I), HB^{10}O_2 (II) и $\text{DB}''\text{O}_2$ (III) и проведено следующее отнесение частот (в см^{-1}): вал. кол. OH I 3680, вал. кол. OD III 2750, вал. кол. $\text{B}=\text{O}$ I и II 2030, вал. кол. $\text{B}=\text{O}$ I 2083, вал. кол. $\text{B}-\text{O}$ и деф. кол. $\text{O}-\text{H}$ I—III ~ 1420 . Интерпретация полученных спектров сильно затрудняется наложением спектра испускания паров H_2O . Молекула HBO_2 отнесена к симметрии C_s с $\angle \text{HOB}$ 120°. По зависимости интенсивности полосы 2030 см^{-1} от т-ры определена теплота р-ции $\frac{1}{2}\text{B}_2\text{O}_3$ (жидк.) + $\frac{1}{2}\text{H}_2\text{O}$ (газ) = HBO_2 (газ)

+3



с.н.н./об.

69-4439-1

$\Delta H_{1250}^\circ = 39,0 \pm 2,5$ ккал/моль. Теплота образования 4VO_2 равна $-135,0 \pm 3$ ккал/моль. Для молекулы HVO_2 и ее тримера $(\text{HVO}_2)_3$ (предполагается, что такая молекула существует в газовой фазе и имеет симметрию C_{3h}) проведен расчет колебательного спектра и термодинамич. функций до т-ры 6000°K . А. Мальцев

ИВО.ВО₂ (V) ВД-У5187 1961

Русин А. Татевский В.М.

Природа зеленого свечения и состав
продуктов сгорания бора при температуре
3100°K

Докл. АН СССР 1961 139 № 3 630- 633

РЖ.Хим. 1963 2 Б 53

Есть оригинал.

Ю

HBO_2

Sommer I.,

1963

4-4195?

Dissertation Abstr.,

1963, 24, ~ 1, 98.

ИК-спектр

Термодинамическое и
спектрально-кинетическое изуче-
ние систем В-О и В-S
в карбообразном состоянии.

(См. B_2O_3) I

HBO₂

сирпкнупа

Refined structure of orthorhombic metaboric acid. Charles R. Peters and M. E. Milberg (Ford Motor Co., Dearborn, Mich.). *Acta Cryst.* 17(3), 229-34(1964)(in English). A 3-dimensional x-ray diffraction study of the orthorhombic modification of metaboric acid, HBO₂, at -130° has characterized the geometry of the B₃O₃(OH)₃ structural unit. Least-sqs. refinement of the structural parameters resulted in an agreement factor $R = \sum ||kF_o| - |F_c|| / \sum |kF_o|$ of 0.064. The structure may be described as H-bonded sheets of trimeric HBO₂ mols. loosely stacked to form a micallike, platy crystal in the orthorhombic system, space group *Pbnm*, *a* 8.019, *b* 9.703, *c* 6.13 Å., with *Z* = 12. The av. B-O bond distance in the 6-membered, B-O ring is 1.373, while the av. out-of-ring distance is 1.349 Å. The av. O-H bond is 0.87 Å. Three distinct H bonds have O...O distances of 2.827, 2.748 and 2.680 Å. The anisotropic thermal behavior is such that the trimeric structural unit (considered as a rigid body) described primarily a translational motion along 3 orthogonal axes with little angular contribution to this motion.

RCCV

C.A. 1964.60.8

2727k-2723a

V4435

1964

HBO_2 (XYZ, re)

Peters Ch. R., Milberg M.E.,

Acta crystallogr., 1964, 17, N 3, 229-234

The refined structure of orthorhombic metaboric acid.

PJX., 1964, 225223

F

J., Ml.

V4225

1965

B_2O_3 (смесь кристал., γ и)

HBO_2 (кристал.)

Hanst P.L., Early V.H., Klemperer W.

J. Chem. Phys., 1965, 42, N 3, 1097-1104 (англ.)

Infrared spectrum and molecular structure B_2O_3

PJF., 1966, 3D257

F

J

Е. О. Т. б. Ф. Н.

HBO_2

Bertoluzzi A. и др. 1968
Atti Acad. Naz. Lincei,
Rend. Cl. Sci. Fiz. Mat. Natur.,
44, N 4, 554

ИК-спектры поликристал-
лической пленки ортобор-
ной кислоты, H_3BO_3 , при
30-230°. II.

(см. H_3BO_3) III

1968

HBO₂

Vi

 ΔH_f

+

(32925) Spectroscopic studies of the vaporization of high temperature materials. Linevsky, Milton J. (Missile and Space Div., Gen. Elec. Co., Philadelphia, Pa.). U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Tech. Inform., AD 1968, AD-670626, 45 pp. (Eng). Avail. CFSTI. From U. S. Govt. Res. Develop. Rep. 1968, 68(16), 63. The techniques of matrix isolation were used to obtain the ir spectra of several high temp. mols. An injector Knudsen cell was added to the general methods of matrix isolation resulting in further versatility of the method. Spectra of species produced by the reaction of a condensed phase and gas phase can now be studied. The following mols. were studied: HBO₂, BOCl, BOF, FeF₂, CrF₂, CrF₃, CrCl₂, and LiOH. In most cases tentative frequency assignments were made and structural properties inferred. At. resonance line absorption studies were carried out on AlN. The heat of formation at 298°K. was -71.8 ± 2 kcal./mole. based on the observed vapor pressures. TCVL

+4 (III)

+1 (I)

X

C.A. 1969. 70. 8

HBO₂(v) Om. 22605 1971

Ngai L.H., Stafford F.E.,
u.n., Adv. High Temp. Chem.,
kp.; 1971, 3, 213-270

1972

HBO₂

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

Определение мол. пост. и термодинамических свойств веществ.

HBO₂

B9p-978-XV

1972

Broadhead, P.;

Newman G. A.

(Vi) "Spectrochim Acta" Part A,
1972, 28 N10, 1915-23.

(see B₂O₃, III)

1975

HBO_2

Годовой отчет за 1975
по дог. 17-41

(21)

Хим. ф-т МГУ
руковод. Ткачевский В.М.

Комплексное исследова-
ние т.д. св.в и
малек. наст.

1977

 HBO_2

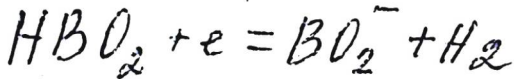
взаимог.
с электронами.

24 Б1049. О взаимодействии электрона с HBO_2 .
Miller William J., Gould Robert K. On electron attachment to HBO_2 : a comment. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 49, № 2, 237 (англ.)

Обсуждаются возможные ошибки в определении константы скорости взаимодействия $e + \text{HBO}_2 \rightarrow \text{BO}_2^- + \text{H}$, связанные с влиянием неравновесности и побочных реакций HBO_2 в высокот-рных пламенах. В. М. Заманский

Губович!

ж. 1977. № 24



1977

12 Г5. О прилипании электрона к HBO_2 : комментарий. Miller William J., Gould Robert K. On electron attachment to HBO_2 : a comment. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 49, № 2, 237 (англ.)
 Показано, что реакция $e + \text{HBO}_2 \rightarrow \text{BO}_2^- + \text{H}$ близка к равновесной только в завершающей (последней) стадии пламени.
 Ю. С. Протасов



Р. В. Р., 1977

HBO_2

оттиск 5473
XV-3612

1977

(Ae^-)

23 Б1051. Электронное сродство к HBO_2 . West-
berg Karl. On electron attachment to HBO_2 . «Chem.
Phys. Lett.», 1977, 49, № 2, 233—236 (англ.)

В статье анализируются данные, полученные ранее
Миллером и Гудом (Chem. Phys. Lett., 1976, 38, 237)
для р-ции $\text{HBO}_2 + e \rightarrow \text{H} + \text{BO}_2^-$. Показано, что эти данные
хорошо согласуются с предпосылкой, что р-ция являет-
ся равновесной. Отмечается, что константа скорости
р-ции k_1 должна быть больше $2 \cdot 10^{-12}$ и $5 \cdot 10^{-11}$ см³/сек
при 1980 и 2250° К, соотв., тогда как авторы цитируе-
мой работы дают величины $k_2 = 1,1 \cdot 10^{-12}$ и $2 \cdot 10^{-12}$ при
этих же температурах.

К. Фролов

Х. 1977 №23

1980

HBO₂

OBF

спектры
испускания

(+1) □

ф. 1981/13

3 Д581. Измерения интенсивностей полос молекул HBO₂ и OBF в близкой ИК-области с применением ударной трубы. Shock-tube measurements of the band strengths of HBO₂ and OBF in the short wavelength infrared. Boyer Donald W. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1980, 24, № 4, 269—282 (англ.)

В области 2—5 мк получены спектры испускания молекул HBO₂ и OBF, образующихся при нагревании в ударной трубе до т-ры ~10 000° К газовой смеси B₂H₆+O₂+Ar. Измерения выполнены на сканирующем ИК-спектрометре оригинальной конструкции, технич. особенности и параметры которого подробно обсуждены. Отмечено, что применение в эксперименте ударной трубы позволяет достигнуть оптимальной концентрации исследуемых молекул при специфич. термодинамич. условиях. Результаты работы представляют интерес с точки зрения изучения процессов горения с участием бор-содержащих видов топлива, т. к. молекулы HBO₂ и OBF являются важнейшими источниками излучения таких пламен в близкой ИК-области спектра.

1980

HBO_2

Boyer D.W.
J. Quant Spect. Rad.
Trans. 1980, 24 269.

Shock-tube measurements of
the band strengths of HBO_2
and OBF in...

HBO_2

Секаев Ю. М.

1980

Li

Авторефер. диссертации.
на соискание ученой
степени КХН.

Спектр и.к.
в матрице

М., ЛГУ, 1980.

Калейдоскоп спектров
и структурных исследований
 B_2O_2 и B_2O_3 и их соединений.

Взаимог.  B_2O_3 с борной кислотой.

Summary 9713

1980

HBO₂(K)

U.K.; C.K.P.

93: 34396u Infrared and Raman spectra of orthorhombic, monoclinic, and cubic metaboric acid and their relation to the "strength" of the hydrogen bond present. Bertoluzza, Alessandro; Monti, Patrizia; Battaglia, Maria Angela; Bonora, Sergio (Cent. Studio Spettrosc. Raman, Ist. Chim. "G. Ciamician", Bologna, Italy). *J. Mol. Struct.* 1980, 64, 123-36 (Eng). IR and Raman spectra of the three forms of metaboric acid (orthorhombic, monoclinic and cubic) are presented and discussed. The behavior of the asym. stretching vibration ν_{OH} and of the in-plane and out-of-plane deformations δ_{OH} and γ_{OH} shows that hydrogen bonds of different "strengths" are present in the 3 forms of metaboric acid, in accordance with x-ray diffraction measurements. This phenomenon is explained in a qual. way by a valence bond treatment of the structural centers present in the 3 forms of metaboric acid. The remaining vibrational modes are related to the analogous modes present in borates and polyborates of known structure.

C A 1980 93 N4

Ударные волны

1980

HBO_2

номер 10480

OBF_2

93: 176523g Shock-tube measurements of the band strengths of hydrogen borate (HBO_2) and boron oxide fluoride (OBF) in the short wavelength infrared. Boyer, Donald W. (Adv. Technol. Cent., Calspan Corp., Buffalo, NY 14225 USA). J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 1980, 24(4), 269-82 (Eng). Shock-tube measurements are described for the quant. spectral measurement of the IR signatures and band strengths of mol. B species. The B species were effectively isolated under conditions of optimum concn. and calcd. thermodyn. conditions using the shock tube technique. Spectral measurements were performed using a scanning IR spectrometer which was specially designed for these expts. System calibration expts. were performed using shock heated CO and CO_2 mixts. in dil. Ar, and the measured band strengths were in excellent agreement with the accepted values for these mols. Quant. spectral measurements were performed on the HBO_2 fundamentals at 2.7 and 5.0 μm and OBF at 5.0 μm . The corresponding band strength values measured for these band systems were 650, 1375, and 1760 cm^{-2} amount-1. rang.

C. A. 1980
93 N18

BO_2H

[common 10625] 1980.

Levy K., et al.

(2)

Rev. secx.
Fischer

Theor. chim. Acta,
1980, 54, 131-144.

HfBO_2^{2+}

Chemical 15870

1982

суперкритическая,
теоретическая,
практическая.

Mahajan G.D., Deb B.M.,
Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20,
N 7, 527-537.



HBO_2^{2+}

номер 16010

1982

молекула.
геометрия,
электрон.
структура

Makajan G.D., Deb B. et al.,
Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20,
N 6, 453-462.



1983

Mahajan Geeta D.,
Deb B. M.

рацем
геометр.,
структ.

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20, N6,
453-462.

●
(C.M. LiB_2^+ ; III)

MBOM

[Om. 17904]

1983

Saxel S., Jordan K.D.,

et al.

J. Phys. Chem., 1983,
87, N. 13, 2293-95.

HBOH

1986

Sakai Shogo,
Jordan Kenneth A.

et. al. Chem. Phys. Lett., 1986,
130, N1-2, 103-110.

(cor. HBOH; III)

НВОН
Н₂ВО

И. П.

Х. 1988, 19, № 21

1988

1) 21 Б1167. Теоретическое изучение присоединения атомарного бора к воде. A theoretical study of the addition of atomic boron to water. Albertí M., Sayós R., González M., Bofill J., Aguilar A. «J. Mol. Struct. Theochem», 1988, 166, 301—306 (англ.)

Неограниченным методом Хартри—Фока в рамках полуэмпирич. приближения МПДП изучена потенц. Пв р-ции атома бора В (²P) с молекулой Н₂O (X¹A₁). Обнаружено 3 интермедиа — цис- и транс-НВОН (соотв., I и II) и Н₂ВО (III) и 6 переходных состояний. Р-ция $B + H_2O \rightarrow I$ сильно экзотермична (106,4 ккал/моль) и имеет барьер 17,7 ккал/моль. Барьер изомеризации I → II мал (5,4 ккал/моль), а II → III — велик (58,2 ккал/моль). I и III могут распадаться, давая НВО + Н с барьерами, соотв., 32,5 и 19,4 ккал/моль, тогда как барьер распада I → ВО + Н₂ очень высок (87,2 ккал/моль). I и II могут давать НОВ + Н, при этом барьеры равны эндотермичности (обр. процессы безбарьерны). Результаты согласуются с имеющимися данными неэмпирич. расчетов и эксперимента. В. Я. Беспалов

HBO_2

[DM 35075] 1990

ab initio Ramondo F. Berciver -
pacrem. ni L., et al.,
J. Mol. Struct. Theochem.
1990, 209, N1-2, 101-109.

HBO_2

1991

структура, до,
рацем

115: 120477a Theoretical study of the structure and stability of molecules and ions of HAO_2 , HAS_2 , HSAO , and HOAS with 16 valence electrons ($A = B, \text{Al}, \text{C}^+, \text{Si}^+$). Zyubina, T. S.; Charkin, O. P. (Inst. Nov. Khim. Probl., USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1991, 36(3), 752-9 (Russ). Nonempirical calcn. are presented of the structure, and stability of the title compds. using several basis sets (including diffusion functions) and taking into account the electron correlation by MP3 method. The proton affinity of OAS , AO_2 , AS_2 ($A = B^-, \text{Al}^-, \text{C}, \text{Si}$) is also studied.

⊕ (+7)

1) HBS_2 , H3BO , HOBS
2) MAO_2 3) HAlS_2 , H3ALO , HOALS
4) HCO_2^+ 5) HCS_2^+ , H3CD , HOCBS^+
6) H3SiO_2^+ H2O5.

C.A. 1991, 115, N12

7) HSiS_2^+ , HSiO^+ , HOSiS^+

HBO_2

1991

7 8 Д158. Теоретическое исследование структуры и стабильности молекул и ионов HBO_2 , HAS_2 , HSAO и HOAS с 16 валентными электронами ($A=B, \text{Al}, \text{C}^+, \text{Si}^+$) / Зюбина Т. С., Чаркин О. П. // Ж. неорганич. химии.— 1991.— 36, № 3.— С. 752—759

С использованием нескольких базисных наборов (3-21Г*, ДЭХД+П и ДЭХД+П+Д (где учтены диффузные ф-ции) и учетом электронной корреляции в рамках приближения Меллера—Плессета третьего порядка (МП3) проведены неэмпирич. расчеты структуры и стабильности молекул и ионов HBO_2 , HAS_2 , HOAS , HSAO с 16 валентными электронами ($A=B, \text{Al}, \text{C}^+, \text{Si}^+$). Определено сродство молекул и ионов OAS , AO_2 , AS_2 ($A=B^-, \text{Al}^-, \text{C}, \text{Si}$) к протону. Резюме

М.П.

11
A7

сб. 1991, № 8

HBO_2

1991

14 Б1063. Теоретическое исследование структуры и стабильности молекул и ионов HAO_2 , HAS_2 , HSAO и HOAS с 16 валентными электронами ($A=\text{B}, \text{Al}, \text{C}^+, \text{Si}^+$) / Зюбина Т. С., Чаркин О. П. // Ж. неорганич. химии.— 1991.— 36, № 3.— С. 752—759.— Рус.

С использованием нескольких базисных наборов ($3-11\text{Г}^*$, $\text{ДЭХД}+\text{П}$ и $\text{ДЭХД}+\text{П}+\text{Д}$ (где учтены диффузные ф-ции) и учетом электронной корреляции в рамках приближения Меллера—Плессета 3-го порядка (МПЗ) проведены неэмпирич. расчеты структуры и стабильности молекул и ионов HAO_2 , HAS_2 , HSAO , HOAS с 16 валентными электронами ($A=\text{B}, \text{Al}, \text{C}^+, \text{Si}^+$). Определено сродство молекул и ионов OAS , AO_2 , AS_2 ($A=\text{B}^-, \text{Al}^-, \text{C}, \text{Si}$) к протону.

М.П.

411

х. 1991, N 14

HOB0

1992

Andrews Lester,
Burkholder T. R.

ИК спектр
в газовой
фазе

J. Chem. Phys.
1992, 97(10), 7203-

-10.

(ссылка на $B(OH)_3$; III)

OBOM

1992

комп. параметр.
параметр.
мод. параметр.

118: 198630b The trans effect: methodological musings. Knop, Osvald; Choi, S. C.; Hamilton, David C. (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, NS Can. B3H 4J3). *Can. J. Chem.* 1992, 70(10), 2574-601 (Eng). The *trans* effect (TE) in the present context refers to the electronic compensation which in collinear homoligand L-Z-L' *trans* bond pairs lengthens the Z-L' bond when the Z-L bond is shortened. The existence of a functional relation $d^* = f(d)$ between the conjugated bond lengths $d(Z-L)$ and $d^*(Z-L')$ (d AND d^* not equiv. by symmetry; population A) was demonstrated for a variety of Z-L combinations, with Z mostly from Groups VI and V and L mostly a halogen. The two model functions investigated in detail are the empirical DPF (difference power fit), $d^* - d_0 = K(d - d_0)^{-\epsilon}$, and the semiempirical CSBO (const. sum of bond order), based on a modified 3-center-4-electron bond concept, $d^* - d_0 = B \ln |1 - \exp[-(d - d_0)/B]|$, where $B \approx b_0 + b_1(d - d_0)$. Fitting DPF and CSBO to exptl. d, d^* data sets involves 3-parameter nonlinear optimization; in this CSBO differs from the 2-parameter treatment of Sheldrick et al., in which the limiting bond length d_0 was supplied externally. Modified versions of DPF and CSBO were devised to accommodate.

(+9)

IX

C.A. 1993, 118, N 20

along with A, d, d^* pairs in which $d = d^*$ by symmetry (population S). The relative merits of DPF and CSBO and the various aspects of TGE quantification are discussed at length, among these the effect of the oxidn. state of Z and of the presence of heteroligands on Z. The meaning of the parameters of optimization and the existence of "chem." trends between them are examd. as well as the importance of the sym. balanced bond length $d_0 = d = d^*$ and of the total d range $\Delta = d_0 = d_0$ resulting from the d, d^* regressions. Attempts to extend TE quantification to collinear heteroligand L_1-Z-L_2 *trans* bond pairs provided insight into the nature of the bond-length variation in such systems. The very good DPF and CSBO fits to d, d^* sets obtained from 6-31G* optimizations of the equil. geometries of the OBOX, XOCN, and OCN_Y (X, Y = H, F, Cl, Li, Na, or no ligand) mols. and ions support the validity of the modified 3c4e model in accounting for the TE bond-length relationships.

HOBO

1996

124: 299405m Ab initio calculation of anharmonic vibrational frequencies of HOBO. Zaki, K.; Pouchan, C. (Lab. Chimie Structurale, Univ. de Pau et des Pays de l'Adour, 64000 Pau, Fr.). *J. Chim. Phys. Phys.-Chim. Biol.* 1996, 93(3), 563-74 (Fr). The ab-initio MP2 and MP4-SDQT mol. energies, gradients and Hessians were evaluated at 89 points for the ground electronic state of HOBO mol. The corresponding potential energy surfaces were fitted to obtain a cubic and quartic force field from which the fundamental anharmonic frequencies were detd. using a variation perturbation theory. Theor. predictions reproduce the exptl. to a degree of agreement which allows a complete assignment of all the fundamental bands of HOBO and DOBO.

ab initio
param,
Di

C. A. 1996, 124, N 22