

HBF +

ВНФ†

Jensen H.B., Ros P., 1971

Theoret. Chim. Acta, 1971, 21, 199.

⊕

Рассм. взаимодействие в диэлектрических
газах. BF , CO и N_2 при пропускании
лучей ЛСА $\text{O}-\text{MO}-\text{SCF}$.

ВНФ† $\Sigma_{\text{BF}} = 2,318$ $\Sigma_{\text{OH}} = 2,266$ $K_{\text{BF}} = 15,3$

ВФ† $\Sigma_{\text{OF}} = 2,37 (2,38)$ Σ_{OH} $K_{\text{BF}} = 12,5 (12,9)$

CO
 HeO^+

2,169(2,14)
2,143
 $\Sigma \text{C-O}$

—
2,106
 $\Sigma \text{C-H}$

~~26,2~~
~~24,0~~
~~24,0(13,0)~~
~~KCO~~

24,0(13,0)
26,2
K-O.

W_2
 NH^+

2,115(2,08)
2,117
 ΣN_2

—
1,983
 ΣNH

29,9(23,0)
30,5
K NH

HBF⁺ (номер 10504) 1977.

HFB⁺ Summers N.L.; et al.

(и.п.) J. Amer. Chem. Soc.,
1977, 99(12), 3960-65.

кв. мех.
расчет

HBF⁺ | ommick 7609 | 1979

Haese N.N., et al.

(μ, ν, ϵ)

Chem. Phys. Lett., 1979,
61 (2), 396-98

● (corr. HCN; III)

HBF + commens 8882; 8869 1979

HFB +

Gyrrell James.

J. Phys. Chem. 1979, 83,
N22, 2906-2911.

memor.
empire.

em. HCN - 11

НВТ⁺

[Om. 19284]

1984

DeFrees D. J.,
Binkley J. S., et al.,

вращат.
спектр.
кв. мех.
расчет.

J. Chem. Phys., 1984,
80, N 8, 3720-3725.

НФВ⁺

[отт. 18491]

1984

Знобима Т. С., Чаркин
О. П.,

теор. проект
Энергии
изомеризац.,
Vo

жс. неортан. жмисси,
1984, 29, №, 598 —
— 606.

HBF⁺

(OM. 21 603)

1985

Rzepa H.S.,

J. Mol. Struct. (Theochem)

1985, 121, 313-315.

neop.
pacem

НВФ+ (OM. 26249)

1986

Botschwina P.,

теор.

расчет

и. н.,

помещ.

ор-43

J. Mol. Spectrosc.,

1986, 118, N1, 76-87.

(см. ВН; III)

HBF^+ [$\text{Om. } 25860, \text{a}''$] 1986

Cazzoli F., Esposito C.D.,
Dore L., et al.,

Hf creny

J. Mol. Spectrosc., 1986,
119, N2, 467.

HBF^+

1986

105: 142476v Microwave spectrum of the HBF^+ molecular ion. Cazzoli, G.; Degli Esposti, C.; Dore, L.; Favero, P. G. (Cent. Stud. Spettrosc. Microonde, Univ. Bologna, 40126 Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 119(2), 467 (Eng). The 1st observation of the pure rotational spectrum of H^1BF^+ is reported. The obsd. transition frequencies are reported together with the derived mol. consts. The microwave measurements allow an accurate detn. of the rotational const. *Bo.*

у б чекмр,
ил. 11.

C. A. 1986, 105, N 16

НВФ+ (от 24/95)

1986

Чаркин О. П.,
Зюбенева Т. С.

расчет
Евро и
барьер
изомер.

Координаты. жилища,
1986, 12, N 8, 1011-1037.

HBF^+

1986

5 Л202. ИК-лазерная спектроскопия полосы $\nu_3\text{HBF}^+$, при модуляции концентрации ионов магнитным полем. Magnetic-field-modulated infrared laser spectroscopy of the $\text{HBF}^+\nu_3$ band. Kawaguchi Kentarou, Hirota Eizi. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 123, № 1-2, 1—3 (англ.)

Исследовано ИК-поглощение разряда в смеси $(\text{BF}_3:\text{H}_2)$ при парциальных давл. $(150:25) \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст. Применение переменного, с частотой 3,8 кГц, магн. поля напряженностью 76 Гс позволило промодулировать содержание линейной ионной формы H^{11}BF^+ в разряде и впервые выполнить частотные измерения ИК-поглощения в области $1710\text{—}1535\text{ см}^{-1}$. Методом лазерной спектроскопии, с высокой точностью, измерены положения 21 линии колебательно-вращательной полосы $\nu_3\text{H}^{11}\text{BF}^+$. Представлена интерпретация наблюдаемого спектра, определено положение начала полосы $\nu_3^0 = 1633,2241\text{ см}^{-1}$ и найдены значения молекулярных постоянных в основном и возбужденном колебательных состояниях иона H^{11}BF^+ . В. К.

(М.П.)

ср. 1986, 18, N5

НВF⁺

От 22 998

1986

) 10 Б1182. Инфракрасная лазерная спектроскопия полосы ν_3 НВF⁺ с модуляцией магнитным полем. Magnetic-field-modulated infrared laser spectroscopy of the НВF⁺ ν_3 band. Kawaguchi Kentarou, Hirota Eizi. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 123, № 1—2, 1—3 (англ.)

Методом полупроводниковой лазерной спектроскопии с модуляцией магн. полем измерен фрагмент вращат. структуры полосы ν_3 иона НВF⁺ образующегося в плазме разряда постоянного тока через смесь ВF₃/Н₂. Приведено положение и отнесение 21 линии Р и R ветвей ($J \leq 35$). Ионы НВF⁺ имеют линейное строение. Положение начала полосы (ν_0) и значения вращат. постоянных B' , B'' , D' , D'' НВF⁺ (см⁻¹): 1633,2241; 1,203006; 1,211623; $2,574 \cdot 10^{-6}$; $2,634 \cdot 10^{-6}$. В условиях разряда возможно образование и иона НВВ⁺ однако, согласно квантовомех. расчетам он менее стабилен, чем НВF⁺ и характеризуется вдвое меньшей вращат. постоянной.

В. М. Ковба

М.Л.

Х. 1986, 19, № 10

HBF⁺

(Om. 22998)

1986

194: 98399a Magnetic-field-modulated infrared laser spectroscopy of the fluorohydroboron(1+) (HBF⁺) ν_3 band. Kawaguchi, Kentarou; Hirota, Eizi (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 123(1-2), 1-3 (Eng). The linear HBF⁺ ion was detected for the 1st time in a d.c. discharge plasma of a BF₃/H₂ mixt. by IR diode laser spectroscopy with magnetic field modulation. The ν_3 band origin and rotational consts. of H¹¹BF⁺ were $\nu_0 = 1633.2241(12)$, $B'' = 1.211623(42)$, and $B' = 1.203066(43)$, in cm⁻¹ units.

(ν_3)

fp. room.

c. A. 1986, 104, N12

HBF^+

of. 26287

1987

20 Б1257. Молекулярная структура HBF^+ по данным микроволновой спектроскопии. The molecular structure of HBF^+ by microwave spectroscopy. Cazzoli G., Esposti C. D., Dore L., Favero P. G. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 121, № 2, 278—282 (англ.)

В миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах измерены вращат. спектры молекул H^{11}BF^+ , H^{10}BF^+ , D^{11}BF^+ и D^{10}BF^+ . Молекулы HBF^+ получали в низкотемпературном разрядном источнике, через к-рый прокачивалась смесь BF_3 с $\text{H}_2(\text{D}_2)$. Значения молекулярных постоянных B_0 , D_0 , eQq_B (в МГц): H^{11}BF^+ —36324,303; 0,07943; —5,19; H^{10}BF^+ 37703,884; 0,0843; —10,82; D^{11}BF^+ —29135,706; 0,04933; —5,27; D^{10}BF^+ —29870,350; 0,0525; —10,98. Значения параметров геометр. R_s —структуры; $R_s(\text{B—H})=1,1736$ А, $R_s(\text{B—F})=1,2102$ А.

В. М. Ковба

М.А.

X. 1987, 19, n 20

HBF^+

of. 26287

1987

9 Л154. Определение структуры иона HBF^+ методом микроволновой спектроскопии. The molecular structure of HBF^+ by microwave spectroscopy. Cazzoli G., Degli Esposti C., Dore L., Favero P. G. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 121, № 2, 278—282 (англ.)

Исследованы МВ-спектры 4-х изотопич. разновидностей молекулярного иона HBF^+ , полученного из BF_3 и H_2 (и D_2) в тлеющем разряде. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 5$ в основном колебательном состоянии, а также квадрупольная СТС линий. Определены значения вращательной и квартичной центробежной постоянных и постоянных квадрупольной связи ядер ^{10}B и ^{11}B . Вычислены равновесные длины связей в HBF^+ : $\text{BH} = 1,1736$, $\text{BF} = 1,2102$ Å.

М. Р. Алнев

М.П.

ф. 1987, 18, 49

HBF⁺

Om. 26287

1987

/ 106: 146236k The molecular structure of protonated fluoroborane(1)(HBF⁺) by microwave spectroscopy. Cazzoli, G.; Degli Esposti, C.; Dore, L.; Favero, P. G. (Cent. Stud. Spettrosc. Microonde, Univ. Bologna, Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 121(2), 278-82 (Eng). The mm- and sub-mm-wave spectra of the H¹⁰BF⁺, H¹¹BF⁺, D¹¹BF⁺, and D¹⁰BF⁺ isotopomers were obsd. and analyzed. The derived moments of inertia were used to det. an *r_s* structure of this mol. ion. The av. bond distance bond distances obtained are: *r_s*(BH) = 1.1736 and *r_s*(BF) = 1.2102 Å.

УВ спектр,
структур.
параметры

C.A. 1987, 106 N 12

HBF^+

Chem. 26458

1987

17 Б1248. Микроволновый спектр иона HBF^+ . The microwave spectrum of the HBF^+ ion. Saito S., Yamamoto S., Kawaguchi K. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 5, 2597—2599 (англ.)

На микроволновом (МВ) спектрометре с модуляцией источника в обл. частот 60—200 и 320—410 ГГц и новом МВ-спектрометре в области частот 60—100 и 210—310 ГГц с точностью около 30 кГц измерены вращат. спектры трех изотопич. образцов иона, HBF^+ (I), D_2BF^+ (II) и H^{10}BF^+ (III), в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен в приближении модели линейной молекулы с учетом квартичного центробежного искажения и В-ядерного квадрупольного взаимодействия. Для I, II и III, соотв., определены вращат. постоянные $B_0 = 36324,324(15)$, $29135,723(16)$ и $37703,925(31)$ МГц. Замещенная структура $r(\text{BH}) = 1,17347(2)$ А, $r(\text{BF}) = 1,21028(2)$ А хорошо согласуется с вычисленной неэмпирич. методом МО.

С. Н. Мурзин

М.А.

X. 1987, 19, N 17

HBF^+
 DBF^+

см. 26488

1987

† 8 Л175. Микроволновой спектр иона HBF^+ . The microwave spectrum of the HBF^+ ion. Saito Shuji, Yamamoto Satoshi. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 5, 2597—2599 (англ.)

В областях 60—200 и 320—410 ГГц измерены частоты чисто вращательных переходов в ионе HBF^+ . Приводятся сведения об использованных спектрометрах. В качестве источника излучения использовалась лампа с полым катодом. Ионы H(D)BF^+ получались в газовом разряде в смеси молекул BF_3 и $\text{H}_2(\text{D}_2)$. Для идентификации ионов использовался анализ сверхтонкой структуры ядер В при наложении внешнего магн. поля. Наблюдавшиеся спектры проанализированы с применением ф-лы для энергии вращательных уровней типичной линейной молекулы с учетом ядерного квадруполь-

дл.п.

ф. 1987, 18, № 8

ного взаимодействия. Для ионов H^{11}BF^+ , H^{10}BF^+ и D^{11}BF^+ определены вращательные постоянные, постоянные центробежного искажения и ядерной квадрупольной связи. Приведены также значения структурного параметра r_s , равного 1,17347(2) Å для связи ВН и 1,21028(2) Å для связи ВF. Эти величины согласуются с соответствующими известными из литературы значениями параметров r_e , полученными путем неэмпирич. расчетов.

В. А. Морозов

HBF^+

no. 26458

1987

/ 106: 185166g The microwave spectrum of the fluorohydroboron(1+) (HBF^+) ion. Saito, Shuji; Yamamoto, Satoshi; Kawaguchi, Kentaro (Fac. Sci., Nagoya Univ., Nagoya, Japan 464). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(5), 2597-9 (Eng). Rotational transitions of the HBF^+ ion were obsd. in the region up to 380 GHz by using a source-modulated microwave spectrometer combined with a hollow cathode free space cell. The HBF^+ (or DBF^+) ion was generated by a d.c. discharge in a mixt. of BF_3 and H_2 (or D_2). The ion was identified on the basis of the linear-mol. spectral pattern with the nuclear hyperfine structure of the B nucleus, supported by the spectral-intensity lowering by an external magnetic field. The rotational const., the centrifugal distortion const., and the nuclear quadrupole coupling const. were precisely detd. for 3 isotopic species: H^{11}BF^+ , H^{10}BF^+ , and D^{11}BF^+ . From the obsd. ground-state rotational consts., the combined r_e parameters were obtained; $r_e(\text{BH}) = 1.173\,47(2)$ Å and $r_e(\text{BF}) = 1.210\,28(2)$ Å.

(УВ спектр)
структур.
параметры

C. A. 1987, 106, N 22

HBF^+

form. 26576

1987

Sears T. J.,

дублиропр.
эксперим.
исследов.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, pt 2, 83,
N1, 111-126.

НВФ⁺

(om. 29252)

1988

Hirota E.

Phil. Trans. Roy.
Soc. London, 1988,
A 324, N 1578,
● 131-139.

обзор экстер-
результатов,
метод опре-
деления
длн. волнения

HBF^+

(Om 32227)

1989

nomerul.

по перхлорату

мол. парам

110: 121748y Orientational forces in proton-molecule interactions: the fluorohydroboron(1+) (HBF^+) potential energy surfaces. Gianturco, F. A.; Schneider, F.; Semprini, E.; Stefani, F. (Dep. Chem., Univ. Rome, 00185 Rome, Italy). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1989, 22(1), 49-63 (Eng). The interaction of the simplest at. ion, H^+ , with the polar diat. system BF is examd. over wide ranges of relative distance, orientation, and diat. bond distance. Calens. were carried out at the SCF level and at the CI level. Charge-transfer processes play a detg. role in selecting the correct adiabatic surface (or surfaces) needed to carry out scattering calens. Thus, the SCF approach to computing realistic potential energy surfaces (PES) for ion-mol. interactions is inadequate for treating the dynamics of the system in question.

c.A. 1989, 110, N14

$(\text{HBF})^+$

(Om 32227)

1989

16 Б1062. Ориентационные силы при взаимодействии протона с молекулой: потенциальные поверхности $(\text{HBF})^+$. Orientational forces in proton—molecule interactions: the $(\text{HBF})^+$ potential energy surfaces / Gianturco F. A., Schneider F., Semprini E., Stefani F. // J. Phys. B.— 1989.— 22, № 1.— С. 49—63.— Англ.

Неэмпирическими методами ССП и конфигурац. взаимодействия (КВ) с несколькими исходными конфигурациями исследованы потенциальные Пв системы $(\text{HBF})^+$. Расчеты проведены в базисе $(10s6p1d/6s4p1d)$ для В и F, $(7s1p/5s1p)$ для Н (в рамках метода ССП для более полного изучения потенциальных Пв приме-

М.П.

Х. 1989, N 16

нен также базис 6—311 ГФ**); набор исходных конфигураций в методе КВ включал 15—25 конфигураций. Результаты использованы для анализа динамики столкновений H^+ и BF по каналам переноса заряда ($H^+ + BF \rightarrow H + BF^+$) и неупругого рассеяния. Расчеты методом КВ предсказывают, что доминирует канал переноса заряда, а неупругое рассеяние индуцируется неадиабатич. взаимодействием; метод ССП приводит к обратному результату. Обсуждено влияние ориентации партнеров по столкновению на соотношение каналов, сделаны качеств. предположения о колебат. и вращат. распределениях продуктов реакции. А. А. Булаченко