

HB.S +

NBS⁺

Om. 17672 !

1983

* King M.A., Klapstein D.,
et al.,

м. спектр
испускания

Bull. Soc. chim. Belg.,
1983, 92, N6-7, 607.

HBS⁺
DBS⁺

1985

→ 8 Л203. Спектр излучения $\tilde{A}^2\Sigma^+ - X^2\Pi_i$ катионов тиоборина, HBS⁺ и DBS⁺. $\tilde{A}^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_i$ emission spectra of the thioborine cations HBS⁺ and DBS⁺. King M. A., Klapstein D., Kuhn R., Maier J. P., Kroto H. W. «Mol. Phys.», 1985, 56, № 4, 871—885 (англ.)

С разрешением лучше 0,4 см⁻¹ исследованы спектры излучения $\tilde{A}^2\Sigma^+ - X^2\Pi_i$ четырех изотопич. молекул H¹¹B³²S⁺, H¹⁰B³²S⁺, D¹¹B³²S⁺, D¹⁰B³²S⁺ возбуждаемых электронным ударом. Выполнен колебательный анализ спектров. Определены колебательные частоты трех мод в состоянии $X^2\Pi_i$ и двух мод в состоянии $\tilde{A}^2\Sigma^+$, а также параметры Реннеровского и Ферми взаимодействий. М. А.

(Vi)

ср. 1986, 18, 118

HBS⁺
DBS⁺

1985

/ 104: 78172t $\tilde{A}^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_i$ emission spectra of the thioborane cations HBS⁺ and DBS⁺. King, M. A.; Klapstein, D.; Kuhn, R.; Maier, J. P.; Kroto, H. W. (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *Mol. Phys.* 1985, 56(4), 871-85 (Engl.) The emission spectra of the $\tilde{A}^2\Sigma^+ \rightarrow \tilde{X}^2\Pi_i$ transitions of HBS⁺ and DBS⁺ were obtained by electron-impact excitation. A vibronic analysis of the band systems was made and the vibrational frequencies of the 3 modes in the $\tilde{X}^2\Pi_i$ state, and 2 in the $\tilde{A}^2\Sigma^+$ state were obtained for various isotopic derivs. Renner and Fermi resonance effects of the bands involving the excitation of the ν''_2 mode were considered, and the parameters characterizing these interactions were evaluated.

($\tilde{A}^2\Sigma^+ \rightarrow \tilde{X}^2\Pi_i$)

C.A. 1986, 104, N10

HB S⁺
DB S⁺

(Am. 26578)

1987

Maier J.P.,

Di, смк-
орбум.
расизем.
J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt 2,
49-59.
83, N1,

HBS^+

DM 28970

1987

8 Д126. Структура и энергии двух низших электронных состояний в сульфидоборном катион-радикале $\text{RBS}^+(\text{R}=\text{H}, \text{F}, \text{Cl}, \text{CH}_3)$. Structures and energies of the two lowest-lying electronic states in the sulphido-borons radical cations, $\text{RBS}^+(\text{R}=\text{H}, \text{F}, \text{Cl}$ and $\text{CH}_3)$. Nguyen Minh Tho. «Mol. Phys.», 1987, 62, № 3, 735—748 (англ.)

Проведены расчеты структуры и энергий 4 сульфидоборных радикалов $\text{RBS}^+(\text{R}=\text{H}, \text{F}, \text{Cl}, \text{CH}_3)$ в их низших π и Σ электронных состояниях. Включены также данные для нейтральных центров. Геометрия, вращательные и колебательные частоты были определены в рамках НХФ/6—31 ГФ (d). Адиабатич. ионизац. энергии IE_a и энергии возбуждения получены в приближении 4-го порядка теории возмущений Меллера — Плессета в базисе 6—31 ГФ (d). С целью сравнения для системы HBS/HBS^+ проведены также расчеты с различными базисами и конфигурац. взаимодействиями. В целом расчетные и эксперим. данные находятся в хорошем соответствии, подтверждая существующие отнесения. Благодаря определенным компьютерным трудностям величины IE_a систематически завышены. Л. Д. Б.

М.П.

⊗ (+3)

ф. 1988, 18, № 8

RBS⁺ (OT 28970) HBS⁺

1987

R = H, F, Cl,
CH₃108: 173789r Structures and energies of the two lowest-lying electronic states in the sulfidoboron radical cations, RBS⁺ (R =

hydrogen, fluorine, chlorine, and methyl). Nguyen, Minh Ta. (Res. Sch. Chem., Aust. Natl. Univ., Canberra, 2601 Australia). Mol. Phys. 1987, 62(3), 735-48 (Eng). A theor. characterization was performed for the structures and energies of four sulfido-boron radical cations, RBS⁺ (R = H, F, Cl and CH₃) in their lowest-lying Σ and Π and related electronic states. Data for the neutral species are also included. Geometries, rotational and vibrational frequencies are detd. at the UHF/6-31G(d) level. Adiabatic ionization energies (IE_a) and excitation energies are obtained at the 4th-order Moeller-Plesset perturbation theory using the 6-31G(d,p) basis set. For the HBS/HBS⁺ system, calcs. with different basis sets and CI are also carried out for purposes of comparison. In general, calcd. and exp. structural parameters are in good accord supporting the assignments previously made. Due to the inherent difficulty of computational methods, calcd. IE_as are systematically underestimated with errors of 0.3 eV being typical. The excitation energies $\Delta E(^2\Sigma \leftarrow ^2\Pi)$ in the radical cations are however well predicted with errors of ~ 0.1 eV. The Jahn-Teller effect in the ground state of CH₃BS⁺ is studied in detail.

мод. парам
смысл
и значение

⊠ (+3)

C.A. 1988, 108, N 20

FBS⁺, ClBS⁺, CH₃BS⁺

HBS^+

от 28970

1987

⊕12 Б1046. Структуры и энергии двух низлежащих электронных состояний сульфидо-борных радикал-катионов PBS^+ ($\text{R}=\text{H}, \text{F}, \text{Cl}$ и CH_3): Structures and energies of the two lowest-lying electronic states in the sulphido-borons radical cations, RBS^+ ($\text{R}=\text{H}, \text{F}, \text{Cl}$ and CH_3). Nguyen M. T. «Mol. Phys.», 1987, 62, № 3, 735—748 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП в базисе 6-31 ГФ рассчитана структура, энергия, вращат. и колебат. частоты четырех радикал-катионов PBS^+ ($\text{P}=\text{H}, \text{F}, \text{Cl}$ и CH_3) в низлежащих $^2\Pi$ и $^2\Sigma$ электронных состояниях. Рассчитаны также соотв. нейтр. молекулы. Адиабатич. энергии ионизации I_a и энергии возбуждения рассчитаны с учетом электронной корреляции по теории возмущений Меллера—Плессета 4-го порядка с учетом всех одно, двух и четырехчастичных возбуждений в базисе 6-31 ГФ $_{++}$. Для HBS и HBS^+ проведены расчеты в различных базисах, а также методом КВ. Найдено хо-

М.П.

⊕13

X. 1988, 12, N 12

$\text{FBS}^+, \text{ClBS}^+, \text{CH}_3\text{BS}^+$

рошее соответствие эксперим. и рассчитанных структурных параметров. Расчет переоценивает I_a примерно на 0,3 эВ. Энергии возбуждения $^2\Pi$ — $^2\Sigma$ воспроизводятся с точностью $\sim 0,1$ эВ. Обсужден эффект Яна—Теллера для CH_3BS^+ , приводящий к искажению структуры симметрии C_{3v} . Отмечено, что искажения относительно малы, т. к. ян-теллеровская e -орбиталь существенно локализована на атоме S.

Н. В. Харчевникова

BHS⁺ lotn. 30490 1988
(HBS⁺) Jacob M. E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, n2, 290.

DBS⁺

1988

Maier J. P.

Phil. Trans. Roy. Soc.
London, 1988, A324,
N 1578, 209 - 221.

cf. 17.

(see HCP⁺; III)

HBS⁺

1988

Maier J. P.

Phil. Trans. Roy. Soc.
London, 1988, A324,
N 1578, 209-221.

see. 17.

(see. HCP⁺; III)

RBS⁺

от 31 448

1989

10 Б1031. Неэмпирическое исследование катионов RBS⁺ (R=H, F, Cl). An ab initio study of the RBS⁺ cations (R=H, F, Cl) / Largo-Cabrerizo A., Barrientos C. // J. Mol. Struct. Theochem.—1989.—183, № 1/2.—С. 183—189.—Англ.

Методом ССП в базисе 6—31 ГФ** рассчитано электронное строение ионов RBS⁺ (R=H, F и Cl), а также соотв. нейтр. соединений. Оптимизация структурных параметров ионов проведена для основного состояния ²Π и первого возбужденного состояния ²Σ⁺. Корреляц. эффекты во всех расчетах учитывались в рамках теории возмущений Меллера—Плессета 2-го порядка (МП2). Для всех соединений рассчитаны помимо структурных параметров распределение заряда, дипольные моменты и частоты колебаний. Показано, что учет корреляц. эффектов в приближении МП2 существенно улучшает согласие рассчитанных и эксперим. адиабатич. и вертикальных Пт ионизации нейтр. систем, а также энергий перехода A²Σ⁺—X²Π для катионов RBS⁺.

И. А. Тополь

М.А.

(2)
(X)

X. 1989, № 10

FB⁺, ClB⁺

RBS⁺

OM. 31448

1989

110: 160521p An ab initio study of the RBS⁺ cations (R = H, F, Cl). Largo-Cabrero, A.; Barrientos, C. (Dep. Quim. Fis., Fac. Cienc., Valladolid, Spain 47005). *THEOCHEM* 1989, 52, 183-9 (Eng). An ab initio study of the RBS⁺ cations (R = H, F, Cl) in their ²H ground state and ²Σ⁺ first excited state, and of the neutral compds., has been carried out at Hartree-Fock level using the 6-31G** basis set. The geometries, vibrational frequencies, and dipole moments of these species are computed and compared with the exptl. values where these are available. Vertical and adiabatic ionization potentials are also computed and compared with photoelectron spectra results.

ab initio
paren

(+2) RBS⁺, ● FBS⁺

C.A. 1989, 110, N 18

HBS⁺

1994

122: 92064n Geometries of thioborine and chlorothioboron cations. Chau, F. T.; Tang, Y. W.; Song, X. (Department of Applied Biology and Chemical Technology, Hong Kong Polytechnic, Hung Hom, Hong Kong). *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 1994, 70(1), 39-43 (Eng). The ionic geometries of thioborine HBS⁺ and chlorothioboron ClBS⁺ cations were deduced by applying Franck-Condon analyses to the corresponding He(I) photoelectron bands. The BH and BS bond lengths and the rotational consts. of HBS⁺ were resp. found to be 1.197 Å, 1.715 Å and 0.5603 cm⁻¹ in the X²Σ state and 1.185 Å, 1.639 Å and 0.6089 cm⁻¹ in the A²Σ⁺ state. As for the ClBS⁺ ion, the BCl and BS bond distances and the rotational const. have values of 1.590 Å, 1.716 Å and 0.0923 cm⁻¹ resp. The calcd. structural parameters are compared with those from exptl. work and ab initio calcns. The force consts. of the two cations also were detd.

см. п. 122
на с. 40

(11) ClBS⁺

C. A. 1995, 122, N 8