

BH2

BH₂

Gaines A.F., Page F.M. / 1966

Trans. Far. Soc., 62, n11, 3086

(A) Полупроводниковое излучение
электронного
средства паровых радикалов.
(см. см) III

1966

V-5525

strukt. (BH_2^+ , BH_2^- , NH_2^+ , BeH_2 ,

BeH_2 , BH_3 , CH_3^+ , BeH_3^-)

Peyerimhoff S.D., Buenker R.J., Allen L.

J.Chem.Phys, 1966, 45, N2, 734-749.

Geometry of molecules I wavefuntions for
some six- and eight- electron poly-
hydrides.

RF., 1967, 7D99.

J

A711 - BP

1964

, I (BeH_2 , BH_2^+ , BH_2^- , NH_2^+ , H_2O , BeH_3^- ,
 BeH_3 , CH_3^+ , Li_2O , F_2O , LiOH , FOH)

Allen L.C. , Russell J.D.,

J. Chem. Phys., 1967, 46, No 3, 1029-1037

Extenden Hückel theory and the shape of molecules.

my guess.

RJTis., 1967, 9D57

est orig. J

BH₂⁻

Kauffman Y.Y.

1969

KB-MEX
pacrim

U.S. Clearinghouse
Fed. Sci. Tech. Inform.,
AD 1969, AD-851300,
228.



(Gen. Bell₂)II

1970

ВН₂

8 Д153. Расчеты по методу самосогласованных МО ЛКАО с гауссовыми базисными функциями. V. ВН₂⁻. Sachs Lester M., Geller Murray, Kaufman Joyce LCAO-MO-SCF calculations using Gaussian basis functions. V. ВН₂⁻. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 2, 974—977 (англ.)

геометр.
стр-ра

По методу Хартри-Фока в приближении Рутана проведен расчет основного состояния ¹A₁ иона ВН₂⁻. Используются гауссовы базисные ф-ции (10 ф-ций s-типа и 6 ф-ций p-типа для атома В, 3 ф-ции s-типа и 2 ф-ции p-типа для атома Н). Вычислены угол между связями (102°) и длина связи ВН (2,3507 ат. ед.) и построены потенц. кривые зависимости энергии от угла между связями и длины связи. Приведены диаграммы Уолша зависимости орбитальных энергий от угла Н—В—Н. Ч. IV см. РЖФиз, 1970, 4Д115. Р. А. Эварестов

ф. 1970. 88

1970

BH₂⁻

70745g LCAO-MO-SCF calculations using Gaussian basis functions. V. BH₂⁻. Sachs, Lester M.; Geller, Murray; Kaufman, Joyce J. (Res. Inst. for Advan. Stud., Martin Marietta Corp., Baltimore, Md.). *J. Chem. Phys.* 1970, 52(2), 974-7 (Eng). This article reports the results of an intensive LCAO-MO-SCF investigation of the neg. ion BH₂⁻. The geometry of the (¹A₁) BH₂⁻ mol. was detd. to a high precision relative to the exact min. for the basis set and SCF wavefunctions used; the central angle was 102°, and the equil. B-H bond length 2.3507 bohr. Even within the Hartree-Fock Roothaan approxn. BH₂⁻ has a 4th bound orbital. A Walsh diagram of orbital energies vs. H-B-H angle is presented, and the discrepancies with Walsh's original prediction are discussed. The potential curves of BH₂⁻ as a function of angle and distance both indicate it to be a stable species.

RCJO

M. H.

M. H. Allen
J. H. Allen

C. A. 1970. 72. 14

BH₂⁻

[A-2546]

1971

Ginnarc B. M.

(отбор,
анал.
сверкует)

J. Amer. Chem. Soc.
1971, 93, N 3, 593-9.



(coll. NH₃, III)

BH_2^-

Nakatsuji Hiroshi | 1973

"J. Am. Chem. Soc."

1973, 95, N2, 354-61.

пол.

сифуи-

"Формы лежалых в основе
и возд. соединений"

(ср. BeH_2 ; III)

HBH-

*U-4898

1974

Simons Gary

Schwartz Anna K.

"J. Chem. Phys."

1974, 60, N6, 2272-
-74.

"Floating ellipsoidal Gaussian
orbital computations on
small molecules"

BH₂⁻

omnium 7219

1978

Daudel R. et al.

kb. ex.
paerem.

J. Mol. Struct., 1978, 50(2),
363-9.

(cur. Bt; III)

BH₂-

1978

Goddard J. D., et al.

re. acc.
proven

"J. Mol. Struct." 1978, 50,
N2, 363-69

en. BH-III

BH_2^{3-}

ommes 7228 1978

BH_2^{2-}

Takahata V.

BH_2^-

Chem. Phys. Lett

кв. мек.
факет,
уловлены

1978, 59 (3), 472-474

BH₂⁻

ommuc 9996

1980

BH₂⁻²

Glide well c.

молекула
водород

J. Mol. Struct., 1980,
65, 231-238

сис. нрст.

BH₂⁻ [Om-166 60] 1983

Aleksandrovskaia

A.M., Dmitrieva T.V., et al.

Рис. Zh. Prikl. Spektrosk.
ном. 1983, 38(2), 336-338.

(рис. H₂O⁻; III)

BH_2^-

1983

Clark Timothy, Chandra-
rasekhar Jayaraman,
et al.

Preprint
M. N.

J. Comput. Chem., 1983,
4, N3, 294-301.

(car. H^- ; III)

BH₂⁻

(Om. 19503)

1984

/101: 117066w Momentum density and molecular geometry. Bent boron hydride (BH₂⁻) and linear boron hydride (BH₂⁺). Koga, Toshikatsu; Kobayashi, Hisayoshi (Dep. Appl. Chem., Muroran Inst. Technol., Muroran, Japan 050). *Theor. Chim. Acta* 1984, 65(4), 303-10 (Eng). Based on a special form of the mol. virial theorem, the recently proposed method of momentum d. for interat. interactions was applied to the problem of mol. geometry. Two mols. BH₂⁻ and BH₂⁺, which have the same nuclear framework, but favor resp. bent and linear conformations, were studied. Using an approx. Hartree-Fock momentum d., the total mol. energy (including the nuclear repulsion) was partitioned into orbital components, and a geometry correlation diagram was derived. An atom-bond partitioning of the total energy was examd. based on the 1- and 2-center decompn. of the momentum d.

структура,
моп. патен

12(7) BH₂⁺



C. A. 1984, 101, N 14

BH_2^-

BH_2^+

отм. 19503

1984

11 Д56. Плотность импульсов и молекулярная геометрия. Изогнутый ион BH_2^- и линейный BH_2^+ . Momentum density and molecular geometry. Bent BH_2^- and linear BH_2^+ . Koga Toshikatsu, Kobayashi Hisayoshi. «Theor. chim. acta», 1984, 65, № 4, 303—310 (англ.).

С позиций метода плотности импульсов, основанного на спец. форме теоремы вириала для молекул, исследованы процессы изгиба молекул BH_2^- и BH_2^+ и форма их стабильной конфигурации. Использовались подходы с разложением полной энергии на вклады отдельных орбиталей (1) и на вклады от атомов и межатомных связей (2). Волн. ф-ции вычислялись в хартри-фоковском приближении на ф-ции углов HBN в базисе 6-31ГФ** с использованием программы CAUSSIAN 80. Для каждого значения угла HBN оптимизация орбитальных экспонент и длин связей проводилась одновременно. При использовании подхода (1) найдено, что наиболее важную роль в определении формы исследо-

геометр.,
структура

11

ср. 1984, 18, 111

ванных молекул играют соответственно изгибающая $3a_1$ и линеаризующая $2a_1$ орбитали. Вклад в геометрию молекул различных орбиталей располагается в следующем порядке: $1b_1 < 1a_1 \lesssim 1b_2 \lesssim 4a_2 < 2a_1 < 3a_1 < 2b_2$. При использовании подхода (2) найдено, что атомные компоненты играют доминирующую роль, причем В-атом дает линеаризующий вклад, а Н-атомы—изгибающий.

В. А. Куликов



BH_2^-

1988

Pople J. A., Schleyer P.
von Ragué, et al.

Chem. Phys. Lett., 1988,
145, NS, 359-364.

See;

●
(see BH; III)

BH₂⁻

1994

120: 280717k Full valence complete active space SCF, multireference CI, and density functional calculations of ¹A₁-³B₁ singlet-triplet gaps for the valence-isoelectronic series BH₂⁻, CH₂, NH₂⁺, AlH₂⁻, SiH₂, PH₂⁺, GaH₂⁻, GeH₂, and AsH₂⁺. Cramer, Christopher J.; Dulles, Frederic J.; Storer, Joey W.; Worthington, Sharon E. (Department of Chemistry and Supercomputer Institute, University of Minnesota, 207 Pleasant St. SE, Minneapolis, MN 55455 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 218(5-6), 387-94 (Eng). MR-CISD(Q)/CAS-SCF calcns. were done for the title dihydrides. Agreement with the available exptl. data is quite good for the ¹A₁-³B₁ singlet-triplet (S-T) energy gaps, as is agreement with other calcns. of similar quality. D.-functional-theory (DFT) calcns. using basis sets of similar quality with nonlocal exchange and correlation corrections were two to three orders of magnitude faster than MR-CI calcns. DFT agreed well with MR-CI for the first and third rows, although the use of different correlation functionals was required. Results for the second row were only fair with either correlation functional.

⊠ (+2)

C.A. 1994, 120, N22