

BF

Bo
BF
мерф.

Tawde N.R.

1932.

Phil. Mag. 13, 501.

мерф BF₃, получ. из B₂O₃ и KBF₄
соединит из 2-пропанол
гидролиз иониз BO of
5000 to 3500 Å и иониз BF.

BF.

Dull R.B.

1935

гидро. коды

Phys. Rev., 1935, 47, 458.

в обл. 15500-23000 м²!

BF

Dull R.B

1935

Phys. Rev., 47, 458

Supp. (improved engine)
BF.

Pen
35.75

BF

Strong H.M., Knauss H.P., 1936

Phys. Rev., 1936, 49, 740.

Spun.
Cyl. cells.
Vib. array

B.F.

M. Strand

1936

H. Knauss

Phys. Rev. 49, 740

Полосатый спектр B.F.

Рокс 36.63

Вейс V, 19; Мегверс V, 20.

V4528

1938

BF (*mon. noct.*)

Paul F.W., Knauss H.P. Phys.Rev. 1938,
54, 1072³/₇

Rotational structure of the $^3\Sigma \rightarrow ^3\Pi$
bands of BF

CA., 1939, 1593'

J

ВН.

139P-4520-V

Christian M. Miescher &

1949

(M. M.)

Kelvin Phys. Abs. 1949, 22 588-90

Смесь ВН в мушкетерской обл. смеси

1м-ванууны. смесь с температурой с

дисперсией 0.3 Å/м . Разряд в гелии с BF_3

Исслед. 30 Q канон. поле $\Phi = 1.2 \text{ смф.}$

($\text{B}^{\text{II}}\text{F}$ и $\text{B}^{\text{I}}\text{F}$) Найденны пог - в $\chi^{\text{I}}\text{Z}$ и $\text{A}^{\text{I}}\text{P}$ пог

B-X-система (1630-1480 Å)

C-X-система (1520-1400 Å)

D-X-система (1390-1340 Å)

Вспомогат. значения получены по методу Рунге-Кутты, шаг $h = 0.01$, начальные условия $y(0) = 1, y'(0) = 0$.
 Список точек: $(0,1), (2,1), (3,1), (3,2), (4,2)$.

Чис.	V_c	W_c	w_{ext}	B_c	α	$\Phi_{\text{об}}$	z и
C	$\times 138651,4$						
B ³ Z	$\times 131820,0$	1631,40	23,10	1,634	0,020	4,2	1,217
A ³ П	X	1323,64	9,80	1,412	0,018		1,309
D ¹ П	72140	(1696)	(14)				
C ¹ Z	63010,1	1602,0	13,7				
B ¹ Z	65331,8	1652,7	12,7	1,66			1,20
A ¹ П	51150,1	1271,1	14,9	1,42	0,02	7,1+	1,31
X ¹ Z	0	1399,8	11,3	1,52	0,02	7,1+	1,26

*) Strong in Krauss Phys. Rev. 43, 440 1956
 Pauli in Krauss Phys. Rev. 54, 1072, 1938.

+ Par. D = $\frac{463}{52}$.

BP V4168

1949

BF (Mo)

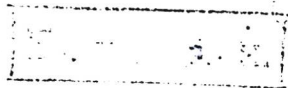
BO (Mo)

BH (Mo)

Chretien M., Miescher E.

Nature, 1949, 163, 996-997

Electronic band-systems of diatomic boron
compounds (BF, BO, BH)



Ch.A.1949, 7817b

J

F

V4519

1950

BF (мол. истощение)

Chretien M.

Helv. Phys. Acta, 1950, 23, 259-286

Baud spectra of boron monofluoride (BF) in
the schumann region.

CA, 1950, 44, 7653b

J

F

ЕСТЬ. Ф. К.

M. Chretien

Bsp-4519-V

Helv. Phys. Acta

B F

23, 259, 1950.

	ν_e	$\nu_{e'}$	$\nu_{e''}$	$\nu_{e''}$	$\nu_{e''}$	α
D ₁ π	3240	1656	14	-	-	-
C ₁ Σ	69008	16088	14.3	-	-	-
B ₁ π	65334	1693.0	12.7	-	1.66	-
A ₁ π	511514	1221.8	15.0	0.10	1.423	0.018
X ₁ Σ	0	1400.6	11.2	0.016	1.518	0.017

$$\tau_e'' = 1.262 \text{ s} \quad D'' < 8.5 \pm 0.5 \text{ eV}$$

03. 52.24. in penguin 8.3 A/cm² 1200-2100 Å

B.F.

Шенг для франц. академия еминанца
во 20-е кафедре - А-Х смб. $z'' = 1,26 \text{ A}$
 $z' = 1,30 \text{ A}$.

приводя смена ренов.

B# (7)

Bp-4556-V

1953
V 4546

Kaufman R.

Trans. N. J. Acad. Sci, 1953, 15, NS, 131-138

BF

S. S. Mitra

1954

J. Ch. Ph. 22, 2097-8

Сенов. пост. 'защитный'
III и IV зр.

$$BF = 8,044 \cdot 10^{-5} \text{ г/см.}$$

CH 49,35866.
см. ВВ.

Синонимы
покрытий
заболеваний,
III и IV группы

З. Митра

1954

З.Сн.Рн.22, 2087.

Синонимы покровных заболеваний
элементов III и IV групп.

бугорчат
сифилис.
Ке.

Ке расч. по формуле $= 4B^2, и^2, и^2, и^2 : 5.8883 \cdot 10^{-2} \cdot 2^2$

Синонимы покровных
K(ах) - III гр. K(Вх) - IV гр.

(BF)

го

$\frac{K(Вх)}{K(ах)} = C, \text{коэф.}$

незначительное изменение в заболевании к заболеванию

$$C = 1.043 + 0.052n$$

n - периодич. номер
таблицы

Молекула АХ	$\kappa \cdot 10^{-5}$ дин/см	Молекула ВХ	$\kappa \cdot 10^{-5}$ дин/см
BF	8.044	CF	9.268
BB ₂	2.666	CBr	3.349
AlJ	1.310	SiI	1.707
GaJ	1.232	GeJ	1.605
InJ	1.114	SnJ	1.451

BF

Varshni Y.P.,
Majumdar K.

1955

Спектроскопическое исследование
мат-ла.



(См. SiO) III

BF

Bp-5351-III

1957

Alec H. Schen

(E) Ann. Rev. Phys. Chem.
1957, 2, 439.

• can be

ВФ 4527 - V

ВФ

Онака Р. У. Р. Р. 27, №2, 374 1957

1900-2100 Å

Исследование $H^{\circ} - X^{\circ} \bar{Z}^{+}$ полос ВФ на вакуумном спектрографе с зеркалом.

Дисперсия 3,3-3,8 м/А. Выполнен французский анализ 13 полос (до макс 5-6)

Определили положение линий в спектре.
Для анализа  спектров конфигураций

	ω_e	ω_{ex_e}	ω_{ey_e}	β	α	γ
$X'Z$	1402,13	11,84	+ 0,056	1,5107	0,0165	-0,00015

$$\phi = 7 \cdot 10^{-6}$$

Измеряется гравитационное и электромагнитное

BF.

R. Onaka

[B90-4527-V] 1957

J. Ch. Ph, 27, 324.7

Уровень $A'^1\Pi \rightarrow X'^1\Sigma^+$ системы $B'^1\Pi$

с вращател. смещ. при переходе.

 $A'^1\Pi; T_e = 51157,4 \text{ } w_e = 1264 \text{ } w_{exe} = 12,5$ $w_{eye} = -0,24 \text{ cm}^{-1}$ $B_e = 1,420, d = 1,420$

CA. S2

79 f.

 $d_e = 0,016; \gamma_e = -0,0005$ $D = 7 \cdot 10^{-6}, Z_e = 1,304 \text{ \AA}^2$

$$\chi^1 \Sigma^+, \omega_e = 1402,1 \text{ } \omega_e x_e = 11,8, \omega_e y_e = 0,05;$$

$$B_e = 1,510, \alpha_e = 0,016, \gamma_e = -0,0001$$

$$D = 7 \cdot 10^{-6} \quad \underline{r_e = 1,265 \text{ \AA}}.$$

Удвоение катл. в АП созданы.

CH₃COF; BF; CH₃COF.BF₃ (Y, P)

~~9885~~
BP-V 4529

Susz E.P., Fuhrmann J.J.

Helv. Chim. Acta, 1957, 40, N 3, 712-
730
Etude spectro-graphique, des complexes
formes pa les ...

PK., 1959, N 5, 14318

10

1
[E 0 7 0 0 4 2]

BF

Barrow R.F., Premasirarn D.; 1958

Parry G., Proc. Phys. Soc. 71, 61

Взаимодействие атомов $C^3\Sigma, b^3\Sigma - a^3\Pi$
систем BF

Изучено 6 новых $b^3\Sigma - a^3\Pi$ и 0,0 нов-
ая $C^3\Sigma - a^3\Pi$. Интерференционные
переходы и предсказаны не наб-
людены.

✓ - 6/5/54

Борисов
Рем

$C^3\bar{Z}^+$	38011,97	-	-	-	A
$O^3\bar{Z}^+$	32040,42	1629,28	22,255	-	-
$Q^3\bar{\Pi}_{2eg}$	0	1323,86	9,20	0,047	24,25

B_e	d_e	$D \cdot 10^6$	Z_e
$1,6052^*$	-	8,2	$1,227^*$
$1,6407$	$0,0222^{xx}$	7,4	$1,213,8$
$1,4135$	$0,0158$	6,3	$4307g$

* $g_{ul} \quad v=0$

$xx \quad \alpha_2 = -0,00045$

BF

Barrow R.F., Premaswarup D. (1958)

Winternitz J., Zeeman P.B.

Proc. Phys. Soc. 71, 61-4, 1958.

1-4/5/4

Вращений. Анализ полюс $c^3\Sigma$,
 $b^3\Sigma - a^3\Pi$ систем BF.6 полюс $b^3\Sigma - a^3\Pi$

найдено

0,0 полюс $c^3\Sigma - a^3\Pi$

значит. Лудв.

PA

61

6 $^3\Pi$ соизв.W323 (954) показано, что $^3\Pi$ соизв. нормальное

Не найдено представлений или
взаимод. с сингапурскими соотв.

1960

V-77

Do (BCl, BF, BBr, BJ, AlCl, AlF, AlBr, AlJ,
GaCl, GaF, GaBr, GaJ, InCl, InF, InBr, InJ,
TlCl, TlF, TlBr, TlJ)

Есть д. н.

Barrow R.F.

Trans. Faraday Soc., 1960, 56, N 7,
952-958

Dissociation energies of the gaseous
monohydrides of baron, aluminium, gallium,
indium and thalium

PX., 1962, 2627

J, R.

F

I960

BF

Bernard J. Ransil

Do, Te

Revs. Mod. Phys., 32, 239

Studies in molecular structure, I.

Scope and summary of the diatomic
molecule program.

Can. Ab. Rep.

p-Tbl

Kelley K. K.,

U. S. Bur. Mines Bull,

1960, 584, 39

R98-8

BF(221)-T.X.  Do

BF

Вер
от 11.01.4530 -V

1960

297

спектр,
и.п.,

5B137. Изотопный эффект в синглетных полосах спектра молекулы BF. Мальцев А. А. «Оптика и спектроскопия», 1960, 9, № 4, 428—431.—С помощью вакуумного спектрографа ДФС-5 в области 1300—2090Å получен спектр разряда в трехфтористом боре естественного изотопного состава, а также обогащенном изотопом B^{10} до 92%. Использование последнего позволило уточнить спектр синглетных полос молекулы BF. Обнаружена новая система полос BF, отнесенная к переходу $E^1\Sigma^+ - X^1E^+$. Более точно определены колебательные постоянные состояния $D^1\Pi$.

есть этикетка

ф. 1961.5

BF

оттиск Р-4530-V

1960

297

12Б75. Изотопный эффект в синглетных полосах спектра молекулы BF. Мальцев А. А. «Оптика и спектроскопия», 1960, 9, № 4, 428—431. В вакуумной УФ-области (1300—2090 Å) с дисперсией 2,7 Å/мм исследован спектр испускания молекулы BF, возникающий в разряде через пары BF₃. Использование BF₃ естественного изотопного состава и обогащенного изотопом B¹⁰ до 92% позволило уточнить и расширить ранее известный спектр трех систем полос $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ и $D^1\Pi - X^1\Sigma^+$ молекулы BF (Chretien M., «Helv. phys. acta», 1950, 23, 259). Значительно уточнены постоянные (в см⁻¹) состояния $D^1\Pi$: $T_e = 72145,6$, $\omega_e' = 1685,5$ и $\omega_e'x_e' = 11,7$. В области 1300 см⁻¹ обнаружена новая система полос BF, отнесенная к переходу $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ с постоянными (в см⁻¹) $T_e \approx 76955$, $\omega_e' = 1630$ и $\omega_e x_e \approx 12$.
А. Мальцев

x.1961.12

BF

chemp

Bcp - 4530 - V

1960

297

Isotopic effect in the singlet spectral bands of the BF molecule. A. A. Mal'tsev. *Optika i Spektroskopiya* 9, 428-31(1960).—The discharge spectra of ($B^{11}_{0.82}B^{10}_{0.18}$)F₃ and B¹⁰F₃ (92% B¹⁰) were obtained with the aid of a vacuum spectrograph, 1300-2090 Å., with a resolving power of 120,000. In the 1650-1800-Å. region the spectra contained some BO bands, owing to the interaction of BF₃ with the walls of the discharge tube. The magnitude of the observed isotopic shifts accorded with the calcd. ones. The Q-branch was described ($\pm 0.3 \text{ cm.}^{-1}$) by the relation: $\nu_Q = 72,145.6 + 1685.5 (v' + \frac{1}{2}) - 11.7 (v' + \frac{1}{2})^2 - 1402.7 (v'' + \frac{1}{2}) + 12.1 (v'' + \frac{1}{2})^2$. The spectra also contained a new system of BF bands related to the transition $E^1 \Sigma^+ - X^1 \Sigma^+$.

A. P. Kotloby

C. A. 1961.55.13.12027 gh

BF

coll. working receipts . 1961

Evans W.H.

Preliminary Report on the
Thermodynamic Properties of
Selected Light-Element and
Some Related Compounds.
US.NBS, Report N7093, 1961.

U. 17.

8Б47. Новый спектр CF^+ . Verma R. D. New spectrum of CF^+ . «Canad. J. Phys.», 1961, 39, № 9, 1377—1383 (англ.).—В области 2025—1900 Å впервые наблюдается спектр излучения CF^+ ($A^1\Pi - X^1\Sigma^+$) в высокочастотном разряде (2450 Мгц) в потоке He со следами CF_4 при общем давлении в несколько мм рт. ст. Приведена таблица положений линий в полосах, измеренных с точностью $\pm 0,05 \text{ см}^{-1}$. Колебательный и вращательный анализы привели к следующим молекулярным константам: для $^1\Pi$ -состояния B_e' 1,4239, a_e' 0,01945, D_e' $6,1 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$, r_e' 1,2686 Å, ω_e' 1266,77, $\omega_e'x_e'$ 13,73; T_e' 51157,08 см^{-1} ; для Σ^+ -состояния B_e'' 1,5172, a_e'' 0,01877, D_e'' $6,7 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$, r_e'' 1,2290 Å, ω_e'' 1402,18, $\omega_e''x_e''$ 11,807, $\omega_e''y_e'' + 0,0517 \text{ см}^{-1}$. Из сходства наблюдаемого спектра со спектром CCl^+ заключено, что электронный переход может быть записан как $\pi\pi^4x\delta\pi\pi$, $A^1\Pi \rightarrow \pi\pi^4x\delta^2$, $X^1\Sigma^+$. Из увеличения равновесного межъядерного расстояния при ионизации CF делается вывод, что $\pi\pi$ -электрон в этой молекуле является антисвязывающим, сравнение с CCl показывает, что $x\delta$ -электрон также почти не принимает участия в образовании связи (в противоположность NO).

В. Дианов-Клоков

X. 1962. 8

1962

см. разд.

~~CF+~~
~~спектр~~

BF

CP⁺
BF

Verma R.D.,

1961.

Canad. J. Phys., 1961, 39, 1377

Hobbs' checking CP⁺.

A¹Π-X¹Σ⁺ 571.2025-1900 Å.

	Te	We	WeXe	Be	de	Ze
¹ Σ ⁺	0	1402.18	11.867	1.5172	0.01877	1.2290
¹ Π	51157.08	1266.77	13.73	1.4235	0.01945	1.2686

$$\mathcal{D}_e^I = 6.1 \cdot 10^{-6}$$

$$\mathcal{D}_e^{II} = 6.7 \cdot 10^{-6} \text{ au}^{-1}$$

1962

Турбул А.В., Карауцкое Е.А.
и др.

Рел

Термодинамические свойства
индивидуальных веществ, Киев,
Москва, 1962

21

K-13

BF(207)

- м.н.



ВФ.

Фрага С., Канси В. У. 1962

Мод. мод.

У. Чеш. Мис., 1962, 36, N 5, 1127.

разр

Изучение строения молекул.
VII. Ограниченное конфигурацион-
ное взаимодействие для из-
бранной двукратной мо-
лекулы первого ряда.

V-4283

X. 1963. 24

1962

BF, BCl
CF⁺, CCl⁺

Spectra attributed to CF⁺ and CCl⁺. R. D. Verma (Natl. Res. Council, Ottawa, Can.). *Can. J. Phys.* 40, 1852(1962); cf. *CA* 55, 25461d; 56, 6796f. Previously reported spectra attributed to CF⁺ and CCl⁺ are incorrect. The lines are due to BF and BCl. The source of the B is the discharge tube.

Milton Landy

✓
C.A-1963-58.4.

2003h

~~CF~~ (BF)

1962

18 Б105. Замечание о спектрах, отнесенных к CF^+ и CCl^+ . Verma R. D. Note on the spectra attributed to CF^+ and CCl^+ . «Canad. J. Phys.», 1962, 40, № 12, 1852 (англ.)

При сравнении спектров, полученных ранее в работах автора (РЖХим, 1962, 8Б47) и отнесенных им к CF^+ и CCl^+ , с известными спектрами BF и BCl соответственно обнаружена их идентичность, что свидетельствует о неправильном отнесении, сделанном в указанных работах. Предположено, что источником бора могло служить пирексовое стекло разрядной трубки.

В. Юнгман

X. 1963. 18

1963
Hultgren R., Orr R.L., Ander-
son P.D., Kelley K.K.,

Selected Values of Thermody-
namic Properties of Metals and
Alloys, 1963

Page - 7
(K-31)

B.F.(25)-  m.x., 20

V4524

1963

BF, BBr,
BCl, BI (mon. molecules.)

Kristiansen L., Cyvin S.J.
J. Molec. Spectrosc., 1963, 11, N3, 185-194

Vibrational meansquare amplitude matrices.
Part XIX. Cariolis coupling coefficients in
planas symmetrical XX_3 molecules.

PJK., 1964, 4D115

J

BF

Оттиск 467 1963

электронный
спектр

10 Б94. Электронный спектр BF. Robinson De-
an W. The electronic spectrum of BF. «J. Molec. Spect-
rosc.», 1963, 11, № 4, 275—300 (англ.)

При среднем разрешении получен эмиссионный спектр
BF в области $9500-28\,000\text{ см}^{-1}$. Обнаружено 7 новых
систем полос, включающих 4 известных состояния и,
по-видимому, 4 новых состояния. Все состояния отожд-
ествлены как синглетные. Приведена возможная ин-
терпретация переходов. Первый потенциал ионизации
определен в области $88\,500\text{ см}^{-1}$. Р. Ф.

БФ-1-649
I-800E-65

x. 1965.10

BF

BP-V-0419

1963

467

The electronic spectrum of BF. Dean W. Robinson (Johns Hopkins Univ., Baltimore, Md.). *J. Mol. Spectry.* 11(4), 275-300(1963). The emission spectrum of BF was excited and photographed with moderate resolution between 9500 and 28,000 cm^{-1} . Seven new band systems were found involving 4 old states and what are believed to be 4 new ones. All are assigned as singlets. All singlet states except the previously known $A^1\Pi$ and $X^1\Sigma$ involve excitation of 1 electron from the same orbital into extra-valence-shell orbitals. The 1st ionization potential is 88,500 cm^{-1} . RCKP

success

envelop

BP-V-0419

C.A. 1963.59.13

14745h

V4167

1964

B-H, B-C, B-I, B-Br, B-N, B-Cl, B-O, B-F (D)

Chia-Lai Pan,

Hua Hsueh Tung Pai, 1964, (5), 309-10.

Empirical formula for the cleavage energy of
boron bonds.

CA, 1965, 62. N 1, 44e

J

F

BF

Nesvet R. K.

1964

кв. мех.
расчет.

Ж. Совец. Физ., 40, N 12, 3619.

Электронная структура
молекул N_2 , CO и BF.

(см. N_2)

9254-1
V-4526

V-5452

1965

BcF, BF(Do)

Дилденбраун Д.Л.,
II A (мол. проф.)

Hildenbrand D.L.,

Nasa Accession No H55-31318, Rept.

No. AD 467028, Avail.

CFSHY, 39-92 pp, 1965.

J.

BQP - 4522-V

1965

5 Д205. Масс-спектрометрическое определение энергии диссоциации монофторида бора. Hildenbrand Donald L., Murad Edmond. Dissociation energy of boron monofluoride from mass-spectrometric studies. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, № 4, 1400—1403 (англ.)

Масс-спектрометрически исследован равновесный состав газообразной смеси BF , BF_3 , Ca , CaF и CaF_2 в области т-р от 1553 до 1730° К. Газообразная смесь получалась в графитовой ячейке Кнудсена из смеси элементарного бора с фторидом кальция и идентифицировалась по масс-спектрам с помощью кривых эффективности ионизации. По ионным токам, полученным при энергиях ионизирующих электронов на несколько электронвольт выше порога, оценены константы равновесия и теплоты

ф. 1966. 59

нескольких реакций, включающих BF (газ). С их помощью вычислены стандартная теплота образования и энергия диссоциации BF (газ), равные соответственно $-27,5 \pm 3$ ккал/моль и $7,85 \pm 0,15$ эв. Термохимич. энергия диссоциации BF значительно больше величины, полученной при линейной экстраполяции колебательных уровней основного состояния, но хорошо согласуется с величиной, полученной при короткой экстраполяции колебательных уровней возбужденного $^1\Pi$ -состояния. А. Додонов

1965

BF(g)

Dissociation energy of boron monofluoride from mass spectrometric studies. Donald L. Hildenbrand and Edmond Murad (Philco Corp., Newport Beach, Calif.). *J. Chem. Phys.* 43(4), 1400-3(1965)(Eng). Gaseous equil. involving BF, BF₃, Ca, CaF, and CaF₂ were studied by mass spectrometry at 1583°-1734°K. The vapor species were produced in a graphite Knudsen cell contg. a mixt. of elemental B and Ca fluoride, and they were identified from their characteristic mass spectra and ionization-efficiency curves. From ion-intensity measurements made at ionizing energies a few volts above threshold, the equil. consts and heats of several reactions involving BF(g) were evaluated. These results yield the standard heat of formation -27.5 ± 3 kcal./mole for BF(g) and the dissocn. energy, D_0° , of 7.85 ± 0.15 ev. The thermochem. dissocn. energy of BF is significantly larger than a spectroscopic value obtained from linear extrapolation of the ground-state vibrational levels, but it agrees well with a value taken from a short extrapolation of the vibrational levels in the excited 1π state. RCJQ

Bp-4522-V

C.A. 1965. 63.6
6387 ef

1965

Кно W. M.

BF

расчет

IV
- M 884
- Бор

J. Chem. Phys., 1965, 43, n 2, 624

Электронная структура
молекулы CO и BF.

(см. CO) III.



BF

| ВФ - 5471 - V |

1965

Спектр.

Радиочаст.
разряд ω_e
 $\omega_e \chi_e$

9 Д160. Идентификация полос 1—0 и 1—2 системы $c^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$ молекулы BF. Krishnamachari S. L. N. G., Singh Mahavir. Identification of the 1—0 and 1—2 bands of the $c^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$ system of BF. «Current Sci.», (India), 1965, 34, № 23, 655—656 (англ.)

В спектре радиочастотного разряда в газообразном BF_3 наблюдаются две новые полосы около 2525 А и 2707 А, отнесенные к переходам 1—0 и 1—2 системы $c^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$ в BF^{10} . Для подтверждения отнесения исследованы спектры при различных концентрациях BF^{10} в образцах. Измеренные изотопич. сдвиги совпадают с вычисленными. Частоты голов полос расположены в схему Деландра, которая приводится также для системы $b^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$. Для состояний $c^3\Sigma^+$, $b^3\Sigma^+$, $a^3\Pi$ определены колебательные постоянные ω_e , $\omega_e \chi_e$ обеих молекул.

М. Ковнер

ф. 1966. 97Д

BF

BCP-5471-V!

1965

Identification of the 1-0 and 1-2 bands of the $c^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$ system of BF. S. L. N. G. Krishnamachari and Mahavir Singh (At. Energy Estab., Bombay). *Current Sci. (India)* 34(23), 655-6(1965)(Eng). Two new bands were observed at 2525 and 2707 Å. while passing radio-frequency waves (3-11 Mc.) through BF₃ gas at 100 w. The bands were assigned to the ^{10}BF mol. and were obtained in good intensity at low pressures of BF₃. These bands are violet degraded and contain 5 prominent heads, 4 of which are strong. The vibrational assignment as the 1-0 and 1-2 bands of the $c \rightarrow a$ system has been confirmed by observing the spectra of BF₃ samples enriched to 20, 54, and 90% ^{10}B . These spectra, the Deslandres scheme for the band heads, and the calcd. vibrational consts. for ^{10}BF are presented.

G. S. Melville, Jr.

C.A. 1966. 64. 11
157926

NO

BF

Вар-5238-III

1965

3 Б22. Расчет ридберговских уровней молекул NO и BF. Lefebvre-Brion H., Moser C. M. Calculation of Rydberg levels in NO and BF. «J. Molec. Spectrosc.», 1965, 15, № 2, 211—219 (англ.)

Выполнен расчет ридберговских состояний молекул NO и BF. Каждое состояние описывается электронной конфигурацией, в которой внешний электрон движется в поле неполяризующегося мол. остова. Мол. орбитали остова являются самосогласованными МО ЛКАО либо молекулы NO, либо соответствующего иона NO⁺. Установлено, что оба расчета приводят к энергиям ридберговских термов, очень хорошо согласующимся с экспериментально наблюдаемыми энергиями возбуждения.

(См. также NO) III

X. 1966. 3

кроме того, полученные результаты подтверждают гипотезу об одноэлектронном характере ридберговских состояний NO, вытекающую из анализа экспер. данных (РЖХим, 1963, 22Б59). Аналогичные результаты, полученные для BF, приводят к новому отнесению некоторых полос в эмиссионном спектре. Так, расчет показывает, что $\Sigma-\Sigma$ -система, интерпретированная ранее (РЖХим, 1965, 10Б94) как синглетная, в действительности, по-видимому, является триплетной системой. Дано также отнесение и других полос в эмиссионном спектре BF.

В. Быховский

№ 6197

1965

N_2 ; CD; BF (Te, мал. носы.) расклет

Nesbet R.K.

J. Chem. Phys., 1965, 43, N12,
4403-09

Возл. экстр. спектры
и в. м. р. спектры

10



BF Herrer James E., Dressler Kurt. 1966

J. Chem. Phys., 45, 18, 3149.

Радиационное вынесение
из для молекулярных пере-
ходов у. в γ -область.



1 ат. H₂.



BF

D_0 ,
пот.
полв.1.
В

104 Д106. Энергии диссоциации монофторидов 3А груп-
пы — возможность существования максимума на потен-
циальных кривых в возбужденных П-состояниях. Mu-
rad Edmond, Hildenbrand-Donald L., Main
Roger P. Dissociation energies of group IIIA monoflu-
orides — the possibility of potential maxima in their
excited Π states. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 1, 263—269
(англ.)

С помощью использования высокотемпературной масс-
спектральной техники измерены энергии диссоциации
 D_0'' для молекул GaF, InF и TlF. Проведенные измере-
ния вместе с опубликованными ранее дают $D_0'' = 180 \pm 3$,
 159 ± 3 , $138 \pm 3,5$, $121 \pm 3,5$, $101 \pm 3,5$ ккал/моль для BF,
AlF, GaF, InF и TlF соответственно. Сравнение приве-
денных величин D_0'' с величинами, полученными из

1966
357

ВФ-5506-1
ВФ-5400-1
В

97. 1967. 42

оптич. измерений путем экстраполяции $A^1\Pi$ -состояния по Берджу — Шпонеру, показывает, что спектроскопич. величины больше термохимических. Такое различие, вероятно, связано с наличием максимумов на кривых потенц. энергии молекул BF , AlF , GaF и InF в состоянии $A^1\Pi$ и с наличием максимума на кривой потенц. энергии молекулы TlF в состоянии $a^3\Pi_1$. Измерены потенциалы ионизации для молекул BF , AlF , InF и TlF , которые оказались равными $11,5 \pm 0,4$, $9,5 \pm 0,5$, $10,6 \pm 0,4$, $9,6 \pm 0,5$ и $11,2 \pm 0,5$ эв соответственно. Энергии диссоциации и потенциалы ионизации обсуждены с точки зрения молекулярных состояний соответствующих молекул.

Г. К.

BF, AlF

GaF, InF

TlF

(D_0)

+ Sum

C.A. 1966. 65. 7
9752 gh

Dissociation energies of group IIIA monofluorides. The possibility of potential maxima in their excited π states. Edmond Murad, Donald L. Hildenbrand, and Roger P. Main (Aeron. Div. of Philco Corp., Newport Beach, Calif.). *J. Chem. Phys.* 45(1), 263-9(1966)(Eng). The dissoen.-energies D_0'' were measured for GaF, InF, and TlF by using high-temp. mass-spectrometric techniques. These results, along with those from previous studies, yield $D_0'' = 180 \pm 3, 159 \pm 3, 138 \pm 3.5, 121 \pm 3.5,$ and 101 ± 3.5 kcal./mole for BF, AlF, GaF, InF, and TlF, resp. Comparison of D_0'' thus obtained with that derived from Birge-Sponer extrapolation of the $A^1\Pi$ state indicates that for all these mols. the spectroscopically derived dissoen. energies are higher than the thermochemical values. The difference may be due to a potential max. in the $A^1\Pi$ states BF, AlF, GaF, and InF. A max. is suggested for the $a^3\Pi_1$ state of TlF. The appearance potentials of these monofluorides are $11.5 \pm 0.4, 9.5 \pm 0.5, 10.6 \pm 0.4, 9.6 \pm 0.5,$ and 11.2 ± 0.5 eV. for $BF^+, AlF^+, GaF^+, InF^+,$ and $TlF^+,$ resp. The dissoen. energies and the appearance potentials are discussed in terms of the mol. states of the resp. mol.

RCJQ

1966

357

B9-5506-1
B9-5400-1

V 6208

1966

BF, CO, N₂ (E, molec. wct.)

Schwendeman R.H.,

J. Chem. Phys., 1966, 44, 2115-2118

PNP, 1966, 9D 60

10

B.F.

La Paglia S.R. 1967

Theoret. chim. acta, 8, №3,
185.

Теоретические
электронные
гетероядерные
моменты.



Вероятности
переходов для
двухатомных
(см. Li F)

1967

Ei, strukt. (ряд водородов, N_2 , CO, BF, C_2 , BN, BeO, LiF и многоатомн. молек.)

Nesbet R.K.

New-York-London, Acad. Press, 1967, 1-24.

Approximate Hartree-Fock calculations on small molecules.

PJF., 1967, 11D126

J.

BF

D₀

Yoshimine M.,
McLean A.D.

1967

Int. J. Quantum. Chem.,
Symp. 1967 (N 1)

(see. Yif) III



BF

1968

Bader R. F. W., Bandrauk A. A.

J. Chem. Phys., 49, n 4, 1666

Релаксация распределе-
ния заряда в молекуле
и колебательная смеще-
ная постоянная

(см. N_2) III

ВН

1968

Чаркин О.П.
Деткина Л.Б.

М. Спирокт. Тесени,

1968, 9, ~5, 867

(4)

(См. Ли 4,
всп. ввр.) II

BF

вр. анализ

14 Б145. Вращательный анализ полосы при 14 900 cm^{-1} системы $^3\Sigma-^3\Sigma$ молекулы BF. Czarny J., Felenbok P. Rotational analysis of the band at 14 900 cm^{-1} of a $^3\Sigma-^3\Sigma$ system of the BF molecule. «Chem. Phys. Letters», 1968, 2, № 8, 533—535 (англ.)

Применение спектрографа очень высокой разрешающей силы позволило измерить триплетное расщепление (порядка $0,15 \text{ cm}^{-1}$) в полосе при $14 900 \text{ cm}^{-1}$ спектра BF. Полоса состоит из трех *P*- и трех *R*-ветвей. В предположении, что полоса относится к переходу $e^2\Sigma-b^3\Sigma$, получены ф-лы для разностей $R_2(N)-R_1(N)$, $R_2(N)-R_3(N)$, $P_2(N)-P_1(N)$, $P_2(N)-P_3(N)$ и $P_2(N)-[P_2(N)+P_3(N)]/2=R_2(N)-[R_1(N)+R_3(N)]/2$. Последние разности зависят только от вращательных постоянных и не зависят от вращательного квантового числа *N*. Эксперим. точки располагаются на построенных по этим формулам кривых зависимости разностей от *N* (две из них имеют вид горизонтальной прямой линии), что подтверждает предложенную интерпретацию полосы. М. А. Ковнер

X. 1969. 14

1968

0159-1

BF

V-6540

1968

92087e Rotational analysis of the band at $14,900 \text{ cm}^{-1}$ of a $^2\Sigma-^3\Sigma$ system of the BF molecule. Czarny, Jean; Felenbok, Paul (Observ. Meudon, Meudon, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1968, 2(8), 533-5 (Eng). The BF spectrum was excited by a 2450-MHz. microwave discharge. The band at $14,900 \text{ cm}^{-1}$ was recorded and is composed of 3 P and 3 R branches. Satellite branches were not observed. The triplet splitting was very small ($\sim 0.15 \text{ cm}^{-1}$) and was measured for $19 \leq N \leq 48$. Theoretical considerations indicate that this band is a small $e^3\Sigma-b^3\Sigma$ system rather than a $J^1\Sigma-H^1\Sigma$ transition as assigned by D. W. Robinson (1963). Very good agreement between calcd. combination differences and those given by R. F. Barrow (private communication) confirms the suggestion by H. Lefebvre-Brion and C. M. Moser (1965) that the lower state is the $b^3\Sigma$ state. FBJN

Czarny, Jean

 $e^3\Sigma-b^3\Sigma$

C.A. 1969

70.20

BF

V-6510

1968

8 Д232. Вращательный анализ полосы у $14\,900\text{ см}^{-1}$ системы $^3\Sigma-^3\Sigma$ молекулы BF. Czarny J., Felenbok P. Rotational analysis of the band at $14\,900\text{ см}^{-1}$ of a $^3\Sigma-^3\Sigma$ system of the BF molecule. «Chem. Phys. Letters», 1968, 2, № 8, 533—535 (англ.)

Выполнен вращательный анализ полосы $14\,900\text{ см}^{-1}$ в спектре BF. Спектр возбужден разрядом МКВ-генератора (2450 МГц) через струю трехфтористого бора и зарегистрирован на спектрографе с дисперсией $0,2\text{ Å/мм}$. Полоса состоит из трех P - и трех R -ветвей с триплетным разделением линий около $0,15\text{ см}^{-1}$ (для $19 \leq N \leq 48$). Ветви-сателлиты не наблюдаются. Полученные эксперим. данные подтверждают теоретич. выводы, что полоса $14\,900\text{ см}^{-1}$ относится к системе $e^3\Sigma-b^3\Sigma$ ($v=0$), а не к системе $J^1\Sigma-H^1\Sigma$ как предполагалось ранее.

В. И. Байков

ф. 1969. 88

W_2 , CO, BF, BeO, LiF (cur. noq.) 1968.

Bader: R.F.W., Bandzauk A.D. V6227

J. Chem. Phys., 1968, 49(4), 1666-75

Relaxation of the molecular
charge distribution and the
vibrational force constant.

10

12

CA, 1968, 63, 524, 99576b

BF

Bp-5934-XV

1968

Libeler V. H.; et al.

(20)

Inorgan. Chem.

wz BF_3 4 B_2F_4

1968, 7, 1742-46.



(em. B_2F_4 ; III)

1988

BF

19 Б1011. Некоторые успехи в области фторированных неорганических радикалов. Emeleus H. J. Einige Fortschritte auf dem Gebiete fluorierter anorganischer Radikale. «Allgem. und prakt. Chem.», 1968, 19, № 1-2, 1—4 (нем.)

Обзор химии радикалов BF , SiF_2 , $\text{N}(\text{CF}_3)_2$, CF_3 , NF_2 , OF и SO_3F с указанием возможностей синтеза новых типов соединений при помощи этих радикалов. Библиография 10.
Г. Назин

2 : 1968. 19



BF

JW. Hastie

1968

J. L. Margrave

ORIGINALLY 1604

J. D.

Dep. of Chem., Rice
University Houston,
Texas 77001.

p1-50.

1968

BF

10 Д185. Магнитные свойства молекул BF и BH.
Hegstrom R. A., Lipscomb W. N. Magnetic properties of the BF and BH molecules. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 2, 809—811 (англ.)

Иссл. расч.

В связанном приближении теории возмущений Хартри—Фока произведен расчет магн. характеристик молекулы $B^{11}F^{19}$. В качестве невозмущенной волн. ф-ции использовалась ф-ция, основанная на базисе из 16 σ - и 8 π -орбиталей. Расчеты производились при двух различных выборах начала отсчета векторного потенциала — у ядра F и у ядра B. Соответственно найдены следующие пары теоретич. значений магн. характеристик молекулы: средняя восприимчивость, в единицах 10^{-6} абс. эл.-магн. ед., —14,21 и —14,32; молекулярный g-фактор: —0,212 и —0,209 (отрицат. знак здесь означает, что электронный вклад во вращательный магн.

оп. 1968. 109

□

момент преобладает; магн. момент направлен противоположно магн. моменту вращающегося ядерного остову); постоянная магн. экранирования ядра F 243,42 и 257,51; постоянная ядерной спин-вращательной связи F 88,43 и 82,95; постоянная ядерного магн. экранирования B 82,11 и 83,64; постоянная ядерной спин-вращательной связи B 15,85 и 15,65. Достаточно хорошее согласование результатов расчета при различном выборе начала отсчета векторного потенциала свидетельствует об удовлетворительной точности расчета. Приводятся также данные о теоретич. значениях магн. анизотропии и анизотропии постоянной ядерного магн. экранирования для молекул BF и BH. Подчеркивается, что последняя молекула имеет замкнутую оболочку, но обладает парамагн. восприимчивостью.

Т. К. Ребане

⊕ BF (2)

Hildenbrand 1968

J. Chem. Phys., 1968, 48, 3667.

BF

Симмонс А-1055

Коваченко Т. В.

1968

Узб. БЗЗ, физика, 11(5), 130

Identification method for
interpreting vibrational
structures of diatomic
molecules.



(см. Нак) III

1968

BF

50565d Potential energy curves and nature of binding in Group IIIA monohalides. Thakur, S. N.; Singh, Ran B.; Rai, D. K. (Banaras Hindu Univ., Varanasi, India). *J. Sci. Ind. Res.* 1968, 27(9), 339-47 (Eng). Potential energy curves were computed from exptl. observed vibrational and rotational levels for different electronic states of MX ($M = B, Al, Ga, In, Tl$; $X = F, Cl, Br$, the latter for B and Al only). Comparison with the empirical ionic curves suggested by Hellman indicate that the 1st excited states of the lighter mols. have more ionic character than those of the heavier mols. The reverse is true of the ground states. These compds. are considerably ionic. The difference between actual dissocn. energy and that calcd. from Birge-Sponer extrapolation is a result of the contribution of ionic character to the binding in the ground state. Variation in this contribution with increasing at. wt. of M is discussed. Empirical and theo-

p - your
 notices.
 Help me

54
 120
 A-120

C.A. 1969

70. 12

+3

7

retical approaches to evaluation of percent ionic character are reviewed and discussed. Values for ionic character obtained from the quadrupole coupling const. by A. H. Barrett and M. Mandel (1958) are considerably higher than those obtained by other methods. Differences between ionic character of chlorides and bromides are small. None of the theoretical methods is completely unambiguous. A semiempirical quantum mech. method is suggested. FBIN

Галочинские В 6360 1968
бора (см. пост.)

Wolfe D. F.

Dissert. Abstr., B, 1968, 28 (12),
4972.

СА, 1968, 69, и 20, 80359 m

Ю.

BF

Smeyers I. G.

1969

Bp-6847-X

cur.n.

an. fis. Real soc. esp.

fis. y quim., 1969,

65, ~ 9-10, 249.● (Cur. H₂) III

BF
(с. на об.)

с. на об.

Anderson A. B.,
Parr R. G.

1970

J. Chem. Phys., 1970,
53, ~ 8, 3375.



(с. Белл) IV

BF	$\ell_e \cdot 10^5$	$-\ell_e \times 10^{13}$	$m_e \cdot 10^{21}$	$\ell_e \cdot m_e / \ell_e^2$
	5,69(8,07)	41,0(51,6)	262(232)	0,89(0,70)

BF

2;

у

8 Д396. Электронный спектр молекулы BF. Ca-
von R. B., Douglas A. E. Electronic spectrum of the
BF molecule. «Can. J. Phys.», 1970, 48, № 4, 432—452
(англ.)

Получены электронные спектры поглощения и испус-
кания (900—11 000 Å) молекул BF. Получены новые по-
лосы и составлена схема электронных уровней молекулы
BF. Определен потенциал ионизации молекулы
(89 650 см⁻¹). Получены значения колебательных и вра-
щательных констант для всех известных электронных
состояний. Проведено сравнение с константами изоэлек-
тронных молекул N₂, CO. Все, кроме двух возбужден-
ных состояний, классифицированы как ридберговы со-
стояния и сгруппированы в ридберговы серии. Обсуж-
дено взаимодействие между различными ридберговыми
состояниями. Библ. 32.

Резюме

Ф. 1970. 8 А

BF

1970
847

~~84461y~~ Electronic spectrum of the boron fluoride molecule. Caton, Robert B.; Douglas, A. E. (Div. Pure Phys., Nat. Res. Council Canada, Ottawa, Can.). *Can. J. Phys.* 1970, 48(4), 432-52 (Eng). The electronic absorption and emission spectrum of BF has been photographed at high resolu. from 900 to 11,000 Å. Many new electronic states have been found and corrections have been made to earlier work. The ionization potential lies between 89,635 and 89,680 cm^{-1} , with the most probable value 89,650 cm^{-1} . Tables of the vibrational and rotational consts. of all the known states of BF are presented. All but 2 of the excited states of BF have been classified as Rydberg states and have been assigned to Rydberg series. The interactions between the various Rydberg states are discussed. RCCN

y
M. H.

melton.
clemens

C. A. 1970. 72. 16

BF

J
Do

Ganguli P.S. & gp. 1970

J. Chem. Phys., 53 (2), 782

(Cor. BM) III

BF

approved by B. H.
23 September 1970
my letter from
Porter N. D. et al.

(40) Final Technical Report
AD-715564, 31 Apr. 1970
Thermodynamic properties of
propellant combustion
products.

Set 2, (2)

Group IIIA monofluorides.

BF
исправление.

Sutton P., et al. 1970

Int. J. Quant.
Chem., 1970, 4, ~6,
633.

к статье: "Методы
расчета молекулы с..."

(Ces Li₂)₁₄

BF

кв. см.
расчет

1970

Sutton P. et al.

Int. J. Quant. Chem.,
1970, Sympos., N 3,
Part 2, 479.

($\text{Cu} \cdot \text{Li}_2$) III

BF

2 Д138. Кривые потенциальной энергии и энергии диссоциации двухатомных галогенидов бора и алюминия. Singh Jagadish, Nair K. P. R., Rai D. K. Potential energy curves and dissociation energies of diatomic boron and aluminium halides. «J. Mol. Struct.», 1970, 6, № 4, 328—331 (англ.)

Предложенное в работе (РЖФиз, 1969, 5Д89) эмпирич. выражение для потенц. энергии двухатомной молекулы, учитывающее известные электроотрицательности обоих атомов, использовано для вычисления потенц. ф-ций молекул BF , BCl , BBr , AlF и AlBr , находящихся в основном состоянии ($X^1\Sigma^+$). Исходя из полученных потенциалов найдены энергии диссоциации молекул, которые оказались заметно ниже известных спектроскопич. значений, откуда следует, что в использованном выражении нон-ный характер связи учитывается недостаточно полно.

Г. А. Вомпе

(H)



{ Си. также }
{ $\text{AlF}(\text{III})$ }

X

09. 1971. 28

1970

BF

No

power

(113144a) Potential energy curves and dissociation energies of diatomic boron and aluminum halides. Singh, Jagadish; Nair, K. P. R.; Rai, D. K. (Dep. Spectrosc., Banaras Hindu Univ., Varanasi, India). *J. Mol. Struct.* 1970, 6(4), 328-32 (Eng). The potential energy curves for the ground state, and the disocn. energies for BF, BCl, BBr, AlF, and AlBr were calcd. from the empirical potential function of S. Szöke and E. Baitz (1968). The values of the disocn. energies (4.3, 4.1, 4.1, 2.5, and 2.4 eV, resp.) estd. by this method were in general much too low.

BHIN

F4



C.P. 1970.73.22

ВН
(сн на об)

молк
корактн

р-сн
потенс
тернем

Учаноу Н.

1970

З. Naturforsch, 1970,

25a, ~ 12, 1932



(Сс. НЗ) III

$$V(r) = De [1 - \exp \{-\alpha(r - r_e)\}]^2 +$$

$$+ \beta (1 - \delta_{H, X}) (r - r_e)^2 \exp \{-\gamma(r - r_e)\},$$

α, β - константы

$$\gamma = \left[\frac{3,121}{r_e} + r \left(1 + \frac{\alpha e \omega_e}{6 B_e^2} \right) - \alpha^3 De \right] / \beta$$

α	β	γ	% ошибка в αe	% ошибка в ω_e
1,7583	0,0000	0,0000	-28,7	-34,1

BH

cu. no. 05.

y

Boyd R.F.,
Whitehead M.A.

1971

J. Chem. Soc.,

1971, A, ~ 22, 3849.

(Cu. BH) IV

Сравнение орбит. средних и внешних
потенциалов кометы (Э. V)

Система параметров.

И-ла	Орбит.	I	II	III	IV	Масса
BF	σ	12.41		12.78		11.0
	π	15.84		16.29		
	ρ	16.56		17.48		
	δ	39.43		38.35		

B $\bar{F}$	Caralp L., Cavalier Y. 1941 Bq - 6839 - $\bar{X}$
cul.n.	C. y. Acad. Sci., 1941, <u>C 243</u> , ~ 14, 801. ● (C. u. H ₂) $\bar{III}$

BF

Frank J. Lovas, 1971.
Donald R. Johnson.

1677
immuc

cup

"J. Chem. Phys."
1971,

Nat. Bur. Stand. D.C. 20234

Gaydon A.G.,

Paδ

Dissociation Energies and
Spectra of Diatomic Molec-
ules, London, 1974 (3d Edn)

20

BF(241) - Do

(K-19)

BF

summer ck 2973

1971

(y)

(7940j) First ionization potentials of the molecules boron monofluoride, silicon monoxide, and germanium oxide. Hildenbrand, D. L. (McDonnell Douglas Corp., Huntington Beach,

Calif.). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* 1971, 7(3), 255-60 (Eng). Electron-impact mass spectrometry was employed to measure the vertical ionization potentials of the mols. BF (11.06 eV), SiO (11.58 eV), and GeO (11.10 eV) with an estd. accuracy of 0.10 eV. Where possible, the results are compared with corresponding values obtained from mol. Rydberg series and from theoretical calcs.

(+2) 270
GeO

C. A. 1972. 46 L

14

BF

Оттиски 2973

1971

7 Б161. Первые потенциалы ионизации молекул BF, SiO, GeO. Hildenbrand D. L. First ionization potentials of the molecules BF, SiO and GeO. «Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.», 1971, 7, № 3, 255—260 (англ.)

Масс-спектрометрич. методом при ионизации электронным пучком получены кривые эффективности ионизации и измерены вертикальные потенциалы ионизации (ПИ) газ. двухатомных молекул BF (I), SiO (II), GeO (III). Поток нейтр. частиц создавался нагреванием смесей элементарного бора и CaF_2 (1600°K , I), кремния, германия и SiO_2 (1400°K , II), смеси Si— GeO_2 (1200°K , III). В кач-ве внутреннего стандарта использовался Хе, точность измерения $\pm 0,10$ эв. Величины ПИ I, II, III получены равными 11,06; 11,58; 11,10 эв, соотв.. Полученные данные сравниваются с измерениями при фотоионизации, спектроскопич. значениями, теор. вычислениями.

М. Туркина

X. 1972. 7

(12)



BF

1974

11 Д123. Исследование влияния протонирования на электронную структуру двухатомных молекул BF, CO и N₂. Jansen H. B., Ros P. A study of the effect of protonation on the electronic structure of the diatomic molecules BF, CO and N₂. «Theor. chim. acta», 1971, 21, № 2, 199—204 (англ.)

стр-ра

С помощью неэмпирич. метода ССП МО ЛКАО в ограниченном гауссовом базисе исследуется влияние протонирования на электронную структуру молекул BF, CO и N₂. В качестве протонированных форм рассмотрены наиболее стабильные линейные системы [H—A—B]⁺ с протоном, присоединенным к атому А с меньшим зна-

● (см. также CO) III

Ф. 1974. 112

X

чением орбитальной экспоненты. Энергия протонирования, определяемая как разность полных энергий двух-атомной молекулы и ее протонированной формы, составила для указанных молекул, соответственно, 185, 153 и 134 ккал/моль. В той же последовательности при протонировании уменьшаются изменения межатомного расстояния R_{A-B} ($-0,052$; $-0,026$ и $+0,002$ Å) и силовой постоянной k_{A-B} . Расчет электронной заселенности по Малликену показывает, что прочность σ -связи A—B при протонировании возрастает во всех рассмотренных молекулах примерно на одну и ту же величину. π -Связь укрепляется в молекулах BF, CO и, наоборот, ослабляется в N₂. Совместное действие σ - и π -эффектов в первых двух молекулах приводит к значительному изменению межатомных расстояний и силовых постоянных. В молекуле N₂ эти эффекты действуют в противоположных направлениях и влияние протонирования мало.

А. Г. Туровец

BF

1971

1674

12 Д417. Микроволновый спектр монофторида бора.
 Lovas Frank J., Johnson Donald R. Microwave
 spectrum of BF. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 1, 41—
 44 (англ.)

ш.п.

и

Наблюдены прямые вращательные переходы молекул $^{10}\text{B}^{19}\text{F}$ и $^{11}\text{B}^{19}\text{F}(\text{II})$ в основном колебательном состоянии. Из измерений перехода $I=1 \leftarrow 0$ получены значения постоянных ядерного квадрупольного взаимодействия, равные $eq_0Q(^{10}\text{B}) = -9,5 \pm 0,8$ и $eq_0Q(^{11}\text{B}) = -4,5 \pm 0,4$ Мгц. Для II найдена вращательная постоянная $B_e = 45\,481$ Мгц, межмолекулярное расстояние $r_e = 1,2625$ Å и электрический дипольный момент $\mu_0 = 0,5 \pm 0,2$ ед. Дебая.

Г. П.

З. 1971. 120

1971

BF

м. в.
спектр

24 Б318. Микроволновый спектр BF. Lóv a s
Frank J., Johnson Donald R. Microwave spectrum
of BF. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 1, 41—44 (англ.)

Исследован МВ-спектр молекулы BF, полученной в им-
пульсном разряде в потоке BF₃. Идентифицирована ква-
друпольная СТС линии перехода $J=0 \rightarrow 1$ молекул B¹⁰F¹⁹
и B¹¹F¹⁹ в основном колебательном состоянии. Определе-
ны значения вращательной постоянной B и постоянной
квадрупольного взаимодействия eqQ : $B_0(B^{10}F) =$
 $= 48022,63 \pm 0,08$; $eq_0Q(B^{10}) = -9,5 \pm 0,8$; $B_0(B^{11}F) =$
 $= 45185,77 \pm 0,06$; $eq_0Q(B^{10}) = -4,5 \pm 0,4$ Мгц. М. Р. Алнев

X. 1971. 24

BF

1971

и.в.снел;
ссыл.
пораи.

(56271e) Microwave spectrum of boron fluoride (BF). Lovas, Frank J.; Johnson, Donald R. (Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 1971, 55(1), 41-4 (Eng). Direct rotational transitions were obsd. in the ground vibrational state of $^{10}\text{B}^{19}\text{F}$ and $^{11}\text{B}^{19}\text{F}$ produced in the gas phase by a discharge in flowing BF_3 . Measurements on the $J = 1 \leftarrow 0$ transitions yield $B_0(^{10}\text{BF}) = 48,022.63 \pm 0.08$ MHz, $eq_0Q(^{10}\text{B}) = -9.5 \pm 0.8$ MHz, $B_0(^{11}\text{BF}) = 45,185.77 \pm 0.06$ MHz, and $eq_0Q(^{11}\text{B}) = -4.5 \pm 0.4$ MHz. New mol. parameters are derived for ^{11}BF , including $B_e = 45,481$ MHz and $r_e = 1.2625$ Å. The elec. dipole moment of BF is 0.5 ± 0.2 D.

CA. 1971. 45. 8

1971

Results

Mulliken R S

BH

Int. J. Quant. Chem, 1971, 45, 83-94

(61)

(un)

The lowest excited states of BH

Prody, 1972, 50112

Сумер С,

Метеофизика восточных
Температура, 1971, 9, 657

Рад-5а
f

BF-Т.Х. Do
(29)

1972

BF

М.П.

ОТЧЕТ ПО НАУЧНО-ИССЛ. РАБОТЕ
ИВТАН СССР, 1972 г.

Стремление мол. кост. и тор-
модинамических свойств веществ.

BF

1972

Berkowitz J.,
Dehmer J. L.

кв. эк.
пачет

J. Chem. Phys., 1972,
57(8), 3194-201

ср. In Cl; III

1972

BF

3 Д131. Об использовании небольших атомных базисных наборов при неэмпирических расчетах молекул. Jansen H. B., Ros P. On the use of small atomic basis sets in non-empirical molecular calculations. «Theor. chim. acta», 1972, 27, № 2, 95—107 (англ.; рез. нем.)

метод
расчета

На примере нескольких базисов из орбиталей слэте-ровского типа и гауссовых ф-ций (в том числе и сгруппированных) показано, что качество оптимизированных атомных базисов для атомов одного и того же периода зависит не только от числа базисных ф-ций, но и от числа валентных электронов. В случае небольших базисов для атомов конца периода необходимо использовать больше базисных ф-ций, чем для атомов начала того же периода, т. к. иначе базис будет несбалансированным, что обычно приводит к деформированным зарядовым распределениям в молекулах. В качестве

ф. 1973. № 3.

критерия сбалансированности базиса предлагается использовать разность точных хартри-фоковских и рассчитанных с данным базисом орбитальных энергий атомов. В качестве примера проведена серия расчетов молекулы BF. Отмечено, что при расчетах молекул не-точности, возникающие из-за использования низших конфигураций атомов вместо усредненных, приводят к меньшим ошибкам, чем использование несбалансированного базисного набора.

В. Л. Лебедев

1972

BF

9 Б150. О колебательной энергии основного состояния моногалогенидов элементов группы III—A. Kus-hawaha V. S., Asthaba B. P., Pathak C. M. On the fundamental vibrational energy of group III-A mono-halides. «Spectrosc. Lett.», 1972, 5, № 10, 357—360 (англ.)

(2e)
(we)

Предложено модифицированное эмпирич. соотношение $\omega_e = 5924,14 / \sqrt{r_e^3 \cdot \mu}$, связывающее колебательную энергию ω_e (см⁻¹) с межатомным расстоянием r_e (А) двухатомных осцилляторов; BF, расчетное $\omega_e = 1582,51$ см⁻¹ (эксперим. 1402,13); BCl 911,53 (839,12); BBr 735,17 (684,31); AlF 833,19 (810,52); AlCl 485,48 (481,30); AlBr 379,94 (378,0); CaF 637,55 (623,00); CaCl 374,82 (365,0); InF 524,34 (534,70); InCl 303,88 (317,4); InBr 208,65 (210,0); InI 157,71 (177,1); TlF 472,23 (477,3); TlCl 276,71 (287,47); TlI 137,69 (150,0). Новая ф-ла является уточненным аналогом ф-лы Тантиллы $\omega_e = 6260,4 / \sqrt{r_e^3 \cdot \mu}$ (μ — приведенная масса).

Б. В. Рассадин

(15)

X. 1973. № 9

1972.

3 Д220. Относительно энергии основного колебательного состояния моногалогенидов элементов III—A-группы. Kushawaha V S., Asthana B. P., Pathak C. M. On the fundamental vibrational energy of group III—A mono-halides. «Spectrosc. Lett.», 1972, 5, № 10, 357—360 (англ.)

По эксперим. данным для частоты колебания ω_e и межъядерного расстояния r_e 15 моногалогенидов элементов III—A группы установлено следующее эмпирич. соотношение между ω_e и r_e : $\omega_e = 5924,14 / (r_e^3 \mu)^{1/2}$, где μ — приведенная масса молекулы. М. Р. Алиев

min.

ф. 1973. № 3

115

40305.8909
TE, Ch, Ph

BF (ser.n)

1972

X 4-3920

8051/1
K p.N 40305.8904K

Lipscomb W.N.

Molecular properties.

"Theor. Chem." London e.a., 1972,
167-196

(англ.)

(см. LiH; III)

0058 МБК

038 042

ВИНИТИ

BF

Politzer P., u gp.

1972

paarem
(E)

"Chem. Phys. Lett.", 1972,
15, №2, 226-31.

(coll: Na, III).

BP

1973

(C.N.)

Anderson, Alfred E.

J. Chem. Phys.

1973, 58(1), 381-3.

● (coll. LiH; 10)

1973

BF

Bicentric rescaling of CNDO
2 [complete neglect of differential
overlap] theory. Applications to
inorganic fluorides.

kb. mex.

p. aerum.

Companion A.L.

J. Phys. Chem. 1973, 77(26), 3085
(Eng)

C.A. 1974. 80. N6.

(all FO; III)

BF

Halgreen ^{T.A.} ~~W.T.G.~~
Lipscomb W.N.,

1973

эксп
сдвоен

"J. Chem. Phys."

1973, 58, N4, 1569-1571

(Littell)

30806.4674

BF

Ph, Ch, T¹E

76189

x 4-1363

Lebreton Joseph. Transition triplet-singulet dans les halogénures de bore : cas de BBr. "J. chim. phys. et phys.-chim. biol.", 1973, 70, N 5, 738-745 (франц., рез.англ.)

0931 ИК

901 907 09 24

ВИНИТИ

BF

Moeller, Michael B;
Silvers, Stuart Y.

1973

Chem. Phys. Lett.

Cherip. 1973, 19/1, 78-81.

preprints.

& paper

(inner!)

(on PV) III

MH; MD; MX; HX; DX; TX;

M = Li, Na, K, Rb, Cs; Al,

(BF) Ga, In, Tl;

X = F, Cl, Br, I;

Miller C.E., Finney A.A., Inman F.W.,
Atom Data, 1973, 5, N1, 1-49 (amu.)

Rotational and hyperfine structure
constants for Groups IA and
IIA monohalide and monohy-
ride molecules.

(M. N.,

таблицы)

~~таблицы~~

1973

A-2091

~~1973~~

10

(D)

~~from summary~~

CA, 1973, 78, N22, 141873j

март 2936

1973

BF

G. Nagy - Szabo.

Чѐ, сис. носі. Int. J. Quant Chem,
потенц. крив. 1973, 7, 569-81
расчет.

BF

1973

вонов.
ср-гун

Niessen W.

"Theor. chim. acta"

1973, 29, NI, 29-48, .

● (сн LiH ; III)

BF

1973

Sinanoglu Oktay, Faruk H. Oндор.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1975, 95, №7, 5435-5442.

жерине
связи

(см. ВН; III)

BF

BGP-I-X

1974.

Anderson A.E., Hoffman R., ^{NIR}
J. Chem. Phys., 1974, 60, 3271-3

помени. Кривые

(см. LiF; III)

1974

BF

BH₂F

BF₂H, BF₃

BF₂NH₂, BF₂

B₄F₄

Kb. Mex.
papers

C.A. 1974. 81N24

158754f Localized orbitals in boron fluorides. Highly polarized boron-fluorine double and triple bonds. Hall, John H., Jr.; Halgren, Thomas A.; Kleier, Daniel A.; Lipscomb, William N. (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *Inorg. Chem.* 1974, 13(10), 2520-1 (Eng). A localized mol. orbital (LMO) description is presented for the valence structures for the boron fluorides BF, BH₂F, BF₂H, BF₃, BF₂NH₂, B₄F₄, and B₂F₄. The highly polar equiv. BF triple bonds in B₄F₄ and BF double bonds in BH₂F, BF₂H, BF₃, BF₂NF₂, and B₂F₄ are described. The equiv. double and triple bonds obtained for these polyat. mols. differ in important ways from the conventional description of a single B-F bond having some back-donation to the π system. First, all components of a multiple bond in a given BF interaction are equiv. Second, all components are highly polar, having an excess of electrons on F and leaving atoms neutral within about 0.1-0.2 electron of charge. Finally, these multiple bonds are unexpected in the sense that they have not been described previously for BF bonds in polyat. mols. from conventional valence-bond theory.

(72) 11

Оттм ен 2593

1974

BF

(2 Д131.) Определение равновесных геометрий и силовых постоянных по методу типа ППДП. Caralp Louis, Cavalier Jean-Claude. Détermination des géométries d'équilibre et des constantes de forces par une méthode de type CNDO. «J. Mol. Struct.», 1974, 23, № 1, 153—160 (англ.)

На примере молекулы BF показано, что при расчетах по обычному методу ППДП/2 улучшение рассчитанного значения силовой постоянной k сопровождается ухудшением рассчитанного значения равновесного межъядерного расстояния r_e . Предложен улучшенный вариант метода ППДП с потенц. ф-цией

$$V_{AB} = Z_B (1 - \alpha) \gamma_{AB} + \alpha (R_{AB}^2 + (1/\mu_A^2))^{1/2}, \mu_A = Z_A/n_A$$

и с интегралом $\gamma_{AB} = [R_{AB}^2 + L / (\gamma_{AA} + \gamma_{BB})^2]^{-1/2}$. Вариация параметров α и L позволила получить значения k и r_e , достаточно близкие к опытным, для 11-ти 2-атомных молекул и для связей C—H, C—C, C=C в 8-ми углеводородах. С помощью представления V_{AB} и

равнов.
дист.
сил. пост.

17. 1975. N2

[X] (+1) Еснвч

См. Таблицы H2; III)

γ_{AB} в виде полиномов найдено, что значения k очень чувствительны к значениям первых и вторых производных от V_{AB} и γ_{AB} по R_{AB} . Поэтому параметры α и L оказываются различными для различных 2-атомных молекул и для различных связей М. А. Ковнер

2 Д132. ~~Новое соотношение, не содержащее электроотрицательности, для силовой постоянной двухатомных~~

~~молекул. S. Gupta S. S. L., Mehta P. C. A new relation free from electronegativity for vibrational constant of diatomic molecules. «Spectrosc. Lett.», 1974, 7, № 4—5, 189—192 (англ.)~~

~~Предложено соотношение, связывающее частоту колебаний ω_e двухатомной молекулы с ее приведенной массой μ и равновесным расстоянием r_e : $\omega_e = A \sqrt{\mu r_e^3}$, где A — постоянная. Проверка соотношения выполнена на примере 20 галогенидов IIIb группы. Средняя ошибка расчета составляет 1,6%, тогда как расчет по ф-лам, предложенным другими авторами, приводит к ошибке не менее 5%.~~ Н. Ф. Степанов

BF

1974

природа
хим.
связи

7 Б42. Локализованные орбитали во фторидах бора. Высокополярные двойные и тройные связи бор-фтор. Hall John H., Jr, Halgren Thomas A., Kleier Daniel A., Lipscomb William N. Localized orbitals in boron fluorides. Highly polarized boron-fluorine double and triple bonds. «Inorg. Chem.», 1974, 13, № 10, 2520—2521 (англ.)

Для ряда фторидов бора (BF , BH_2F , BF_2H , BF_3 , BF_2NH_2 , B_4F_4 , B_2F_4) проведено рассмотрение природы хим. связи в рамках теории локализованных молек. орбиталей (ЛМО). Канонич. МО получены в приближении частичного учета двухатомного дифференциального перекрывания, а для локализации МО использована процедура Бойса. Для полученных двухцентровых ЛМО (имеющих высокую степень локализации) представлены электронные заселенности на соотв-щих атомах.

x. 1975. N 7

(44)



Результаты указывают на существование тройных (в BF и B_4F_4) и двойных (в остальных исследованных молекулах) связей $\text{B}-\text{F}$. Эти связи, образованные с участием электронных пар атома F , высокополярны (с преобладанием электронов на F), результирующие заряды на атомах лежат в пределах $0,1-0,2\text{e}$. Характерным является то, что все (три или две) компоненты связей эквивалентны (π -связи), в то время как ЛМО для BN_2F , полученные с использованием процедуры Эдмистона—Рюденберга, разделяют двойную связь $\text{B}-\text{F}$ в этой молекуле на σ - и π -компоненты. Связь $\text{B}-\text{N}$ в BF_2NH_2 имеет те же качеств. особенности. Обсуждаются различия σ - π - и π -описаний связи (хотя обе процедуры указывают на участие в связи неподеленных пар F).

М. Гофман

BF

CO

N₂

Ni(CO)₄

Ni(N₂)₄

кв. сист.
расчет

X 1976 N 6

6 Б37. Неэмпирические расчеты модельных систем, содержащих молекулярный азот или окись углерода. Jansen H. B. Non-empirical calculations on model systems containing molecular nitrogen or carbon monoxide. «Chem. and Biochem. Reactiv. Proc. Int. Symp., Jerusalem, 1973». Jerusalem, 1974, 199—205. Discuss., 206 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе сгруппированных гауссовских функций, по точности эквивалентном миним. слейтеровскому, исследовано электронное строение BF (I), CO (II), N₂ (III), их монопротонированных форм, Ni(CO)₄ (IV) и Ni(N₂)₄ (V). Энергии протонирования найдены равными 0,295 ат. ед., 0,243 (опыт 0,21) и 0,213 (0,09—0,18) для I—III соотв., при этом протонированные формы линейны, протон присоединяется к атомам В и С соотв., длины связей В—F и С—О уменьшаются на 0,052 и 0,026 А, связи N—N — увеличиваются на 0,002 ат. ед., а силовые постоянные вал. кол. для этих связей увеличиваются на 2,8; 2,2 и 0,6 мдин/А соотв. При этом смещение σ-электронной плотности к протону почти одинаково для I—III (для I оно несколько больше), а в случае π-системы различия больше. Отмечено, что протон стабилизирует σ-орбитали неподеленных пар

1974

⊗

14

и одновременно уменьшает их разрыхляющее воздействие на 2-атомную молекулу. Этот эффект лишь незначительно зависит от атомного номера протонированного атома. Смещение π -электронной плотности стабилизирует II, т. к. π -МО становятся более симметричными и дестабилизирует II, т. к. π -МО становятся асимметричными. Анализ распределений электронной плотности IV и V обнаружил сходство строения этих систем. Энергии стабилизации IV и V (по отношению к распаду на металл и лиганды) оценены в 0,363 и 0,254 ат. ед. соотв., а их разность (17 ккал/моль) согласуется с эксперим. данными для аналогичных октаэдрич. комплексов рутения (18 ккал/моль). Отриц. заряд на атоме N несколько возрастает при переходе от IV к V (от $-0,317$ до $-0,492$). Связь в IV и V характеризуется донорно-акцепторным (перенос σ -электронной плотности с орбиталей неподеленных пар лигандов на вакантные $4s$ - и $4p$ -АО металла) и дативным (с $3d$ -АО металла на π^* -МО лиганда) взаимодействиями; при этом первое взаимодействие стабилизирует, а второе — дестабилизирует связь в лиганде (для III дестабилизация больше, чем для II).

В. Л. Лебедев

BF

1974.

Levas F.J., et al.

J. Phys. and Chem. Ref. Data,
1974, 3, 609-769.

(cur. BaO; III)

1974

BF

Peel J. B.

"Austral J. Chem" 1974,
17, N5, 923-931 (anal.)

parent
(all-n)

(all Co; III)

2.1975 N1

ВФ

1974

Roby Keith R.

"Mol. Phys", 1974,

27 (1), 81-104

опред зреще
на атом
в микроскоп

(Au Li₂; III)



Зак. 247

51216.6671

96601 BF

1975

Ch, Ph, TC, MGU

армоз. ментр *4-10887

Chong D.P., Herring F.G., McWilliams D.
Calculation of the vibrational structure
in molecular photoelectron spectra. "J.
Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.",
1975, 7, N 6, 429-443

(англ.) 0524 физ

487 491

516

ВИНИТИ

B-F

OMM. 4824

1975

Kerr J. A., et al.

(Do)

Handbook Chem. Phys.,
55th Ed., 1974-75

BF

* 18-10900

1975

5 Д441. Система Камерона монофторида бора, BF. Lebreton J., Ferran J., Marsigny L. The Cameron system of boron monofluoride, BF. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1975, 8, № 17, L465—L466 (англ.)

Выполнен анализ вращательной структуры системы полос Камерона, наблюдаемой в слаботоочном разряде типа Шулера в гелии, содержащем следы BF_3 . Использовался естественный BF_3 с 81,2%-ным содержанием изотопа ^{11}B . Произведено сопоставление спектров изотопных молекул ^{11}BF и ^{10}BF . В обоих случаях наблюдалась только одна полоса $a^3\Pi(0) - X^1\Sigma^+(0)$, имеющая красное отклонение и образованная тремя головами Q_3 , R_2 и Q_2 . В результате анализа около 50 линий в спектрах каждого из изотопов определены значения постоянных T_e и ν_{00} : $\nu_{00}(^{11}\text{BF}) = 29\,105,8 \pm 0,2 \text{ см}^{-1}$; $T_e(^{11}\text{BF}) = 29\,144,3 \pm 0,3 \text{ см}^{-1}$; $\nu_{00}(^{10}\text{BF}) = 29\,104,3 \pm 0,3 \text{ см}^{-1}$; $T_e(^{10}\text{BF}) = 29\,144,0 \pm 0,4 \text{ см}^{-1}$. Библ. 6. И. Дворников

м.п.

ф. 1976, № 5

BF

*43-10900

1975

$$T_e(a^3\Pi) = 29,144.3$$

84: 51753q Cameron system of boron monofluoride, BF.
 Lebreton, J.; Ferran, J.; Marsigny, L. (Lab. Chim. Gen., Fac.
 Sci., Tours, Fr.). *J. Phys. B* 1975, 8(17), L465-L466 (Eng).
 The Cameron system of BF was obsd. in a Schueler discharge in
 He contg. traces of BF₃. The unique $a^3\Pi(0) \rightarrow X^1\Sigma^+(0)$ band is
 red-degraded and formed by 3 Q₃, R₂, and Q₂ heads. The
 rotational anal. was performed for both ¹¹BF and ¹⁰BF mols.
 (values in cm⁻¹): $\nu_{00}(^{11}\text{BF}) = 29,105.8 \pm 0.2$, $\nu_{00}(^{10}\text{BF}) = 29,104.3$
 ± 0.3 , $T_e(^{11}\text{BF}) = 29,144.3 \pm 0.3$, $T_e(^{10}\text{BF}) = 29,144.0 \pm 0.4$.

C.A. 1976 84 N8

BF

1975

в. мех.
расчет.

Zerner M.,
J. Chem. Phys.,
1975, 62, 17, 2788-2799.



(C_6H_2 , III)

1976

BF

Боненко К.В. и др.

рук. ген. и РИХИТЕЛ
№ 3627 - 76 ДЕТ.

(расчет
эл. цеп.
врем. ф. изм.)

Ген. Б.Ф.) III

BF

1976

86: 62833h The evaluation of the electronic transition moment for a band system of diatomic molecules. Gowda, L. Siddarama (Dep. Post-Grad. Stud. Res. Phys., Univ. Mysore, Mysore, India). Curr. Sci. 1976, 45(24), 860-1 (Eng). A method is presented for evaluating vibrational transition probabilities for a band system of diat. mols. without measuring the band intensities. Calcd. data for the BF (A-X) band system are in fair agreement with the obsd. intensity distribution.

unmeasured

$|R_e|^2$

C.S. 1977 . 86 . NO

BF

1946

Pamuk H. Onder

нарине
испол.
мерия

Chim. acta turc. 1946,
4, n 3, 224-6 (англ.)

ем. ВМ-11

BF

Peel F. et al.

1976

Inorg. Chem. 1976,
15.(5). 1051-4 (eng).

кв. мех.
расчет.

12/14/21

● (ссл. ALF). III

7 Б25. Новый неэмпирический вариант схемы NDDO и расчет электронных структур фторидов бора. Рябов М. А., Клименко Н. М., Чаркин О. П., Зайцев Б. Е., Молодкин А. К. В сб. «Соврем. задачи в точных науках». Вып. 2. М., 1976, 131—138 1976

Предложен новый параметрич. вариант схемы ПДДП (δ -вариант) для расчета электронного строения молекул типа MX_n (где М и X — непереходные элементы 2—4-го периодов). Параметризация элементов основной матрицы для двухатомного фрагмента MX осуществляется с использованием элементов матрицы полной энергии и матрицы плотности из неэмпирич. расчета и элементов суперматрицы I_{abcd} , рассчитанной в схеме ПДДП. При воспроизведении матрицы полной энергии неэмпирич. расчета в схеме ПДДП достигается одинаково точное соответствие как для собственных функций, так и для собственных значений. Переносимость параметров, откалиброванных по двухатомным фрагментам MX_n на многоатомные системы MX_n проиллюстрирована на примере расчета молекул BF и BF_3 . Показано, что расчет в схеме ПДДП- δ воспроизводит значения орбитальных энергий, атомных заселенностей, эффективных зарядов и плотности перекрывания неэмпирич. расчета с точностью $\sim 0,07$ ат. ед. С использованием предложен-

BF
BF₃

Электр.
структур.
М.И.

⊗ (71)

X 1977 N 7

ной схемы рассчитано также электронное строение ионов BF_2^+ , BF_2^- и BF_4^- в базисе лепестковых функций гауссового типа (ГФ). Использованы различные представления базисных орбиталей в виде 10, 8 и 6 наборов лепестковых ГФ, объединенные в три группы каждый. Показано, что для проведения серийных расчетов многоатомных систем оптим. является набор из 8 ГФ с последующим сокращением до 6 ГФ, сочетающий достаточную точность с разумными затратами машинного времени. Для трехатомных фторидов построены потенциальные кривые зависимости полной энергии от валентного угла. Для катиона предсказана линейная, а для аниона угловая (углом $90-100^\circ$) структура. Анализ заселенностей показывает, что плотность перекрывания в анионах BF_2^- и BF_4^- практически одинакова, а в BF всего на 0,05 ат. ед. больше, чем для каждой связи в BF_3 , что опровергает представление о тройной связи в BF . Сопоставление атомных заселенностей в рядах $\text{B}-\text{BF}-\text{BF}_3$ и $\text{B}^--\text{BF}_2^--\text{BF}_4^-$ свидетельствует о $s \rightarrow p$ -промотировании только 0,4 э. Это качественно объясняет изменения энергии связи $\text{B}-\text{F}$ в исследованных фторидах бора. Расчеты подтвердили представление об образовании sp^3 -гибридных орбиталей бора в BF_4^- и обнаружили значит. π -сопряжение в BF_3 , к-рое нарушает sp^2 -гибридизацию.

С. Долги

BF

1976

электрон.
переход
A-X

8 Д187. Оценка электронного момента перехода для систем полос двухатомных молекул. Siddagame Gowda L. The evaluation of the electronic transition moment for a band system of diatomic molecule. «Curr. Sci.» (India), 1976, 45, № 24, 860—861 (англ.)

Указывается, что в ряде случаев для определения вариаций вероятностей $P_{v'v''}$ электронно-колебательных радиационных переходов в двухатомных молекулах можно использовать зависимость электронного момента перехода R_e от величины r -центриды. Так, расчет значений $P_{v'v''}$ для электронного перехода A—X молекулы BF показывает, что с хорошей точностью они определяются произведением фактора Франка—Кондона на величину r -центриды.

Б. Ф. Горднеев

ф. 1977. №8

BM

Bozhenko K.V.

1977

Charkin D.P.

(Кб. сущ.
расеи
То)

"Zh. Strukt. Khim.",
1977, 18(2), 219-84.

C.A. 1977. 87. N4

(сущ. BM) III

6136

ВМ

Богусенко К. В.

1977

"М. структур. химии",
1977, 18, № 2, 235-244,

воени.
ар-хим

(см. Ветр) III

1974

BF

Cowda L., et al

спектр.
спектр

Spectrosc. Lett.,
1974, 10, 1-6.

(see. C_2 ; III)

ВФ

[сумма 9476]
Gunnarsson O. et al 1974

J. Chem. Phys., 1974, 67(9),
3970-9.

с.п.

кб. ссех.

расчет.

(сск. В2) ☒

BF

1977

перечт
извещ
сбдз

Gunnarsson O., et al.

Int. J. Quantum Chem.,

1977, Quantum Chem. Symp.,

NII, 71-74.

(cur. B2(III))

1947

BF₃

Mishra, L.S. et. al.

Indian J. Pure Appl. Phys.

1977, 15(10), 700-4.

coll. -
nocu.

coll. CH₄ - II

В. Ф.

Ryabov M. A.

1977

кв. мех.
расчет
электромагн.
структ.

Zh. Fiz. Khim 1977,

51 (3) 770 (Russ)

(с В. Ф., III)

BF

Summers 10504 | 1977.

Summers N. L.; et al.

(M.N.)

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

kv. mex.
factor



(sum. CF^+ ; iii)

BF Wilson Stephen Silver David M., 1977
Bartlett Rodney J.

"Mol. Phys.", 1977,
35, NH, 1177-1193.

Е, осн.
спектр.
состоян.

amman 5358

(сер. HF) III

16 Б40. Переносимость электронных структур фрагментов; промотирование и взаимное влияние атомов в двух- и трехатомных фторидах по данным расчетов *ab initio*. Боженко К. В., Рябов М. А., Чаркин О. П. «5-й Всес. симпоз. по химии неорган. фторидов», Днепропетровск, 1978». М., 1978, 53

В рамках метода Хартри-Фока-Рутана с использованием двухэкспонентного базиса $7s3p$ для атомов 2-го периода и $10s 6p$ для атомов 3-го периода рассчитаны электронные структуры двух- и трехатомных фторидов, образующих переменновалентные (ПВ) $M-MF-MF_2$ и изовалентно-замещенные (ИЗ) ряды $FMF-FMX$ ($M=Be, Mg, B, Al, C$; $X=Cl, H$). В том же приближении рассчитаны энергии синглет-триплетных ($X'\Sigma \rightarrow a^3\Pi$) и дублет-квартетных ($X^2\Pi \rightarrow ^4\Sigma$) переходов двухатомных фторидов типа $BF, AlF, CF^+, SiF^+, CF, SiF$. С помощью данных анализа заселенностей, локализованных МО и графич. карт распределения электронной плотности $\rho(r)$ рассмотрены закономерности в изменении распределения электронной плотности и св-ва в перечисленных рядах и при возбуждении. Найдено, что электронные структуры фрагментов $M-F$ консервативны и весьма хорошо (в пределах $0,01-0,05 e$) переносятся как в ИЗ- и ПВ-рядах, так и при электронном

BF
AlF
CF+
SiF+
CF-
SiF
расчет
энергии
переходов
2.1978/16

1979
+3

возбуждении указанных типов. Обсуждены границы применимости различных аддитивных подходов при описании энергий атомизации замещ. фторидов и тенденции поведения неаддитивных поправок. Найдено, что общей чертой электронных переходов и ПВ-рядов является то, что в обоих случаях перераспределение электронной плотности практически локализовано в области центрального атома М и определяется промо-тированием последнего типа $s^2p^x-2 \rightarrow sp^x-1$. Демонстрируются преимущества «молек.» модели валентных состояний при описании последовательных энергий разрыва связей и потенциалов ионизации фторидов MF_k по сравнению с «атомной» моделью Ван-Флека-Моф-

фита. Найдено, что изменения заселенностей и карт $\rho(r)$ при замещении малы и имеют противоположные знаки в σ - и π -системах. В ИЗ-рядах типа $BeF_2 - BeFX - BeX_2$ и т. д. заселенности σ -АО атома F увеличиваются, а заселенности π -АО — уменьшаются по сравнению с BeF_2 . Подчеркнута важная роль π -орбиталей в электронном механизме взаимного влияния лигандов.

Авторыферат

BF

Sumner 8327 | 1979

kv. sex,
factor.

E,

Castro E.A.

Int. J. Quant. Chem.,
1979, 15, 355-358.

В.Ф.

1979

Боженико К.В.

кв. мех.
расчет

Авторегулятор диссуп.
на соекаание углов
стеренс КХН.

М., июнь, 1979

BF

common 8301

1979

Epstein J; et al.

cur. no. 1

J. Chem. Phys., 1979,
70 (4), 1796 - 1801

●
(see. A2; 11)

BF

1979

Wilson Stephen, et al.

Chem. Phys. Lett. 1979, 63, no. 2,
367-69.

правильно
составлено.

суд. № - 11

BF

1980

Aufderheide K.M.,
et al.

pacruu Ei,
u.u.

179th ACS Nat. Meet.
Moerston. Tex., 1980. Abstr.
Pap. Washington, D.C.,
S.A., 76

(u.u. LiH; (II))

BF

ommua 10481

1980.

Aufderheide K.H.; et al.

Kb. Mex.
pacer

J. Chem. Phys., 1980, 73
(4), 1789-1804.

BF

Commence 1990

1980

fractur
guineen.
secessina

Costa - Cabral B.J;
et al.

J. Phys. B: Atom
and Mol. Phys., 1980
13, 211-216

BF

CO

N₂

оттиск 9322

1980

7 Д359. Молекулярные ридберговские переходы окиси углерода. Корреляция значений термов и потенциалов ионизации для BF, CO и N₂. Molecular Rydberg transitions in carbon monoxide. Term value/ionization energy correlation of BF, CO and N₂. Fock J.-H., Gürtler P., Koch E. E. «Chem. Phys.», 1980, 47, № 1, 87—93 (англ.)

С использованием новых данных для CO и старых для BF и N₂ проверена линейная корреляция между значениями термов и потенциалами ионизации изоэлектронных молекул BF, CO и N₂. Показано, что для членов *прс*- и *прл*-серий, сходящихся к первому потенциалу ионизации, линейная корреляция соблюдается с точностью ~10 мэв. Библ. 17.

В. С. Иванов

J;

Ридберг,
переходы

☒ (+2)

ф. 1980. №

6095-III

Оттиски 9322

1980

BF

CO

N₂(Y; ϵ_i)

(42)



X 1980 N 17

17 Б155. Молекулярные ридберговские переходы ; моноокиси углерода. Корреляция между величиной терма и энергией ионизации BF, CO и N₂. Fock J.-H., Gürtler P., Koch E. E. Molecular-lydberg transitions in carbon monoxide: term value/ionization energy correlation of BF, CO and N₂. «Chem. Phys.», 1980, 47, № 1, 87—93 (англ.)

В области энергий фотонов 7—25 эв с разрешением 0,015 нм измерен спектр поглощения монооксида углерода. Использован синхротронный источник излучения. Для изоэлектронных молекул BF, CO и N₂ приведены энергии, квантовые дефекты, величины термов и потенциалы ионизации для ридберговских серий $5\sigma \rightarrow \text{пр}\sigma$ (0, 0) и $5\sigma \rightarrow \text{пр}\pi$ (0, 0) в спектрах молекул BF и CO и соотв-щих им серий $3\sigma_g \rightarrow \text{пр}\sigma_u$ (0, 0) и $3\sigma_g \rightarrow \text{пр}\pi_u$ (0, 0) в спектре N₂, а также серий $1\pi \rightarrow n\sigma$ (0, 0) и $1\pi \rightarrow n\sigma$ (0, 0), $4\sigma \rightarrow n\sigma$ (0, 0) и $4\sigma \rightarrow n\sigma$ (0, 0) в спектре CO и соотв-щих им серий $1\pi_u \rightarrow n\sigma_g$ (0, 0) и $1\pi_u \rightarrow n\sigma_g$ (0, 0), $2\sigma_u \rightarrow n\sigma_g$ (0, 0) и $2\sigma_u \rightarrow n\sigma_g$ (0, 0) в спектре N₂. Для $\text{пр}\sigma$ и $\text{пр}\pi$ серий, сходящихся к первому потенциалу ионизации рассматриваемых молекул, установлено, что между величиной терма и энергией ионизации имеется линейная зависимость. В. М. Ковба

XIII-5609

BF

1980

Jug R., et al

кв. мет.
пар.

Theor. Chim. acta, 1980,
57, n2, 131-44

CH FH - 111

BF

изотропные
комптоновские
процессы.

1980

Kaijser Per
et al.

Mol. Phys., 1980, 41,
N 5, 1143 - 1151.

● (сер. N 2, III).

BF

ш.п.

Омтмек 10552

10 Б124. Повторный анализ системы полос испускания $A \rightarrow X$ для ^{11}BF . Le Floch A. C., Lebreton J., Launay F., Ferran J., Rostas J. Reanalysis of the $A \rightarrow X$ emission system of ^{11}BF . «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1980, 13, № 20, 3989—3992 (англ.)

Экспериментально исследованы 9 полос системы $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ для молекул ^{11}BF . Проведена совместная обработка всех имеющихся эксперим. данных с помощью МНК, к-рая позволила получить наиболее полный набор молек. параметров. Для состояния $X^1\Sigma^+$ найдено: $Y_{10}=1401,97 \text{ см}^{-1}$, $Y_{20}=-11,78 \text{ см}^{-1}$, $Y_{30}=0,051 \text{ см}^{-1}$, $Y_{01}=1,5161 \text{ см}^{-1}$, $Y_{11}=-1,896 \cdot 10^{-2} \text{ см}^{-1}$, $Y_{21}=0,57 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $Y_{02}=-5,7 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$, $r_e=1,2630 \text{ А}$. Для состояния $A^1\Pi$: $T_e=51157,02 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e=1264,43 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e x_e=12,33 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e Y_e=-0,263 \text{ см}^{-1}$, $B_e=1,4224 \text{ см}^{-1}$, $\alpha_e=1,81 \cdot 10^{-2} \text{ см}^{-1}$, $\gamma_e=-4,1 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $D_e=5,9 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$, $q=-1,6 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $r_e=1,3040 \text{ А}$.

Б. И. Жилинский

Омтмек 10552

ж 1981. N 10

BF

Оттиск 10552

1980

4 Д483. Новый анализ системы полос испускания
A—X молекулы ^{11}BF . Reanalysis of the A→X emission
system of ^{11}BF . Le Floch A. C., Lebreton J.,
Launay F., Ferran J., Rostas J. «J. Phys. B:
Atom. and Mol. Phys.», 1980, 13, № 20, 3989—3992
(англ.)

М.И.

Выполнен заново анализ 9 полос испускания системы
A¹Π—X¹Σ⁺ молекулы ^{11}BF , сфотографированных с раз-
решением $\sim 0,125 \text{ см}^{-1}$. Пересмотрены также результа-
ты анализа данных, полученных в работе (Опака R.,
«J. Chem. Phys.», 1957, 27, 374). Приведены новые зна-
чения спектроскопич. постоянных для этой системы.
Библ. 15. В. С. Иванов



Ф. 1981 № 4

BF

Ommuck 10552

1980

94: 92812h Reanalysis of the $A \rightarrow X$ emission system of boron-11 monofluoride. Le Floch, A. C.; Lebreton, J.; Launay, F.; Ferran, J.; Rostas, J. (Lab. Spectrosc. Mol., Fac. Sci., 37200 Tours, Fr.). *J. Phys. B* 1980, 13(20), 3989-92 (Eng). Nine UV emission bands of the main $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ system of ^{11}BF are reanalyzed. The reanalyzed results and those of R. Onaka (1957) are reduced to mol. consts. using a single least-squares fit for each set of band lines. Revised rotational, vibrational, and mol. centrifugal distortion consts. are given.

417.

C. A. 10552/12

BF

1980

Tatewaki H., et al.

u. n. Int. J. Quantum Chem.
1980, Quantum Chem.
Symp. N 14, 93 - 106.

(cc. F₂ ; III)

(omitted 9668)

1980

BF

Wilson S., et al.,

pacem

J. Chem. Phys., 1980, 72,
N 3, 2159-2165.

монитор

реферат

номеров.

изд. 1980,

пачет E

(см. №; III)

BF

1981

6 Б156. Новый колебательный анализ электронного перехода ${}^1\Pi-{}^1\Sigma^+$ молекулы BCl. Богомолова Е. А., Москвитина Е. Н., Никоноров А. П. «Вестн. МГУ Химия», 1981, 22, № 6, 531—535

Впервые получены спектры поглощения молекул ${}^{11}\text{BCl}$ и ${}^{10}\text{BCl}$. Проведен новый колебательный анализ электронного перехода ${}^1\Pi-{}^1\Sigma^+$ молекулы BCl, определены значения молек. постоянных: $\omega_e''=840,14$, $\omega_e''X_e''=5,09$, $\omega_e''Y_e''=-0,05$, $\omega_e''Z_e''=-0,004$, $\omega_e'=850,09$, $\omega_e'X_e'=10,9$, $\omega_e'Y_e'=-0,26$, $\omega_e'Z_e'=0,015$. Рассчитаны значения величин энергий диссоциации: $D(\text{BF}, {}^1\Sigma^+)=7,7$ эВ, $D(\text{BCl}, {}^1\Sigma^+)=5,6$ эВ, $D(\text{BBr}, {}^1\Sigma^+)=4,4$ эВ. Резюме

Vi, m.n.,

Do;

(42)

● BCl, BBr

X. 1982, 19, N6.

1981

BF

Om. 11888

' 95: 86651j Properties of the $X^1\Sigma$ state of boron fluoride (BF). Kurtz, Henry A.; Jordan, Kenneth D. (Dep. Chem., Univ. Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15260 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 81(1), 104-9 (Eng). A perturbation theor. approach for treating electron correlation was used to calc. the potential energy curve and dipole moment function of BF near its equil. bond length. A dipole moment of 0.89 D (B-F⁺) is predicted at R_e . When the bond is stretched by ≈ 0.2 Å, the dipole reverses sign.

nomeris.
 op-llle;
 kb. dlex.
 pacnem

C.A. 1981, 95, N10.

BF

1981

11 Д106. Свойства $X^1\Sigma$ -состояния BF. Properties of the $X^1\Sigma$ state of BF. Kurtz Henry A., Jordan Kenneth D. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 81, № 1, 104—109 (англ.)

Исследуется влияние эффектов электронной корреляции на потенц. кривую и ф-цию дипольного момента $\mu(R)$ молекулы BF вблизи равновесной конфигурации. Электронная корреляция учитывается во втором поряд-

ке многочастичной теории возмущения. Результаты сравниваются с обычными ССП-расчетами.

В. В. Росихин

М.П.

ф. 1981, 18, к. 11.

BF

21 Б39. Свойства состояния $X^1\Sigma$ молекулы BF. Kurtz Henry A., Jordan Kenneth D. Properties of the $X^1\Sigma$ state of BF. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 81, № 1, 104—109 (англ.)

1981

М.П.

Многочастичная теория возмущений (МТВ), основанная на хартри-фоковском нулевом приближении, применена для расчета потенциальной кривой, ф-ции дипольного момента и др. св-в основного состояния $X^1\Sigma$ молекулы BF вблизи равновесной конфигурации. Корреляция электронов учитывалась с точностью до 2-го порядка МТВ, вкл. При вычислении поляризуемости использовано хартри-фоковское нулевое приближение с учетом электр. поля. Приведены значения спектроскопич. постоянных R_e , ω_e , D_e , μ_e , $(d_\mu/dR)_{R_e}$, $\alpha_{||}$, $\alpha_{\perp}$ и Q_{zz} , где $\alpha_{||}$ и $\alpha_{\perp}$ — поляризуемости молекулы в направлениях, параллельном и перпендикулярном полю, а Q_{zz} — квадрупольный момент молекулы. Изучено влияние электронной корреляции на рассчитанные св-ва. Найдено, что при $R \leq 1,45$ А дипольный момент молекулы отвечает распределению зарядов типа $B-F^+$. При больших значениях R направление дипольного момента меняется. На основании результатов расчета обсужден вопрос о природе хим. связи в молекуле BF.

В. Б. Павлов-Вереvкин

X. 21. 1981

BF

Ommuck 12239

1981

95: 52166q Measurement of the vibrational band strength of bromine-11 fluoride using a tunable diode laser. Zahniser, Mark S.; Gersh, Michael E. (Cent. Chem. Environ. Phys., Aerodyne Research, Inc., Bedford, MA 01730 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(1), 52-8 (Eng). The IR band strength for the fundamental vibrational mode of ^{11}BF was measured by line absorption of the $P(11)$ transition at 1343.5 cm^{-1} by a tunable diode laser and multipass absorption cell coupled to a discharge flow app. The BF no. d. was simultaneously detd. by UV absorption at the bandhead of the $A\ ^1\Pi \leftarrow X\ ^1\Sigma$ transition at 196 nm. The resulting value for the band strength is $650 \pm 200\text{ cm}^{-1}$ (STP atm) $^{-1}$, which is in good agreement with existing theor. calcs.

Chemical
normalised.

C.A. 1981, 95, N6.

BF

Омиск 12239

1981

3 Д416. Измерение интенсивности колебательной полосы ^{11}BF с использованием перестраиваемого диодного лазера. Measurement of the vibrational band strength of ^{11}BF using a tunable diode laser. Zahniser Mark S., Gersh Michael E. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 1, 52—58 (англ.)

Получены спектры ИК- и УФ-поглощения BF , образованного в СВЧ-разряде смеси BF_3 с гелием. Рассчитана интенсивность УФ-поглощения для канта полосы $A''\Pi-X'\Sigma$ вблизи 196 нм с использованием данных для радиационного времени жизни возбужденного состояния и факторов Франка—Кондона. Эти данные использованы для определения конц-ии BF в разряде. В выполненных с помощью перестраиваемого диодного лазера ИК-измерениях определена интенсивность вращательной линии $P(11)$ основной полосы ^{11}BF . Эта величина использована для расчета производной дипольного момента молекулы. Найденное значение производной 5 ед. $\text{D}/\text{\AA}$ хорошо согласуется с теоретич. расчетами. Библи. 36. М. В. Т.

Спектры

Ф. 1982, 18, №3

BF

Оттиск 12239

1981

1) 4 Б1721. Измерение интенсивности колебательной полосы ^{11}BF с использованием перестраиваемого диодного лазера. Zahniser M. S., Gersh M. E. Measurement of the vibrational band strength of ^{11}BF using a tunable diode laser. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 1, 52—58 (англ.).

спектр

Измерили интегральное поглощение одной колебательно-вращательной линии $P(11)$ молекулы BF с помощью диодного лазера (ДЛ). Интенсивность линии определили, измеряя одновременно концентрацию BF по УФ-поглощению $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma(0,0)$ перехода при 196 нм. Оптич. путь перпендикулярен потоку BF , окруженному потоком Ar . BF получали в СВЧ-разряде (2450 МГц, 100 Вт) в BF_3 и He , диссоциация менее 1%. Конц-ия BF равна $2 \cdot 10^{12}$ молекула/см³, т-ра 300 К. УФ-свет дуговой Хе-лампы высокого давл. проходил перпендикулярно ИК-лучу в монохроматор. ИК-луч ДЛ проходил через монохроматор, механически модулиро-

Х. 1982, 19, НЧ.

BF

[Ommuck 14299] 1982

Arora R, Robinson E.A.,

et al., J. Phys. Chem., 1982,
Ser. A.
66836 86, 16, 894-899.

BF

1982

21 Б28. Расчеты двухатомных молекул методом ПДДП в расширенном базисе. Gleghorn John Tyler, McConkey Frederick William. Extended basis NDDO calculations on diatomic molecules. «Theor. chim. acta», 1982, 61, № 3, 283—293 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ПДДП с использованием симм. ортонормированного базиса орбиталей слейтеровского типа проведены расчеты длин связей и частот колебаний для ряда двухатомных молекул BF, CO, HF, N₂, LiH, LiF и F₂. Полученные результаты сравниваются с данными неэмпирич. расчетов и экспериментом. И. Абронин

расчет V_i ,
 z_e

⊗
(+6)

X-1982, 19, N 21

BF

1982

Gáspár R.

večerem;
emrykm;
E;

Int. J. Quantum Chem.
1983, 23, N3: Proc. 4 Int.
Congr. Quantum Chem, Up-
psala, 13-20 June, 1982. Con-
trib. Pap., Pt3, 1017-1024.

(c.v. BH₃; III)

BF

1982

Тусеев У. У., Усманов
Э. М. и др.

Кв. мех.
поисков

Азерб. ун-т. Баку, 1982,
15с. Библиогр. 6 назв. (Рук.
ген. в ВНИИТИ 19 июня 1982,
N 3855-82 ● Дер).

(сер. Lit; III)

BF

1982

Prerem

Hout Robert F., Levi Bever-
ly A., et al.

Di

J. Comput. Chem., 1982,
3, no. 2, 234-250.

● (cm. H₂; III)

BF

1982

Ohwada Ken.

paper. J. Chem. Phys., 1982,

Chem. Phys. 77, n 1, 424-428.

4 E.

(see BeB; III)

BF

Ommuck 13987

1982

Ohwada K.,

Кб. мех.
расшир

J. Chem. Phys., 1982,
76, N5, 2565-2568.

BF

Ин. 15465, а" 1982

5 Б27. Неэмпирические расчеты скоростей инфракрасных переходов в основных состояниях BF и BF⁺. Ab initio calculations of infrared transition rates in the ground states of BF and BF⁺. Rosmus Pavel, Werner Hans-Joachim, Grimm Michael. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 92, № 3, 250—256 (англ.)

С использованием базисов ОГТ (11s6p2d) для В и (11s7p2d1f) для F рассчитаны кривые потенциальной энергии, дипольные моменты (в зависимости от межъядерного расстояния), а также вероятности переходов между колебательными уровнями для основных состояний X¹Σ⁺ молекулы BF и X²Σ⁺ иона BF⁺. Большинство вычислений выполнено с многоэлектронными волновыми функциями многоконфигурац. приближения ССП (30 конфигураций для BF и 34 для BF⁺). В области межъядерных расстояний, близких к равновесным, использованы также методы электронных пар. Рассчитанные спектроскопич. постоянные связанного состояния X¹Σ⁺ BF хорошо согласуются с эксперим. данными.

расчет
кривых
потенциальной
энергии,
м.п.

(4)

BF⁺

Х. 1983, 19, № 5

Зависимость дипольного момента от межъядерного расстояния для BF имеет максимумы, причем в окрестности равновесного расстояния распределение заряда отвечает полярности B^-F^+ , а области максимума кривой соответствует псевдопересечение ионного и нейтр. ($\text{B}^+ + \text{F}$) состояний. Представлены результаты расчетов колебательно усредненных дипольных моментов до $V=10$. Большие значения эйнштейновских коэф. вероятностей спонтанных переходов указывает на то, что и нейтр. молекула, и катион являются сильными излучателями в ИК-области. Найдено, что состоянию $A^2\Pi$ катиона отвечает отталкивательная потенциальная кривая.

А. В. Немухин



BF, BF⁺

Om. 15465, a¹¹ 1982

27-225369t Ab initio calculations of infrared transition rates in the ground states of boron monofluoride and boron monofluoride(1+) ion. Rosmus, Pavel; Werner, Hans Joachim; Grimm, Michael (Fachbereich Chem., Univ. Frankfurt, D-6000 Frankfurt, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 92(3), 250-6 (Eng). Elec. dipole moment functions and radiative transition rates were calcd. for the X¹Σ⁺ state of BF and the X²Σ⁺ state of BF⁺ from MC SCF wavefunctions. Both are predicted to be strong emitters in the IR. For BF⁺ the electronically excited ²Σ⁺ state, corresponding to the configuration 1σ²2σ²3σ²4σ²5σ²1π², is calcd. to be bound, whereas the A ²Π state is repulsive.

M, pages

C.A. 1982, 97, ~26

BF

Dm. 15465, A' 1982

3 Д501. Расчеты ab initio вероятностей инфракрасных переходов BF и BF+ в основном состоянии.
Ab initio calculations of infrared transition rates in the ground states of BF and BF+. Rosmus Pavel, Werner Hans-Joachim, Grimm Michael. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 92, № 3, 250—256 (англ.)

С использованием многоконфигурационного самосогласованного поля рассчитаны энергии, равновесные расстояния, вращательные постоянные, колебательные частоты, параметры ангармоничности, дипольные моменты и их производные по межъядерным расстояниям для BF и BF+ в основном электронном состоянии. Изучены возможности других методов расчета. Вычислены матричные элементы дипольного момента для колебательных переходов с уровней от 0 до 10 с правилами отбора $\Delta v = 0 \div 3$. Рассчитаны спектры ИК-излучения. Изученные соединения рекомендованы в качестве активной среды для оптических квантовых генераторов. Библ. 31. М. В. Т.

M. N;

(4) X

op. 1983, 18, N3

BF+

BF

Ommuck 14285

1982

(15+)

Lhu Z. H., Marzell J. N.

Kv. uex.
pacrem

Chem. Phys. Lett.,
1982, 88, N3, 262-265.

BF

1983

Borodlyuk N.R., Tyulin
V.I.

и. н. Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2:
Khim. 1983, 24 (2), 126-130.

● (сер. CO; III)

BF

1983

9 Д572. Исследование процесса фотоионизации $\text{BF}^+(\text{X}^2\Sigma^+) \leftarrow \text{BF}(\text{X}^1\Sigma^+)$ с помощью высокотемпературной фотоэлектронной спектроскопии. Study of the ionization process. $\text{BF}^+(\text{X}^2\Sigma^+) \leftarrow \text{BF}(\text{X}^1\Sigma^+)$ by high-temperature photoelectron spectroscopy. Dyke John M., Kirby Colin, Morris Alan. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1983, Pt 2, 79, № 3, 483—490 (англ.)

Изучены HeI-фотоэлектронные спектры продуктов реакции BF_3 с нагретым до t -ры 1900—2200 К бором. Обнаруженная полоса с адиабатич. и вертикальным потенциалом ионизации $11,12 \pm 0,01$ эВ отнесена к ионизационному переходу $\text{BF}^+(\text{X}^2\Sigma^+) \rightarrow \text{BF}(\text{X}^1\Sigma^+)$. Отнесение основано на анализе колебательной структуры полосы, неэмпирич. расчетов в приближении ΔSCF , данных о ридберговских сериях BF и масс-спектрометрии. Оценены спектроскопич. константы для $\text{BF}^+(\text{X}^2\Sigma^+)$: $R_e = 1,208 \pm 0,005$ Å, $\omega_e = 1765 \pm 20$ см⁻¹, $\omega_e x_e = 12,4$, $D_e = 5,09 \pm 0,14$ эВ. Библ. 38. Ю. В. Чижов

у;

(H) X

оп. 1983, 18, № 9

BF⁺ (м.п.)

BF BF⁺

1983

16 Б146. Изучение процесса ионизации $\text{BF}^+(\text{X}^2\Sigma^+) \leftarrow \text{BF}(\text{X}^1\Sigma^+)$ методом высокотемпературной фотоэлектронной спектроскопии. Study of the ionization process $\text{BF}^+(\text{X}^2\Sigma^+) \leftarrow \text{BF}(\text{X}^1\Sigma^+)$ by high-temperature photoelectron spectroscopy. Dyke J. M., Kirby C., Morris A. «J. Chem. Soc. Faraday Trans», 1983, Pt 2, 79, № 3, 483—490 (англ.)

фотоэлектр.
спектр

47
(H)

Исследован фотоэлектронный спектр (возбуждение He-1) молекулы BF, образующейся при пропускании газообразного BF, над нагретым бором (1900—2200 К, графитовая печь). В молекуле BF отнесена полоса в области 11,0—12,0 эВ (BF^+ , $\text{X}^2\Sigma^+$, $\nu' \leftarrow \text{BF}$, $\text{X}^1\Sigma^+$, ν'') с разрешенной колебательной структурой (полосы 0—2, 0—1, 0—0, 1—0). Адиабатический и вертикальный потенциалы ионизации (ПИ) совпадают и равны $11,12 \pm 0,01$ эВ, $\bar{\omega}_e' = 1765 \pm 20$ см⁻¹. Значение ПИ хорошо согласуется с величиной, полученной из ана-

X. 1983, 19, N16

BF⁺

(до, разн.)

лиза ридберговских серий в спектре ВF. Методом Хартри—Фока—Слейтера и ДССП выполнены расчеты вертикальных ПИ молекулы ВF, соотв-щих ионизации орбиталей 5σ , 1π и 4σ и образованию BF^+ в состояниях $X^2\Sigma^+$, $^2\Pi$ и $^2\Sigma^+$ соотв. Вычисленные значения r_e (в А); ω_e и $\omega_e x_e$ (в см^{-1}): ВF ($X^1\Sigma^+$)—1,2452, 1538, 12,4; BF^+ ($X^2\Sigma^+$)—1,1987; 1802, 10,7. Для $\text{BF}^+(A^2\Pi)$ также выполнены неэмпирич. расчеты в широком интервале межъядерных расстояний и найдено, что потенциальная кривая имеет диссоциативный характер, а соотв. полоса в ФЭС, как предполагается, должна быть широкой и бесструктурной. Оценено значение $D_e(\text{BF}^+, X^2\Sigma^+) = 5,09 \pm 0,14$ эВ.

В. М. Ковба

BF

1983

Mucci J. E., March N.H.

теор.
расчет

J. Chem. Phys., 1983,
78, N10, 6187-6189.

( N_2 ; III)

BF

1983

Pan Dao-kai, Nie
Ze-Fu, et al.

Рисрем
геоуемр.
смыкм.

Int. J. Quantum Chem.,
1983, 23, N6, 1945-
-1958.

●
(Cis. CH₄; III)

BF

Om. 20389

1983

99: 111052g Effective potential calculations of potential energy curves for low-lying electronic states of the boron monofluoride molecule. Zaitsevskii, A. V.; Dzevitskii, B. E.; Zviadadze, G. N. (Inst. Metall. im. Baikova, Moscow, USSR). *Soobshch. Akad. Nauk Gruz. SSR* 1983, 110(2), 321-4 (Russ). The CI method was applied to calcns. of low-lying electronic states of BF mol. within the framework of valence approxn. Valence-core interactions are described by using the Bonifacic-Huzinaga effective potential, adapted to double zeta STO bases. Potential energy curves and spectroscopic consts. were obtained. The results agree with initial-state CI data. Thus, the CI technique combined with the effective potential method, is an effective tool for studying low-lying electronic states of diatomics.

теорет.

расчет

осн. и корр.

составля.

номеру. кривые

и и.п.

С. А. 1983, 99, N 14

BF

от. 20389

1983

1 Б1040. Расчет кривых потенциальной энергии низколежащих электронных состояний молекулы BF методом эффективного потенциала. Зайцевский А. В., Дзевницкий Б. Э., Звиададзе Г. Н. «Сообщ. АН ГССР», 1983, 110, № 2, 321—324 (рез. груз., англ.)

В валентном приближении, методом конфигурационного взаимодействия (КВ) проведен расчет низших электронных состояний молекулы BF. Взаимодействия между основными и валентными электронами описаны с помощью эффективного потенциала Бонифаччи-Хузинаги в двухэкспонентном базисе орбиталей слейтеровского типа. Полученные кривые потенциальной энергии и спектроскопич. постоянные хорошо согласуются с найденными в обычном расчете КВ. Сделан вывод, что сочетание метода КВ с методом эффективного потенциала является эффективным способом исследова-

и.п., Σ_i
потенц.
кривые

Х. 1984, 19, № 1

ния низших электронных состояний двухатомных мо-
лекул.

Резюме



BF

0m. 18237

1983

9 Д93. Молекулярные расчеты в приближении эффективного потенциала с использованием базиса орбиталей слэйтеровского типа. BF и BCl. Зайцевский А. В., Звонадзе Г. Н., Дзевецкий Б. Э., Ин-т металлургии АН СССР. М., 1983, 7 с. Библиогр. 4 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 25 мая 1983 г.), № 2844—83 Деп.)

Методом эффективного остоного потенциала с использованием двухэкспонентного валентного базиса орбиталей слэйтеровского типа рассчитано электронное строение молекул BF и BCl. Получены валентные орбитальные энергии, потенциальные кривые и значения молекулярных постоянных. Результаты с высокой точностью согласуются с данными неэмпирич. расчетов этих молекул методом ССП в полном двухэкспонентном базисе. Введение эффективного остоного потенциала позволило сократить объем вычислений в 3—10 раз. Отмечено, что адекватное описание потенциальной кривой BCl невозможно без включения в базис поляризационных d -функций.

Автореферат

теорет.
расчет

(4)

Ф. 1983, 18, № 9

BF

1984

Bieger Wolfgang, Gross-
smann Gisbert, et al.

Y, meop.
pacrim.

Z. Chem. 1984, 24 (4),
156-7.

( C₂; III)

BF

Om. 19894 1984

3 Д245. Термическая диссоциация и диссоциация, вызванная электронным ударом, молекул $\text{BF}_3(\text{g})$. Electron and thermal dissociation of $\text{BF}_3(\text{g})$. Farber M., Srivastava R. D. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 1, 241—244 (англ.)

Описанным ранее методом («Trans. Faraday Soc.», 1969, 65, 3202) исследована диссоциация молекул $\text{BF}_3(\text{g})$ электронным ударом. Измерения привели к значениям 16, 24 и 30 эВ для потенциалов появления ионов BF_2^+ , BF^+ и F^+ соответственно. Потенциал появления иона BF_2^+ оказался лишь на 0,2 эВ больше потенциала ионизации $\text{BF}_3(\text{g})$. Отношение конц-ий ионов BF_3^+ , BF_2^+ , BF^+ и F^+ при ударе электронами с энергией 70 эВ оказалось равным 10/100/8/3. Термич. распад $\text{BF}_3(\text{g})$ приводит к $\text{BF}_2(\text{g})$ и $\text{BF}(\text{g})$ примерно в одинаковой конц-ии. Распад с образованием димеров фторидов бора и атомов фтора является маловероятным. Измеренные потенциалы ионизации $\text{BF}_3(\text{g})$, $\text{BF}_2(\text{g})$, $\text{BF}(\text{g})$

у;

☒
(42)

ср. 1985, 18, N3

 BF_2 , BF_3

оказались равными ~~16, 9 и 11 эВ соответственно~~. На основе парциальных давлений для реакции $\text{BF}_3(\text{g}) + \text{BF}(\text{g}) = 2\text{BF}_2(\text{g})$ в интервале т-р 1780—1900 К получено следующее значение $\Delta H_{298} = 17,1 \pm 0,5$ ккал/моль, которое в свою очередь приводит к величине $\Delta H_{1298} = 141 \pm \pm 0,5$ ккал/моль для $\text{BF}_2(\text{g})$, что хорошо согласуется с данными по фотоионизации и ионизации электронным ударом.

А. А. Зембеков



BF

1984

Газарин С.Т., Петерин
Ю.А.

Ж. структур. химия,
и.п. 1984, 25, №6, 18-23.

● (ссыл. СД; III)

BF (om. 18939) a" 1984

Leonard J. M., Luker W. L.,

meopem.
pacrim

Int. J. Quantum Chem.
1984, 25, N2, 355-365.

BF

1984

Politzer Peter.

раерен
E

J. Chem. Phys., 1984,
80, n1, 380-382.

● (cur. Li₂; III)

BF

1985

Bieger W., Seifert G.,
Eschrig H., et al.

neop.
pacrim

Chem. Phys. Lett.,
1985, 115, N 3, 275-280.

(cell. Li_2 ; III)

BF

1985

Laaksonen Leif,
Sundholm Tage, et al.

рачрѐм
сѐпрыкм.

Int. J. Quantum. Chem.,
1985, 27, N5, 601-612.

(сѐ. B_2 ; III)

BF

1985

73 Л205. Полученный с диодным лазером и использованием метода модуляции разряда спектр ^{11}BF . Infrared diode laser spectrum of ^{11}BF by the pulse discharge modulation method. Nakagata Taisuke, Takeo Harutoshi, Kondo Shigeo, Matsumura Chi. «Kagaku gijyū kankyō shokoku», J. Nat. Chem. Lab. Ind., 1985, 80, № 8, 301—305 (яп.; рез. англ.)

С использованием диодного лазера получены спектры ИК-поглощения образованных в электрич. разряде газообразного BF_3 молекул ^{11}BF в области $1300\text{—}1400\text{ см}^{-1}$. Для отнесения линий использован метод модуляции разряда. Калибровкой по линиям OCS измерены частоты отдельных колебательно-вращательных линий основной полосы молекулы и с использованием микроволн. данных определены колебательная частота $1378,685\text{ см}^{-1}$ и константы B и D в возбужденном колебательном состоянии. Найдено равновесное межатомное расстояние $r_e = 1,26280\text{ Å}$. Методом модуляции разряда изучено временное изменение интенсивности линий BF в чистом BF_3 и его смеси с аргоном. М. В. Т.

(Di, ze)

ср. 1986, 18, № 3.

11 BF

[Om. 21055]

1985

102: 157123q Infrared diode laser spectrum of boron monofluoride (^{11}BF) by the pulse discharge modulation method. Nakanaga, Taisuke; Takeo, Harutoshi; Kondo, Shigeo; Matsumura, Chi (Natl. Chem. Lab. Ind., Yatabe, Japan 305). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 114(1), 88-91 (Eng). The pulse discharge modulation method was examd. by observing the IR diode laser spectrum of ^{11}BF . The spectrum can be obsd. even when the lifetime is a few hundred microseconds and when it is seriously overlapped by the absorption of the parent species. An anal. of the spectrum leads to the mol. consts. of ^{11}BF and to $r_e(\text{BF}) = 1.26280(5) \text{ \AA}$.

lek cnekmp,

2e;

C. A. 1985, 102, N 18.

BF

Om. 21055 1985

12 Б4385. Инфракрасный диодно-лазерный спектр ^{11}BF , полученный методом модуляции импульсного разряда. Infrared diode laser spectrum of ^{11}BF by the pulse discharge modulation method. Nakanaga Taisuke, Takeo Harutoshi, Kondo Shigeo, Matsumura Chi. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 114, № 1, 88—91 (англ.)

Создан диодно-лазерный ИК спектрометр с модуляцией методом импульсного разряда (ИР), к-рый использован для наблюдения вращат.-колебат. полос нестабильной молекулы ^{11}BF . В этом методе ИК-сигнал поглощения регистрируется на фиксированной частоте, соотв. линии поглощения промежут. частицы, образующейся в ИР. Этот сигнал нарастает во время разряда и экспоненциально спадает после прекращения ИР. Скорость спада зависит от времени жизни частицы. В то же время сигнал исходной молекулы изменяется обр.

спектр,

М.П.

Х. 1985, 19, № 12

образом: сначала он спадает во время ИР, а затем восстанавливается до начального значения по мере поступления новой порции образца в проточной системе. В условиях опытов использовали ИР при макс. напряжениях до 2 кВ и ширине пика 100 мкс. Период следования импульсов 0,5—10 мс. Метод опробован на примере COS. Спектр ^{11}BF получен при ИР в смеси Ag—BF_3 (соотношение конц-ий 10:1) при давл. 1 Торр. Спектр измеряли как обычным методом стационарного разряда, так и методом ИР. Спектры в области $R(4)$ и $R(7)$ измерены только методом ИР из-за сильного перекрывания этих линий с полосой поглощения BF_3 при 1450 см^{-1} . На основе анализа 12 обнаруженных спектральных линий ^{11}BF определены молек. константы этой частицы. Приведены величины констант (см^{-1}): B_0 1,507235; D_0 $7,1 \cdot 10^{-6}$ (лит. данные); ν 1378,685; B_1 1,488312; D_1 $7,11 \cdot 10^{-6}$; $r_e = 1,26280$ А. В. Е. Скурат

BF (ионы)

От. 21055

1985

8 J119. Исследование спектра ^{11}BF с помощью лазерного диода методом импульсной модуляции разряда. Infrared diode laser spectrum of ^{11}BF by the pulse discharge modulation method. Nakanaga Taisuke, Takeo Harutoshi, Kondo Shigeo, Matsumura Chi. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 114, № 1, 88—91 (англ.)

спектр, И.П.

В условиях высоковольтного газового разряда в BF_3 исследованы спектры ИК-поглощения ионов $(^{11}\text{BF})^{2+}$ в области $1311\text{—}1401\text{ см}^{-1}$. Измерения проведены с помощью лазерного диодного спектрометра, калибровка частоты осуществлялась с помощью дифракционного монохроматора и Ge-интерферометра, что обеспечило точность в определении частот $5 \cdot 10^{-3}\text{ см}^{-1}$. Использование модуляции во времени газового разряда позволило надежно разделить линии поглощения, обусловленные

(4) 17

ср. 1985, 18, N 8

$(\text{BF})^{2+}$ (спектр)

стабильными молекулами BF_3 и ионами BF^{2+} . Всего в исследованной области спектра наблюдалось 12 линий, которые могут быть отнесены к ионам BF . Проведено отнесение линий к P - и R -ветвям колебательно-вращательной структуры. Вычислены молекулярные постоянные ионов ^{11}BF . Установлено, что при давлениях порядка 1 мм рт. ст. время жизни молекулярных ионов BF^{2+} в плазме составляет ~ 400 мкс. К. Э. М.

Результат безумный!

BF

[OM 21603]

1985

Rzepa H.S.,

J. Mol. Struct. (Theo-
chem) 1985, 121, 313-

-315.

meop.
racem

BF. (DM. 23480)a" 1985

Sundholm A., Pyrkko P.,
et al.,

теор.
результ

Mol. Phys., 1985, 56,
N 6, 1411-1418.

(ср. He₂;^{III})

BF

(om. 26249)

1986

Botchwina P.,

meapem.
paarem
ll. n.,
komem.
op-cig.

J. Mol. Spectrosc.,
1986, 118, n1, 76-87.

(cu. BH; III)

BF

1986

Thakkar Ajit J.,
Sharma B.S., et al.

Recd.

CB-836

J. Chem. Phys. 1986,
85(5), 2845-9.

(Cu. Li₂; III)

ВФ

Зайцевский А. В.,

1986

Авторстрат диссертации на
сосекаание ученой степени
К. Х. Н., Москва, 1986.

расчет
функции
дипольн.
момент
электро-
переходов

Анотация из извещения о диссертации
промышленных составов двух-
атомных молекул и электро-
механических переходов методом ЭФЭРЭК-
тивного  потенциала.

BF

1987

Guner O.F., Skillady D.D.,
et al.

Int. J. Quantum Chem.,
u.n. 1987, 32, N5, 551-562.

(Calc. LiH ; III)

BF

1987

Maclagan R.G.A.R.,
Simpson R.W.

u.n.

Int. J. Quantum Chem.,

1987, 31, N3, 463-470.

( cu. N₂; III)

BF

(OM. 29083) 27881) 1987

Peterson Kirk A.,
Woods R. Claude.

u.n.

J. Chem. Phys., 1987,
87, n8, 4409-4418.

(cep. ● BCC; III)

BF

DM. 29291

1988

21 Б1224. Синглетные и триплетные состояния BF. Singlet and triplet states of BF. Bredohl H., Dubois I., Mélen F., Vervloet M. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 129, № 1, 145—150 (англ.)

На ИК-фурье-спектрометре с разрешением $0,03 \text{ см}^{-1}$ измерены спектры трех синглетных переходов: полосы $0-0$ перехода $H^1\Sigma^+ - D^1\Pi$ вблизи 6405 см^{-1} , полосы $0-0$ перехода $D^1\Pi - B^1\Sigma^+$ вблизи 6785 см^{-1} , полосы $0-2$ перехода $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi$ вблизи 11950 см^{-1} , и двух триплетных переходов: полос $0-0$, $1-1$ и $2-2$ перехода $d^3\Pi - b^3\Sigma^+$ вблизи 9712 см^{-1} и полосы $0-0$ перехода $g^3\Sigma^+ - d^3\Pi$ вблизи 7217 см^{-1} . Для всех полос 7 электронных состояний определены вращат. постоянные. Для 6 ридберговских состояний $B^1\Sigma^+(3s\sigma)$, $D^1\Pi(3p\pi)$, $H^1\Sigma^+(3d\sigma)$, $b^3\Sigma^+(3s\sigma)$, $d^3\Pi(3p\pi)$ и $g^3\Sigma^+(3p\sigma)$ получены уточненные значения молек. постоянных и уточнена идентификация электронных конфигураций.

С. Н. Мурзин

M.A.

X. 1988, 19, N 21

BF

Om. 29291

1988

109: 13838y Singlet and triplet states of boron fluoride (BF).
 Bredohl, H.; Dubois, I.; Melen, P.; Vervloet, M. (Inst. Astrophys.
 Univ. Liege, B-1200 Sart Tilman-Liege, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1988,
 129(1), 145-50 (Eng). High-resoln. spectra of 3-singlet and 2 triplet
 transitions of BF were obsd. in the near IR. Accurate rotational
 consts. are given for the 7 electronic states involved.

спектр. спектр.
 разн. в
 ДНК, анализ.
 по м. 7 м. состав.

©. A. 1988, 109, N 2.

BF

Ом: 29291

1988

12 Л254. Синглетные и триплетные состояния BF.
Singlet and triplet states of BF. Bredohl H., Du-
bois I., Mélen F. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 129, № 1,
145—150 (англ.)

В спектре испускания высокого разрешения, возбуж-
даемом СВЧ-разрядом в смеси He/BF₃ идентифициро-
ваны 3 синглетных и 2 триплетных перехода молекулы
BF в близкой ИК-области. Выполнен вращательный
анализ спектров и определены вращательные постоян-
ные для семи электронных состояний молекулы BF.

В. С. Иванов

М.П.

ф. 1988, № 12

BF

1988

Peterson Kirk A.,
Woods R. Claude.

J. Chem. Phys. 1988, 89, N8,
u.n. C. 4929-4944.

(cu.  ALF; III)

BF

BF⁺

DM-28691

1988

№ 6 Д58. Неэмпирические расчеты молекулярных фрагментов из процессов перезарядки: BF и BF⁺. Ab initio calculations for molecular fragments from charge exchange processes: BF and BF⁺. Schneider F., Gianturco F. A. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1988, 21, № 2, 329—337 (англ.)

Рассчитана подробная электронная структура фрагментов возможной реакции перезарядки: $\text{BF} + \text{H}^+ \rightarrow \text{BF}^+ + \text{H}$, с использованием двухэкспонентного базиса, дополненного одной *d*-орбиталью на каждом атоме, и метода НИК КВ. Показано, что предложенная методика позволяет получить реалистичные кривые потенц. энергии для высокополярных систем, таких как В и F. Включение всех важных корреляц. вкладов вдоль пути диссоциации приводит к точности результатов, сравни-

М.П.

ср. 1988, 18, N 6

мой с расчетными данными, полученными с большими базисами. Реалистичные кривые потенц. энергии получены для $\text{BF} (X^1\Sigma^+, A^1\Pi)$ и для $\text{BF}^+ (X^2\Sigma^+, A^2\Pi)$ в широком интервале межъядерных расстояний. Н. В. В.

BF

OM 28691

1988

($X^1\Sigma^+$, $A^1\Pi$)

nomenu. p-ue

BF^+

($X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$)

nomenu. p-ue

109: 12067; Ab initio calculations for molecular fragments from charge exchange processes: fluoroborane and fluoroboron(1+). Schneider, F.; Gianturco, F. A. (Dep. Chem., Univ. Rome, 00185 Rome, Italy). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1988, 21(2), 329-37 (Eng). The detailed electronic structures of the fragments of a possible charge transfer reaction $BF + H^+ \rightarrow BF^+ + H$, were computed by using a double-zeta quality CGTO basis augmented by one d orbital on each atom (DZP basis), and employing the MRD-CI method for treating the CI effects. Reliable potential energy curves were obtained for BF ($X^1\Sigma^+$, $A^1\Pi$) and for BF^+ ($X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$) over a wide range of internuclear distances. Despite the relatively small basis set, the computed curves compare well with available exptl. data and with earlier calcs.

C. A. 1988, 109, N2.

BF

DM 31 880

1988

7 Д44. Роль электроотрицательностей в расчетах двухатомных молекулярных параметров (галогениды элементов III группы). The role of electronegativities in the calculation of diatomic molecular parameters. [Halides of group III elements] / Varada Rajulu A., Viswanath R., Szöke S. // Acta phys. hung.— 1988.— 63, № 3—4.— С. 243—247.— Англ.

Силовые постоянные для двухатомных молекул и изолированных связей могут быть выражены с использованием электроотрицательностей, сил связей и межатомных расстояний. Изучены некоторые галогениды элементов III группы и определены константы пропорциональности d , а также параметры Леннарда-Джонса ab и b для ф-ций потенц. энергии, используемые в расчетах ангармоничности $\omega_e x_e$, и константы вращательно-колебательного взаимодействия α_e . Исследованы изменения молекулярных параметров с ат. номером Z . Получены данные для молекул BF, AlF, GaF, InF, TlF, BCl, AlCl, GaCl, InCl, TlCl, AlBr, TlBr, AlI, GaI. Средние расхождения между рассчитанными и эксперим.

M.A.

413

9. 1989, № 7

значениями $\omega_e x_e$ и α_e составляют 8,21 и 8,56% соответственно. Н. В. В.

сплен
чвол'

BF

(OM. 31880)

1988

Varada Rajulu A.,
Viswanath R., et al.,

nuop.
praeum Acta Phys. Hung. 1988, 63,
N 3-4, 243-247.

The Role OF Electronegativities
In The Calculation of Diato-
mic Molecular Parameters.

11 BF

DM. 32028

1989

10 BF

110: 162772v The millimeter and submillimeter-wave spectrum of boron monofluoride: equilibrium structure. Cazzoli, G.; Cludi, L.; Degli Esposti, C.; Dore, L. (Cent. Stud. Spettrosc. Microonde, Univ. Bologna, 40126 Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 134(1), 159-67 (Eng). Utilizing a d.c. discharge absorption cell the millimeter and submillimeter-wave spectra of ^{11}BF and ^{10}BF were obsd. in the $v = 0, 1, 2$ and $v = 0, 1$ vibrational states, resp. The Dunham consts. of the 2 isotopomers and the boron elec. nuclear quadrupole coupling const. as well as the spin-rotation interaction const. of boron and fluorine were detd. By removing from the Y_{01} Dunham const. the contributions due to the breakdown of the Born-Oppenheimer approxn., the resulting equil. bond distance is $r_e = 1.262672(7)$ Å.

M.N., 42

C.A. 1989, 110, N18

BF

DM 32028

1989

В 19 Б1222. Спектр монофторида бора в миллиметровой и субмиллиметровой области. Равновесная структура. The millimeter and submillimeter—wave spectrum of boron monofluoride. Equilibrium structure / Cazzoli G., Cludi L., Esposti C. Degli, Dore L. // J. Mol. Spectrosc.—1989.— 134, № 1.— С. 159—167.— Англ.

В миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах измерены вращат. переходы (включая СТС) молекул ^{11}BF и ^{10}BF в колебат. состояниях $v=0-2$. Молекулы BF получались в разрядном источнике постоянного тока, через к-рый прокачивалась смесь H_2/BF_3 (2,5:1, давл. $\sim 0,03$ мм). Значения B_e , коэф. Данхема Y_{01} , Y_{11} , Y_{21} , Y_{02} (в МГц): ^{11}BF —45477,03; 45470,929; —571,28; 1,921; —0,2130; ^{10}BF —48342,09; 48335,187; —626,10; 2,17; —0,2407. При анализе спектров параметр Y_{12} фиксировался и принимался равным $4,0 \cdot 10^{-4}$ МГц (данные неэмпирич. расчетов). Экспериментально определенная величина R_e для ^{11}BF и ^{10}BF равна, соотв., 1,2627564 и 1,2627619 А.

В. М. Ковба

М.А.

X. 1989, N 19

BF

Om 32028

1989

9 Л169. Миллиметровый и субмиллиметровый спектр монофторида бора: равновесная структура. The millimeter and submillimeter-wave spectrum of boron monofluoride: equilibrium structure / Cazzoli G., Cludi L., Esposti C. Degli, Dore L. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 134, № 1.— С. 159—167.— Англ.

Миллиметровый и субмиллиметровый спектры ^{11}BF и ^{10}BF изучены для колебательных состояний $v=0, 1, 2$ и $v=0, 1$ соответственно. В качестве источника излучения использовался клистрон (90 ГГц) с умножителем частоты до 6 гармоник. Приемником служил фотодетектор InSb при $t \approx 1,6$ К в сверхпроводящем магните. Наблюдались переходы с $I=0-6$, причем, переходы $I=1 \leftarrow 0$ (кроме ^{10}BF , $v=1$) показывают частично разрешенную сверхтонкую структуру, обусловленную как квадрупольным взаимодействием ядра В, так и спин-вращательным взаимодействием обоих ядер В и

М.А.

ф. 1989, № 9

F. Определены сверхтонкие константы основного со-
 стояния: $\chi(B) = -4,305(2)$ МГц, $C_I(B) = 16,6(2)$ кГц,
 $C_I(F) = 143(14)$ кГц и $\chi(B) = -8,88(1)$ МГц, $C_I(B) =$
 $= 5,2(6)$ кГц, $C_I(F) = 158(16)$ кГц для ^{11}BF и ^{10}BF
 соответственно. Величина вращательной константы B_e
 для ^{11}BF составила $45477,03(7)$ МГц, равновесная дли-
 на связи $r_e = 1,262672(7)$ Å. Б. С. Д.



BF

[om. 32740]

1989

Dingle T.W., Muzinaga S.,
et al.,

(15+) J. Comput. Chem. 1989, 10,
N 6, 753-769.

Contraction of the Well-Tem-
pered Gaussian ● Basis sets: The

First-Row Diatomic Molecules.



BF

1989

(112: 89360u Field and field gradient polarizabilities of fluoroboron (BF) and fluorocarbon ion (CF⁺). Pouchan, Claude (Lab. Chim. Struct., Univ. Pau Pays de l'Adour, 64000 Pau, Fr.). *J. Chim. Phys. Phys.-Chim. Biol.* 1989, 86(10), 2043-56 (Eng). The multipole moments and independent components of the α , β , A, C and B polarizability tensors have been calcd. for BF and CF⁺ at three different internuclear distances. These elec. properties and their derivs. were detd. by using the SCF wavefunction and large Gaussian basis sets including numerous diffuse orbitals. Most of the results, essentially for CF⁺, are new. Although the mol. polarizabilities tensors are of different orders of magnitude for BF and CF⁺ similar trends are obsd.

FROM NOME
PUYERWEN

(H) ~~CF~~ CF⁺

C.A. 1990, 112, N10

BF

1989

Wong Ming Wah,
Nobes Ross H. et al.

расчёт
сверхмалого
и до

J. Chem. Phys.
1989, 91(5), 2971-9.

(сер. ● N₂; III)

BF

1990

Ермилов А. Ю.,
Медведев Э. С. и др.

М. п. Оптика и спектроскопия. 1990. 69, № 3. С.
554-557.

(См. ● В. О; III)

BF

1990.

Мусалв Д.Т., Якобсон В.В.
и др.

и.п.
(обзор)

Молекуляр. структура,
Иваново, 1990. с. 18-24.

(сфер.  CN^- ; III)

BF

(PM-33709)

1990

Sara M., Leroy G.,
Henriet Ch.,

un.

J. Chim. Phys. Et Chim.
Biol. 1990, 87, n1, 1-11.

BF

(DM 35041) 1990

Scuseria G. E., Hamilton T. P.,
et al.,

Rb. rex.
pacrem

J. Chem. Phys., 1990, 92,
N1, 568-573.

An assessment for the full cou-
pled cluster ● method inclu-

ding all single, double, and triple excitations: The diatomic molecules LiH , Li_2 , BH , LiF , C_2 , BeO , CN^+ , BF , NO^+ , and F_2 .

BF

[DM 34717]

1990

Брицков А. Ю., Олсгверд Э. С.,
Несухин А. В.,

потенц.
кривые,
расчет.

Оптика и спектроскопия,
1990, 69, №3, 554-557.

BF

1991

Edspär R., Szabo Z.,

J. Mol. Struct. Theochem.
M.N. 1991, 227, C. 87-92.

● (all. HF; III)

BF⁺

1991

116: 183791q A new class of UV molecular ion spectra. Mueller, B.; Ottinger, C.; Rosmus, P. (Max-Planck-Inst. Stroemungsforsch., 3400 Goettingen, Germany). NATO ASI Ser., Ser. C 1991, 347(Fundam. Gas Phase Ion Chem.), 220-3 (Eng). Chemiluminescent emission was obsd. from 10 out of the 12 species AX⁺ with A = B, Al, Ga, In and X = F, Cl, Br; in most cases two or even three band systems could be identified. Broad quasicontinuum emission was obsd. The $^2\Sigma$ state, arising from A⁺(3P) + X(2P), into the $^2\Sigma$ ground state of AX⁺, having the dissoen. asymptote A⁺(1S) + X(2P). The excited state potential min. is shifted outward, with respect to that of the ground state, due to an avoided crossing.

(11)

спектр иониз.
хемилуминесценц,
помених. крив.
возбужд. и осн. сост.

С. А. 1992, 116, N 18

BCl⁺, BBr⁺, AlF⁺,
AlCl⁺, AlBr⁺, GaF⁺,
GaCl⁺, GaBr⁺, InF⁺, InCl⁺,
InBr⁺

BF

1992

Da Costa H.F.M.,
Simas A.M. et al.

Chem. Phys. Lett. 1992.

192, N2-3. C. 195-298.

ser. n.

(ccc.  N₂; III)

BF

1993

ab initio
 param
 resonant
 low. energy
 state

118: 243473r Theoretical study of the optical and generalized oscillator strengths for transitions between low-lying oscillator strengths for electronic states of the BF molecule. Honigmann, Michael; Hirsch, Gerhard; Buenker, Robert J. (Bergische Univ. - Gesamthochschule Wuppertal, Fachbereich 9 - Theor. Chem., Gausstrasse 20, W-5600 Wuppertal, 1 Germany). *Chem. Phys.* 1993, 172(1), 59-71 (Eng). Ab initio multireference single- and double-excitation CI (MRD-CI) calcns. are reported for the $X^1\Sigma^+$, $A^1\Pi$, B, $C^1\Sigma^+$ and $a^1\Pi$, b, $c^3\Sigma^+$ electronic states of BF. The electronic structure of this system is compared in detail with that of the isoelectronic CO mol., for which analogous CI calcns. were recently reported. The intensity distribution computed for the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ vibrational transitions shows that the relatively long progressions obsd. in the analogous portion of the CO spectrum are not present for BF. Anal. indicates that the reason for this distinction lies primarily in the widely differing characters of their resp. 6s MOs, of which the BF version is significantly more localized on its lighter atom than in the case for CO. Generalized oscillator strength calcns. verify trends obsd. in previous work with regard to the variation of this quantity as a function of the momentum transfer square of the impacting electrons for strongly dipole-allowed processes via a via nearly forbidden transitions, such as the B-X system of BF and CO.

C. A 1993, 118, N 24

FB

(CM. 37773)

1994

Boldyrev A.I., Gonzalez N.,
Simons F.,

15⁺,

D,

J. Phys. Chem., 1994,

журнал,
анотаци-
онный

98, N 40,

9931-44.

BF

1994

Schwerdtfeger P.,
Ischtwan Y.

(Ze, De,
ссыл. посыл.)
корреляция

THEOCHEM 1994,
112(1), 9-19.

● (ссыл. ВН; III)

BF

OM 37819

1995

122: 199867d Infrared emission spectroscopy of BF and AlF. Zhang, K. Q.; Guo, B.; Braun, V.; Dulick, M.; Bernath, P. F. (Cent. Molecular Beams, Laser Chem., Univ. Waterloo, Waterloo, ON Can. N2L 3G1). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 170(1), 82-93 (Eng). The high-resoln. IR emission spectrum of boron monofluoride was recorded with a Fourier transform spectrometer. There are 359 transitions of ^{11}BF with $v = 1 \rightarrow 0$ to $v = 5 \rightarrow 4$, and 94 transitions of ^{10}BF with $v = 1 \rightarrow 0$ to $v = 3 \rightarrow 2$ assigned. Improved Dunham Y_{ij} coeffs. for the ground $X^1\Sigma^+$ electronic state were detd. from the IR data combined with existing microwave data. The mass-reduced Dunham U_{ij} coeffs. were also obtained along with Born-Oppenheimer breakdown consts. An effective Born-Oppenheimer potential was detd. by fitting the available data to the eigenvalues of the radial Schrodinger equation contg. a parameterized potential function. Finally, the relative transition dipole moments of the major isotopomer ^{11}BF were also measured. For AlF, our previous measurements were extended to higher v and J , in order to obtain improved Dunham coeffs. and an improved internuclear potential.

Фурье ИК
спектр,
получен
Даркена

(H) ☒



AlF

C. A. 1995, 122, N 16

BF

[DM. 38532]

1996

Nulfov A.L.,

Konstantin,
russk., Chem. Phys. Lett., 1996,
номер. 263, 79-83.

BF

1997

128: 160406b Calculation of Franck-Condon factors for the two band-systems A ${}^1\Pi \rightarrow X {}^1\Sigma^+$ and b ${}^3\Sigma^- \rightarrow a {}^3\Pi$ of BF. Zhang, Zhongming; Xiong, Ye (Dep. Phys., Yunnan Univ., Kunming, Peop. Rep. China 650091). *Wuli Xuebao* 1997, 46(11), 2124-2129 (Ch), Kexue Chubanshe. From the nuclear Schroedinger equation of a diat. mol. with the vibration-rotational interaction term, we derived a wave function which is related not only to vibrational quantum no., but also to rotational one. The Franck-Condon factors of the two band-systems A ${}^1\Pi \rightarrow X {}^1\Sigma^+$ and b ${}^3\Sigma^- \rightarrow a {}^3\Pi$ of BF are calcd. using the derived wave function with the rotational quantum no. ranging from $J = 0$ to $J = 200$. The results obtained can be used in the cases under low- or high-temp. condition, and also that under the condition of strong shock wave.

факторы
 P-K.,
 A-X, B-a
 числен

CA. 1998, 128, N 13

BF⁻

1998

Li, Zhaolong, et al.,

функции
по метке.
значим
в осн. м.
сост.,
мюр.
расчет

Fenzi Kexue Xuebao
1998, 14(4), 242-247

(см. BF⁻; III)



BF

1998
Li, Zhaolong; et al.,

функции
потери.
жесткости
ОСН. Ж.СОМ;
теор. расчет

Fenzi Kexue Xuebao
1998, 14 (4), 242-247

(СМ. ● ВМ⁻, III)

BF

2001

135: 324385s Density functional theory predictions of anharmonicity and spectroscopic constants for diatomic molecules. Sinnokrot, Mutasem Omar; Sherrill, C. David. (Center for Computational Molecular Science and Technology, School of Chemistry and Biochemistry, Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA 30332-0400 USA). *J. Chem. Phys.* 2001, 115(6), 2439-2448 (Eng), American Institute of Physics. The reliability of d. functional theory and other electronic structure methods was examd. for anharmonicities and spectroscopic const. of the ground electronic states of several diat. mols. The equil. bond length r_e , harmonic vibrational frequency ω_e , vibrational anharmonicity $\omega_e x_e$, rotational const. B_e , centrifugal distortion const. D_e , and vibration-rotation interaction const. α_e were obtained theor. for BF, CO, N₂, CH⁺,

$r_e, \omega_e, \omega_e x_e,$
 $d_e, B_e, D_e -$
 theor. param.

CO, N₂, CH⁺, H₂

□ (+4)

C. A. 2001, 135, N22.