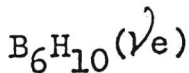


B_6H_{10}

V4401

1958



Hirshfeld F.H., Eriks K., Dickerson R.E.,
Lippert E.L., Lipconnb W.N.

J.Chem. Phys., 1958, 28, N 1, 56-61

Molecular and crystal structure of B_6H_{10} .

PJX., 1959, 10836

J

B6 H10

1970

Y

(135144c) Molecular-beam mass spectra of hexaborane(12) and octaborane(12). Stafford, Fred E.; Steck, Sara J.; Pressley, George A., Jr.; Dobson, Jerry; Schaeffer, Riley (Dep. Chem., Northwestern Univ., Evanston, Ill.). *Inorg. Chem.* 1970, 9(11), 2452-7 (Eng). Mol.-beam mass spectra and ionization potentials have been obtained for the easily decompd. B hydrides, hexaborane(12) and octaborane(12). Comparison of this type of spectrum with one that contains pyrolysis products formed on hot surfaces of the ion source and on the walls of the mass spectrometer suggests that another hexaborane and pentaborane(9) are formed pyrolytically from hexaborane(12). No pyrolytic decompn. of octaborane(12) is observable under similar conditions. Ionization potentials were measured to be 9.75 ± 0.2 eV (hexaborane(12)) and 9.52 ± 0.1 eV (octaborane(12)). Differences in fragmentation patterns of these 2 compds., together with results from previous exptl. work, are correlated with structure.

RCHH

C.A. 1970.73.26

+1



$B_6 N_{10}$

7 Д140. Гексаборан (10). Волновая функция метода самосогласованного поля, локализованные орбитали и связь с химическими свойствами. Epstein Irving R., Tossell John A., Switkes E., Stevens R. M., Lipscomb W. N. Hexaborane(10). Self-consistent field wave function, localized orbitals, and relationships to chemical properties. «Inorg. Chem.», 1971, 10, № 1, 171—181 (англ.)

1971

Э.Н. Строев

Электронное строение молекулы $B_6 N_{10}$ рассчитано эмпирич. методом ССП МО ЛКАО в миним. базисе слэтеровских ф-ций. Геометрия скелета атомов бора взята по уточненным рентгеноструктурным данным. Для атомов N принята идеализированная геометрия с симметричными мостиковыми связями B—N—B и расстоянием B—N 1,322 Å. Экспоненты базисных ф-ций взяты из оптимизированного расчета диборана. Приведены рассчитанные значения полной энергии и различных вкладов в полную энергию, энергий и коэф. МО. Выполнено преобразование

эксп.

9. 1971. 70

к локализованным МО методом максимизации собств. энергии кулоновского взаимодействия

$$D = \sum_k \left\langle \Phi_k \Phi_k \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \Phi_k \Phi_k \right\rangle$$

по Рюдонбергу. Анализ заселенностей по Малликену приводит к следующим значениям атомных зарядов: —0,02 на центральном атоме В, 0,04—0,07 на периферич. атомах В, от —0,04 до —0,09 на терминальных атомах Н и 0,02—0,03 на мостиковых атомах Н. Заселенности перекрывания связей находятся в соответствии с принятыми длинами связей В—В и предсказывают различия в характере связи и положениях мостиковых атомов Н. Проанализировано строение найденных локализованных двух- и трехцентровых МО и отмечена их переносимость. Рассчитанные энергии атомизации находятся в хорошем согласии с эксперим. данными. В свете полученных результатов подробно обсуждены магн. свойства и химическая реакционная способность рассматриваемого соединения.

А. Багатурьянц

1971

 B_6H_{10}

расчет

13 Б29. Гексаборан (10). Волновые функции самосогласованного поля, локализованные орбитали и связь с химическими свойствами. Epstein Irving R., Tos-sell John A., Switkes E., Stevens R. M., Lip-scomb W. N. Hexaborane (10). Self-consistent field wave function, localized orbitals, and relationships to chemical properties. «Inorg. Chem.», 1971, 10, № 1, 171—181 (англ.)

Проведены расчеты по методу МО ЛКАО ССП молекулы B_6H_{10} с использованием миним. базисного набора слейтеровских АО, экспоненты к-рых были взяты из оптимизированного расчета диборана B_2H_6 . Межъядерные расстояния В—В взяты из опыта, расстояния В—Н постулированы. Получены канонич. и локализованные

X. 1971. 13

МО (последние — на основе критерия максим. электронного внутриорбитального отталкивания). Найдено распределение электронной плотности (в том числе проведен анализ заселенностей по Малликену), на основе которого интерпретированы магнитные св-ва, дипольный момент и реакц. способность молекулы. Детально обсуждены возможности описания молекулы B_6H_{10} и изоэлектронных ей карборанов в терминах валентных структур.

Е. Шусторович

B6H10

Solomon I. I.
at el

1972

A

J. Amer. Chem. Soc.
1972, 94, n 5, 1443-1450

X. 1972. 15

III, C4H8BaH6

1977

B_6M_{10}

Perkie M.E., et al

Int. J. Quant. Chem.,
1977, 12, n5, 937-61

Электр.
структ.

(см B_4M_{10} ; III)

B₆H₁₀

22 Б270. Определение молекулярной структуры октагексаборана (10) в газовой фазе методом микроволновой спектроскопии. Schwach D., Don B., Burg A. B., Beaudet R. A. Gas phase skeletal molecular structure of hexaborane (10) determined by microwave spectroscopy. «J. Phys. Chem.», 1979, 83, № 11, 1465—1469 (англ.)

Измерены в области частот от 8 до 40 ГГц МВ-спектры гексаборана (10), B₆H₁₀ (I) и его 3-¹⁰B, 4-¹⁰B, 1-¹⁰B, 2-¹⁰B и полностью замещенного ¹⁰B-образцов (II). При идентификации переходов использован метод МВ—МВ двойного резонанса. Анализ спектров выполнен в приближении жесткого волчка. Для I и II, соотв., вращательные постоянные равны (в Мгц) A=5026,03(2) и 5352,17(3), B=4984,13(2) и 5321,23(3), C=3037,46(4) и 3252,02(4). По эффекту Штарка 1-го и 2-го порядков определены компоненты дипольного момента II: $\mu_a=1,68(1)$, $\mu_c=1,85(4)$ D, и полный дипольный момент $\mu=2,50(4)$ D. На основе полученных

мол. спектр.
структур

4.17

2.1979, N22

1979

XV-3430

данных вычислена молек. структура остова гексабора-
на: $r(B_2-B_3)=1,818(4)$ А, $r(B_3-B_4)=1,710(6)$, $r(B_4-$
 $-B_5)=1,654(3)$ А, $r(B_1-B_2)=1,774(13)$ А, $r(B_1-B_3)=$
 $=1,762(4)$ А, $r(B_1-B_4)=1,783(11)$ А. В спектрах
нек-рых образцов наблюдается аномальное расщепление
линий, не связанное с инструментальными особенностя-
ми установки, штарковским эффектом или ядерным
квадрупольным эффектом. С. Н. Мурзин

B₆H₁₀

XV-3730

1979

91: 11515b Gas phase skeletal molecular structure of hexaborane(10) determined by microwave spectroscopy. Schwoch, D.; Don, B.; Burg, A. B.; Beaudet, R. A. (Dep. Chem., Univ. Southern California, Los Angeles, CA 90007 USA). *J. Phys. Chem.* 1979, 83(11), 1465-9 (Eng). The microwave spectra of 6 B-substituted species of B₆H₁₀ were detd. From this data the gas phase skeletal mol. structure was detd., with the following bond lengths (Å): B₂-B₃, 1.818 ± 0.004; B₃-B₄, 1.710 ± 0.006; B₄-B₅, 1.654 ± 0.003; B₁-B₂, 1.774 ± 0.013; B₁-B₃, 1.762 ± 0.004; B₁-B₄, 1.783 ± 0.011. The dipole moment was detd. to be $\mu_a = 1.68 \pm 0.02$ D, $\mu_c = 1.85 \pm 0.04$ D, $\mu_{tot} = 2.50 \pm 0.04$ D. Anomalous line splittings were obsd. in some species, but have not yet been explained.

м. в. спектр,
структура

С.А. 1979, 21, N2

B₆M₁₀

1981

Brint Paul., et al.

J. Chem. Soc., Dalton
Trans. 1981, (12), 2515-
- 2522.

неопредел.
расчёт

(ссыл. B₅M₉ ; III)

B5-H11

1997

Bochicchio, R.C.;
Ponec, Robert; et al.,

cmp-pa,
meopem-
palem

Inorg. Chem. 1997, 36
(23), 5363-68.

(Cell. ByH10, III)