

$\text{BF}_2\text{OH}.$

BF_2OH

Bp - 684 - XV

1972

146917v Microwave spectrum of boron difluoride hydroxide. Takeo, H.; Curl, R. F. (Chem. Dep., Rice Univ., Houston, Tex.). *J. Chem. Phys.* 1972, 56(9), 4314-17 (Eng). The microwave spectrum of BF_2OH was obsd. and assigned. The rotational consts. of the isotopic species $^{11}\text{BF}_2^{16}\text{OH}$, $^{10}\text{BF}_2^{16}\text{OH}$, $^{11}\text{BF}_2^{18}\text{OH}$, and $^{10}\text{BF}_2^{18}\text{OH}$ were detd. The inertial defects prove that the mol. is planar. Assuming the 2 BF bond lengths are the same, the bond distances and angles are: $r_{\text{BF}} = 1.32 \text{ \AA}$, $r_{\text{BO}} = 1.34 \text{ \AA}$, $r_{\text{OH}} = 0.94 \text{ \AA}$, $\angle \text{FBF} = 118^\circ$, $\angle \text{BOH} = 114.1^\circ$, $\angle \text{FBO} = 122.8^\circ$ (this is the angle cis to the OH). The dipole moment is $1.86 \pm 0.02 \text{ D}$. The dipole moment makes an angle of 50° with the BO bond with dipole moment line on the same side of the BO bond as the H.

спай. н.
Физ.
направл.
м. в. вектр

C. A. 1972. 76. 24

BF₂OH

ВФ-684-XV

1972

м.п.;
пол.
сф.-ра;

18 Б242. Микроволновый спектр молекулы BF₂OH.
Takeo H., Curl R. F. Microwave spectrum of BF₂OH.
«J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 9, 4314—4317 (англ.)

В диапазоне 12—40 Гц исследован микроволновый спектр молекулы BF₂OH (I) в основном колебательном состоянии. Идентифицированы линии всего 60 вращательных переходов 6 изотопич. разновидностей I в их естественном содержании. Определены вращательные постоянные всех изотопич. молекул, из к-рых вычислены структурные параметры I: BF=1,32, BO=1,34, OH=0,94А, FBF=118°, BOH=114,1°, FBO=122,8°. Измерен эффект Штарка в 11 линиях 3 изотопных молекул и найден усредненный (по всем 11 линиям) дипольный момент I: $\mu=1,86\pm0,02$ D ($\mu_a=1,75$, $\mu_b=0,64$).

М. Р. Алиев

Х. 1972. 20¹⁸

BF_2OH

1972.

6 Б23. Электронное строение BF_2OH . Leibovici Claude, Labarre Jean-François. Structure électronique de BF_2OH . «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1972, 69, № 10, 1571—1572 (франц.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентных приближениях ППДП/2 и ЧПДП рассчитана молекула BF_2OH . Использована эксперим. геометрия. Обе расчетные схемы приводят к близким результатам. Направление дипольного момента близко к опытному, но его величина завышена примерно на 20%. Показано, что связь В—F, находящаяся в транс-положении к связи О—Н, должна быть несколько короче второй связи В—F. Барьер внутреннего вращения группы О—Н оценен в 6,74 ккал/моль (7,01) — ППДП/2 (ЧПДП). Оптимизированные значения валентных углов FBF и FBO близки к опытным.

В. Л. Лебедев.

$E, \text{эВ}$;

Х. 1973. № 6

BF₂OH

1972

103847w Electronic structure of boron difluoride hydroxide. Leibovici, Claude; Labarre, Jean Francois (Lab. Chim. Coord., Univ. Paul Sabatier, Toulouse, Fr.). *J. Chim. Phys. Physicochim. Biol.* 1972, 69(10), 1571-2 (Fr). The electronic structure of BF₂OH was calcd. with the complete neglect of differential overlap (CNDO/2) and intermediate neglect of differential overlap (INDO) methods. The calcd. structure agreed well with that detd. by H. Takeo and R. F. Curl (1971) on the basis of the microwave spectrum except that the calcns. indicated that the B-F bond lengths are significantly different. All atoms in the mol. lie in the same plane. Values of the barrier to rotation of the proton, 6.74 and 7.01 kcal/mole, were obtained by the CNDO/2 and INDO methods, resp.

Uo

papers

C. A. 1973. 78 n 16

BF_2OH

1972.

З Д165. Электронное строение BF_2OH . Leibovici Claude, Labarre Jean-François. Structure électronique de BF_2OH . «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1972, 69, № 10, 1571—1572 (франц.)

Уо, зам.

Методом ССП МО ЛКАО в валентных приближениях ЧПДП и ППДП/2 исследовано электронное строение BF_2OH . Оба метода приводят к близким результатам. Дипольный момент завышен ~на 20%, тогда как его направление практически совпадает с опытным. Показано, что транс-связь В—F (по отношению к группе

Ф. 1973. №3.

ОН) должна быть несколько более короткой, чем *цис*-связь. Барьер вращения группы ОН вокруг связи О—В. оценен в 7,01 (6,74) ккал/моль. Проведен анализ полной энергии путем разбienia на компоненты и показано, что основной вклад в ее изменение при вращении вносит связь О—Н. Варьирование валентных углов F—В—F и F(*цис*)—В—О привело к равновесным значениям, практически совпадающим с опытными.

В. Л. Лебедев

BF₂OA

1974

Armstrong D. R.

Perkins P. G.

examp.

"Inogr. chim. acta" 1974, 10,

comp. acc.

N1, 77-82 (anus)

(all BF₃; III)

x. 1974 N24

BF₂OH

22 Б284. Микроволновый спектр BF₂OH. Takeo Harutoshii. «Tokē kogē siken sē hokoku, Tokyo kogyo shikensho hokoku, J. Nat. Chem. Lab. Ind.», 1974, 69, № 3, 73—77 (япон., рез. англ.)

Получены и идентифицированы спектры ¹¹BF₂¹⁶OH, ¹⁰BF₂¹⁶OH, ¹¹BF₂¹⁶OD, ¹⁰BF₂¹⁶OD, ¹¹BF₂¹⁸OH и ¹⁰BF₂¹⁸OH в области частот от 12 до 40 ГГц для основного колебательного состояния. Определены вращательные постоянные и компоненты дипольных моментов для всех образцов. Для основного изотопич. образца вращательные постоянные в МГц: $A=10320,32 \pm 0,04$, $B=10099,33 \pm 0,03$, $C=5095,13 \pm 0,02$, полный дипольный момент $1,86 \pm 0,02$ D. В предположении, что молекула плоская и что длины двух связей BF равны, определены структурные параметры: $r(B-F)=1,32$ Å, $r(BO)=1,34$ Å, $r(OH)=0,94$ Å, $\angle FBF=118^\circ$, $\angle BOH=114,1^\circ$, $\angle FBO=122,8^\circ$. Полученные параметры соответствуют цис-форме по отношению к связи OH.

и. н;
Химия
Структ.

ж. 1974. № 22

С. Н. Мудзин

BF_2OH

1974

м. в. спектр
геометрии

10 Д608. Микроволновый спектр BF_2OH . Takeo Nagatoshi. Microwave spectrum of BF_2OH . «Токо ко-го сикэнсё хококу, Tokyo kogyo shikensho hokoku, J. Nat. Chem. Lab. Ind.», 1974, 69, № 3, 73—77 (япон.; рез. англ.)

Отождествлен микроволн. спектр 6 изотопич. образцов молекулы BF_2OH . Установлено, что молекула плоская. Определены структурные параметры: $r_{\text{BF}}=1,32$, $r_{\text{BO}}=1,34$ и $r_{\text{OH}}=0,94$ Å; $\angle\text{FBF}=118^\circ$, $\angle\text{BOH}=114,1^\circ$, $\angle\text{FBO}=122,8^\circ$. Найдена величина дипольного момента, равная 1.86 ± 0.02 ед. Дебая.

Ф. 1974 N 10

BF₂OH

Common 10625 / 1980.

Jug K, et al.

(y)

Ref. Alex.
Packer

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

BF_2OH

1992

Spoliti M., Ramon-
do F., et al.

мод.
сверхкрит.,
Vi, сыводимом;
мор. растрем

Folia Chim. Theor.

Lat. 1992, 20(4),

201-21.

(сх. BH_2NH_3^+ ; BH_2NH_2 ;

BH_2NO_2 ; III)