

BH

N23

BH

Document 7977

1951

Huff D.N., Gordon S.; Morell.

H<sub>2</sub>, S,  
Cp

General Method and Thermo-  
dynamic Tables for Computation  
of Equilibrium Composition...  
Rept 1037 Cleveland, Ohio,  
NASA, 1951.

V4146

1959

B (Cp, H, S); B<sub>2</sub>, (Cp, H, S); BH (Cp, H, S);

BO (cp, H, S)

B<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (cp, H, S, V, Re)

Wilkins R.L., Altman R.L.

J.Chem. Phys., 1959, 31, N 2, 337-340 (am. j.)

Thermodynamic properties of some boron oxygen-h  
-hydrogen compovnds

PJ Xim., 1960 3789

F

J

*all. no. my. except.*

*1961*

*BH*

*BH<sub>3</sub>*

*B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>*

*B<sub>5</sub>H<sub>9</sub>*

*B<sub>10</sub>H<sub>14</sub>*

*A H<sub>f</sub>;  
m.g. cb-ba*

Evans W.H.

Preliminary Report on  
the Thermodynamic Pro-  
perties of Selected Light-  
Element and Some Related  
Compounds.

U.S. NBS, Report N7093, 1961.

1963

 $BH^+$  $K_{\text{diss}}$ 

Dissociation constant of pyrrolidinium ion and related thermodynamic quantities from 0 to 50°. Hannah B. Hetzer, Roger G. Bates, and R. A. Robinson (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Phys. Chem.* 67, 1124-7(1963). The thermodynamic dissocn. const. of pyrrolidinium ion ( $BH^+$ ) at 11 temps. from 0 to 50° was detd. from e.m.f. measurements of H-AgBr cells without liquid junction. The dissocn. const. ( $K_{bh}$ ) for the process  $BH^+ + H_2O \rightleftharpoons B + H_3O^+$  is given as a function of  $T$  (°K.) by the equation  $-\log K_{bh} = 2318.85/T + 5.2942 - 0.005923T$ . At 25°,  $-\log K_{bh}$  is 11.305;  $\Delta H^\circ$  is 54,470 j. mole<sup>-1</sup>,  $\Delta S^\circ$  is -33.7 j. degree<sup>-1</sup> mole<sup>-1</sup> and  $\Delta C_p^\circ$  is 68 j. degree<sup>-1</sup> mole<sup>-1</sup>.  
CA

C.A. 1963.58.13

13209a

V 5859

1966

BH, BO, TiO, ZrO, CH, C<sub>2</sub>, CN, NH, N<sub>2</sub>,  
NO, OH, O<sub>2</sub>, CO (K, Термог. гр-пп)

Tatum J.B.,

Publ. Dominion Astrophys. Observ.,  
Victoria, B.C., 1966, 13, 11, 17 pp

М, Б

BH (i)

$\Delta H_f^\circ$ <sub>298</sub>

$\Delta H_{at}$ <sub>298</sub>

1969

Steck S.Y. & gr.

J. Phys. Chem.,

73, 24, 1000.

(cm. B) I

BH<sup>+</sup>

1972.

106083j Calculation of some consecutive dissociation constants based on spectrophotometric and pH determinations. Popa, Gr.; Moldoveanu, S. (Fucultatea Chim., Univ. Bucuresti, Bucharest, Rom.). *Chim. Anal. (Bucharest)* 1972, 2(2), 103-6 (Rom). A flow chart and a FORTRAN program for the calcn. of the equil. consts. and mol. extinction coeffs. from spectrophotometric data were developed for consecutive dissocn. equls. of a base B in aq. soln.:  $B + H^+ \rightleftharpoons BH^+$ ,  $BH^+ + H^+ \rightleftharpoons BH_2^{2+}$ , and  $BH_2^{2+} + H^+ \rightleftharpoons BH_3^{3+}$ . The procedure, based on the theory developed by W.E. Wentworth (1965), is illustrated with data on the dissocn. of 1-alkyl-3,5-bis(*p*-dialkylaminobenzylidene)-piperidones.

G. Auslaender

Kp.

C.A. 1972. 77. N 16

(+2)



I



BH

БФ-Х-7896

Harley A.C.

1973.

изг. раз.

"Advan. Quantum. Chem."

1973, 7, 315-34.

( $\Delta H^\ddagger$ )

в-мех  
процес

● (cat.  $\text{Li}_2$ ; I)

1973

BH

BD

Kleinman, Lawrence I., et al;

J. Chem. Phys., 1973,

59(4), 2043-53.

(Kp)

в-м,  
рост  
ури и бои м.  
зр. п. м.  
б

(см. Лит; 1)

BH

ammun 5838

1974

AHf

Dewar M. J. S., et al

J. Amer. Chem. Soc

1974, 99 v16, 5231-41

ВМ

1982

13 Б915. Столкновительная передача энергии между вращательными состояниями ВН ( $A^1\Pi$ ,  $v'=0$ ), индуцированная He, Ar или  $H_2$ : эксперименты. Nédélec O., Dufayard J. Collision transfers between ВН,  $A^1\Pi$ ,  $v'=0$  rotational states, induced by He, Ar, or  $H_2$ : Experiments. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 1, 378—384 (англ.)

Вращат.  
состоян.

СВЧ-разряд в смесях 2%  $B_2H_6$  с He, Ar или  $H_2$  при давл. порядка  $10^{-2}$  мм и импульсное излучение жидкостного лазера использованы для получения радикалов ВН в состоянии  $A^1\Pi$   $v'=0$  и  $J'=1, 4, 7$ . Измеренные полные сечения передачи вращат. энергии составляют для  $J'=1$   $\sigma=17,0; 28,3$  и  $29,0 \text{ \AA}^2$ , для  $J'=4$   $\sigma=11,5; 24,2$  и  $24,9 \text{ \AA}^2$  и для  $J'=7$   $\sigma=8,5; 23,0$  и  $18,5 \text{ \AA}^2$  для He, Ar и  $H_2$  соотв. Выбор He в кач-ве газа-тушителя связан с возможностью сравнения эксперим. результатов с расчетами на основе неэмпир.

X. 1982, 19, N13.

рич. потенциала. Аг выбран как тяжелый инертный газ, а  $H_2$  — ввиду важности для астрофизич. исследований в кач-ве молек. газа. Преимущества выбора ВН состояли в большом ( $4 \text{ \AA}$ ) расстоянии между вращательными линиями  $P$ - и  $R$ -ветвей, что позволило измерять относительные интенсивности. Л. Ю. Русин



ВН

1983

8 Д327 ДЕП. О колебательной зависимости парамагнитной восприимчивости молекул ВН и АІН с учетом колебательной структуры электронного состояния А<sup>1</sup>П. Браун П. А., Ребане Т. К., Семакова О. И.; Ред. ж. «Вестн. ЛГУ. Физ., химия». Л., 1983. 13 с., ил. Библиогр. 14 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 11.05.83, № 2507-83 Деп.)

парамаг-  
нитн.

восприимчив.

Рассмотрена колебательная зависимость парамагн. восприимчивости молекул ВН и АІН, которые имеют замкнутую электронную оболочку. Показано, что парамагн. восприимчивость этих молекул быстро растет с ростом колебательного квантового числа. Это объясняется аномальным расположением электронных термов молекул ВН и АІН: возбужденное электронное состояние А<sup>1</sup>П достаточно близко подходит к основному электронному состоянию X<sup>1</sup>Σ, а при бесконечном межъядерном расстоянии R они даже сливаются, так

(H) X

90. 1983, 18, N 8

что энергия возбуждения стремится к нулю. Расчет проведен двумя способами: с учетом и без учета колебательной структуры электронного состояния  $A^1\Pi$ . Установлена эквивалентность этих способов с точностью до  $\kappa^3$ , где  $\kappa$  — параметр Борна—Оппенгеймера.

Автореферат

BH (15+)

Om. 17842

1983

электромагн.  
св-ла

Daborn G.T., Handy N.C.,

Mol. Phys., 1983, 49, N6,  
1277-1288.



BH<sup>+</sup>

1984

100: 109902c The ionic hydrogen bond and ion solvation. 2. Solvation of onium ions by one to seven water molecules. Relations between monomolecular, specific, and bulk hydrogen. Mautner, Michael (Cent. Chem. Phys., Natl. Bur. Stand., Washington, DC 20234 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1984, 106(5), 1265-72 (Eng). The relation between heats of solvation of onium ions BH<sup>+</sup> by 1 H<sub>2</sub>O mol.,  $-\Delta H^{\circ}_{0.1}$ , and by 4 H<sub>2</sub>O mols.,  $-\Delta H^{\circ}_{0.4}$ , is const. for most onium ions:  $H^{\circ}_{0.4}/H^{\circ}_{0.1}$  is  $2.28 \pm 0.1$  for all oxonium ions and monoprotonic ammonium and pyridinium ions, and  $3.1 \pm 0.1$  for polyprotic ammonium ions. These relations, in conjunction with the correlation between  $\Delta H^{\circ}_{0.1}$  and the proton affinity difference,  $\Delta PA = PA(B) - PA(H_2O)$ , allow the prediction of the total 4-mol. specific hydration energy  $-\Delta H^{\circ}_{0.4}$  for all onium ions within the exptl. accuracy of  $\pm 3$  kcal/mol. The obsd. (or predicted) 4-fold specific relative hydration energies simulate closely the relative bulk hydration enthalpies for most ions. For most onium ions differential hydration effects are detd. by the specific H bonding interactions. Deviations are useful to identify bulk solvation effects. For example, such deviations indicate attenuated bulk solvation of ions with Ph substituents.

ΔH solv. H<sub>2</sub>O

C.A. 1984, 100, N14

BH

Orin. 22042

1985

$\Delta_f H$   
(perem)

Pople J. A., Luke B. T.,  
Frisch M. J., et al.,  
J. Phys. Chem., 1985, 89,  
11, 2198-2203.

BH<sup>+</sup>

1987

141789d Assignment of absolute gas phase basicities of small molecules. McMahon, T. B. (Guelph-Waterloo Cent. Grad. Chem., Univ. Waterloo, Waterloo, ON Can. N2L 3G1). NATO Ser., Ser. C 1987, 193 (Struct./React. Thermochem. Ions), 19 (Eng). Heats of protonation data ( $\Delta H_f^\circ(\text{BH}^+)$ ) are evaluated in order to define and assign abs. proton affinities of some small molecules. The  $\Delta H_f^\circ(\text{BH}^+)$  data can be obtained from either monoenergetic electron impact or photoionization threshold measurements for reaction of  $\text{BH}^+$  and a neutral, radical fragment, F, from a stable mol.,  $\text{M} \rightarrow \text{BH}^+ + \text{F} + \text{e}^-$ . For  $\text{MeOH}$ , the value is 170.2 kcal/mol leading to a proton affinity of  $\text{CH}_2\text{O}$  of 170.9 kcal/mol. Often it is possible to produce a free radical  $\text{BH}$  by pyrolysis of some suitable precursor, X, ( $\text{X} \rightarrow \text{BH} + \text{Y}^-$ ) and to subsequently det. the ionization energy by monoenergetic electron impact, photoionization or photoelectron spectroscopy ( $\text{BH} \rightarrow \text{BH}^+ + \text{e}^-$ ). In some cases no stable mol. precursor M is available (e.g., in cases of  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{H}_3\text{S}^+$ ,  $\text{NH}_4^+$ , and  $\text{H}_2\text{O}^+$ ). They can be obtained through generation of van der Waals complexes:  $2\text{B} \rightarrow \text{B}_2$  and  $\text{B}_2 \rightarrow \text{BH}^+ + \text{D}$ . Ab initio calcns. can also be used to det. some proton affinity values.

( $\Delta_f H^\circ$ )

(1) 1X

C.A. 1987, 107, N16

$\text{CH}_2\text{O}$  (Ap)

BH

1989

Martin J. M. L.,  
François J. P. et al.

Do,  
ΔH<sub>f</sub>

Chem. Phys. Lett. 1989.  
163, N4-5, C. 387-391.

(cur. ● BeH; I)

ВН

1990  
† 3 Б1026. Об энергии диссоциации ВН. On the dissociation energy of BH / Bauschlicher Charles W., Langhoff Stephen R., Taylor Peter R. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 1.— С. 502—506.— Англ.

Многоконфигурационным методом ССП с последующим учетом полного конфигурац. вз-вия для 4 валентных электронов в широких базисах сгруппированных гауссовых ф-ций (до ф-ций типа  $d$  и  $f$  на В и типа  $d$  на Н) проведены расчеты энергий молекулы ВН в состояниях  $X^1\Sigma^+$  и  $A^1\Pi$  при межъядерных расстояниях до 100 ат. ед. Оценены спектроскопич. постоянные (в скобках — эксперим. величины):  $r_e = 2,333$  (2,329) ат. ед.;  $\omega_e = 2361$  (2367)  $\text{см}^{-1}$ ;  $D_e$ ;  $D_0 = 81,5 \pm 0,5$  ккал/моль для  $^1\Sigma^+$ -состояния;  $T_e$  и высота барьера, равная  $1,9 \pm 0,2$  ккал/моль, на потенциальной кривой  $A^1\Pi$ -состояния. Найдены времена туннелирования через барьер на кривой  $A$ -состояния вблизи обрыва в спектре испускания (при соотв-щих  $\nu'$  и  $I'$ ) и ширины колебательно-вращат. уровней этого состояния вблизи обрыва в спектре поглощения. При вычислении  $D_0$  учтена поправка на неполноту базиса и расчет проведен с полным учетом остов—остовной и остов—валентной коррекции.

Н. Ф. Степанов

М.Н.,  $D_0$ 

Х. 1991, № 3

ВН

1994

8 БЗ013. Термохимия  $BH_mCl_n$  рассчитанная на уровне теории Гауссина-2. Thermochemistry of  $BH_mCl_n$  calculated at the G-2 level of theory /Schlegel H. Bernhard, Harris Stephen J. //J. Phys. Chem. .—1994 .—98 ,№ 43 .—С. 11178—11180 .—Англ.

На уровне теории Гауссина-2 с точностью  $\pm 2$  ккал/моль оценены теплоты образования соединений  $BH_mCl_n$  в идеально-газ. состоянии при  $t$ -ре 298,15 К. Получены след. значения  $\Delta_f H^\circ$  (в ккал/моль):  $BH$  105,8;  $BH_2$  79,4;  $BCl$  42,5;  $BHCl$  34,5;  $BCl_2$  —6,8;  $BH_3$  24,9;  $BH_2Cl$  —19,0;  $BHCl_2$  —60,7 и  $BCl_3$  —98,6. Рассчитаны также теплоты атомизации и энтропии при 298 К для этих соединений. Проведено сравнение рассчитанных значений  $\Delta_f H^\circ$  с лит. эксперим. данными.

В. Ф. Байбуз

ΔH<sub>f</sub>

(78) 12

X. 1995, N 8

BH

OM 39518

1998

129: 266248n Heats of Formation of Simple Boron Compounds. Feller, David; Dixon, David A.; Peterson, Kirk A. (Environmental Molecular Sciences Laboratory, Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA 99352 USA). *J. Phys. Chem. A* 1998, 102(35), 7053-7059 (Eng), American Chemical Society. The heats of formation of BH, BH<sub>2</sub>, BH<sub>3</sub>, and B<sub>2</sub>H<sub>6</sub> have been obtained from ab initio coupled cluster calcns. by using a systematic sequence of correlation consistent Gaussian basis sets. The best values were obtained by extrapolating the finite basis set results to the complete basis set limit and by incorporating an est. of core/valence correlation effects. In general, the largest calcns. in this study utilized quadruple- $\zeta$ -level basis sets that were augmented by an addnl. shell of diffuse functions. Even larger basis set calcns. were performed on the smallest of the four systems in order to test the accuracy of the complete basis set extrapolation. Vibrational zero point energies were taken from expt. when available. Missing values were replaced by theor. harmonic frequencies scaled to more closely approx. the exptl. values. The calcd. heats of formation are  $\Delta H_f^\circ(\text{BH}) = 106.2 \pm 0.3$  kcal/mol,  $\Delta H_f^\circ(\text{BH}_2) = 78.4 \pm 0.6$  kcal/mol,  $\Delta H_f^\circ(\text{BH}_3) = 25.8 \pm 0.7$  kcal/mol, and  $\Delta H_f^\circ(\text{B}_2\text{H}_6) = 13.7 \pm 1.4$  kcal/mol.

(Δ<sub>f</sub>H)

D

(+3)



C.A. 1999, 129, N20.