

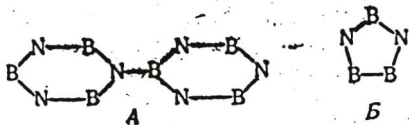
B-N

Содержание
бора.

Строение.

10 Б26. Энергия сопряжения и сравнительная устойчивость боразола и некоторых гетероциклических молекул, содержащих атомы бора и азота. Бочвар Д. А., Багатурьянц А. А. «Изв. АН СССР. Отд. хим. н.», 1963, № 5, 785—788

Методом МО ЛКАО с учетом перекрывания рассчитаны некоторые гетероциклич. молекулы, содержащие атомы В и N. В основу расчета положены результаты Рутана и Мулликена (Roothaan C. C. I., Mulliken R. S., «J. Chem. Phys.», 1948, 16, № 2, 118). Для некоторых из них получены также молекулярные диаграммы. Проведено в рамках метода МО ЛКАО сравнение рассчитанных гипотетич. молекул с боразолом. Показано, что молекулы со строением (А) и (Б) (у всех атомов имеются внециклич. σ -связи, которые здесь не указаны)



X. 1964. 10

Сол. Ифед

имеют не только значительную энергию сопряжения, но и обладают замкнутой электронной оболочкой в смысле Хюккеля, так как в таких молекулах полностью заняты только те МО, уровень энергии которых лежит ниже кулоновского интеграла азота. В связи с этим указано на возможность осуществления синтеза таких молекул.

Реферат авторов



1964

B-N

cb. 236

un. used.

Force constants of various boron-nitrogen compounds. Josef Goubeau (Tech. Hochschule, Stuttgart, Ger.). *Advan. Chem. Ser.* 42, 87-94(1964). Force consts. of various types of B-N compds. were calcd. from the vibrational spectra on the basis of a valence force model. The force const., k_{BN} , of amine boranes was ~ 3.5 millidynes/A., whereas for aminoboranes a value of 7.0 millidynes/A. was obtained. For borazines, calcd. values for k_{BN} range from 5.7 to 6.3 millidyne/A. Some general features of the force consts., e.g., their utilization to evaluate bond orders, are discussed.

RCBJ

C.A. 1964.60.9

10189 a

1964

B-N
ch36

Theoretical investigations on boron-nitrogen molecules. Roald Hoffmann (Harvard Univ.). *Advanc. Chem. Ser. No. 42*, 78-86(1964). A method previously applied to the study of hydrocarbon conformations is here used to investigate a variety of conformational problems in B-N chemistry. Barriers and isomerization energies as well as charge distributions are presented for many simple B-N mols. of the borazane, aminoborane, and borazarobenzene types. The usual resonance picture of the B-N bond is highly misleading, and the N always carries a larger neg. net charge.

RCBJ

C.A. 1964. 60. 9
10189cd

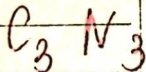
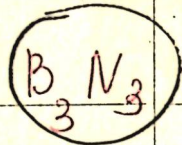
B-N

1987

44372f The BN principal bands in the infrared spectra of N-H-borazine derivatives. A. Meller, H. Marecek, and H. Batka (Tech. Hochsch., Vienna). *Monatsh Chem.* 98(6), 2135-7 (1967)(Ger). The position of the BN main band in the ir spectra of several N-H-borazines is discussed. RCQO

C. A. 1988. 68. 10

1968



centrifuge

((110026v) Structures of C_6 , B_3N_3 , and C_3N_3 ring compounds. Bauer, S. H.; Katada, Kinya; Kimura, Katsumi (Cornell Univ., Ithaca, N.Y.). *Struct. Chem. Mol. Biol.* 1968, 653-70 (Eng). Edited by Rich, Alexander. W. H. Freeman and Co.: San Francisco, Calif. Changes in size and shape of six-membered rings that were due to the substitution of F atoms for H atoms were considered. Here the authors suggested another measure of the extent of delocalization of the π -electrons: the degree of retention of structural integrity of the ring in the presence of perturbing substituents. A related effect, but one that is not as straight-forward to interpret, is the extent of contraction of C-F or B-F bond lengths due to substitution of F for H on other atoms in the ring.

N. C. Das

+2

C.A. 1968. 69. 26



B-N

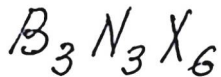
1980

измерен
энергия

94: 71730q Bond energy of boron nitride in a molecular approximation. Osinovskaya, T. I. (Inst. Fiz. Tverd. Tela Poluprovodn., Minsk, USSR). *Fiz., Tekhnol. Proizvod. Poluprovodn. Prib., Mater. Resp. Konf. Molodykh Uch.* 1980, 2, 35-6 (Russ). Akad. Nauk Litov. SSR, Inst. Fiz. Poluprovodn.: Vilnius, USSR. The bond energy of B-N was calcd. by assuming spheric symmetry of at. ds. and by using the computer calcn. method of T. D. Sokolovskii (1980). It is 132.7 kcal/mol.

Бор N

C. A. 1981.94, N10



X = газолет.

ссыл. посыл.
спектр.

[Ommuck 12847] 1980.

Subbedar M.K.,
et al.

Indian J. Pure
and Appl. Phys.,
1980, 18, N6, 396-400.

● (ссыл. $H_3B_3N_3H_3$; III)

В-Н соединен.

1982

струк. Цо,
геометр., ΔH_f

(обзор)

9 Д37. Квантовохимическое исследование основных состояний группы ненасыщенных боразотных соединений методом МПДП. Ч. 1. Геометрия и стабильность. Quantum study of the ground state of a series of unsaturated boron—nitrogen compounds by the MNDO method. I. Geometries and stabilities. Maouche Boubekr, Gayoso José. «Int. J. Quantum Chem.», 1983, 23, № 3: Proc. 4 Int. Congr. Quantum Chem., Uppsala, 13—20 June, 1982. Contrib. Pap., Pt, 3, 891—904 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении МПДП исследовано электронное строение 19 соединений, содержащих 2—6 атомов В, С и N (2 и 3 атома — линейные, 3—6 атомов — циклические). Проведена полная оптимизация геометрии. Приведены геометрия, теплоты образования и атомизации, энергии разделения связей и гидрогенизации. Большой барьер вращения в иминоборане H_2BNH_2 (30,6 ккал/моль) и длина связи BN в иминоборане $HBNH$ (1,183 Å) свидетельст-

р. 1983, 18, № 9

вуют, что связи в этих молекулах двойная и тройная соответственно. Из трех изомерных боразинов наиболее стабилен содержащий двойную связь $C=N$. В гетероциклах с нечетным числом атомов стабильность растет с ростом числа атомов В. Правило $4n+2$ Хюккеля оказалось непригодным для предсказания ароматичности боразотных соединений. Связь NN найдена более реакционноспособной, чем ВВ. Обсуждено альтернирование связей в боразотных аналогах фульвена. В. Л. Лебедев

B-N

1982

97: 28719t Quantization of bonding characteristics of nitrogen-silicon bonds in silatrane and nitrogen-boron bonds in boratrane. Yu, Jianguo; Liu, Ruozhuang (Dep. Chem., Beijing Norm. Univ., Beijing, Peop. Rep. China). *Kexue Tongbao* 1982, 27(10), 603-6 (Ch). The bonding characteristics in silatrane and boratrane compds. were studied by EHMO, CNDO/2 and ab initio methods. The electron configurations of B, N, Si, and the bond energies for B-N, B-O, Si-N and Si-O were given.

Купил
книгу

(73) 

C.A. 1982, 97, N 4

B-N

1984

9 B1046. Улучшенные расчеты с орбиталями связей барьеров вращения и геометрической изомерии. Improved bond-orbital calculations of rotation barriers and geometrical isomerism. Musso Gian Franco, Mag-nasco Valerio. «Mol. Phys.», 1984, 53, № 3, 615—630 (англ.)

Для 19 молекул со связями B—N, C—C, C—N, C—O, N—N, N=O, O—O выполнены расчеты барьеров внутреннего вращения, а для 3 молекул со связью N=N — разности энергий геометрич. изомеров и проведен анализ вкладов в рассматриваемую энергию. Вычисления выполнены с неортогональными орбиталями, имеющими смысл орбиталей остова, неподеленных пар, связей и т. д., построенными с миним. базисом ОСТ-3ГФ. По минимуму энергии определены параметры гибридизации и полярности орбиталей. В рамках теории возмущений 2-го порядка учтены корреляц. поправки, из к-рых важнейшими являются возбуждения с занятых

X (7)

X. 1985, 19, № 9

орбиталей связей на соотв. разрыхляющие орбитали. Проведено разбиение полной энергии на вклады и для одноконфигурац. составляющей, и для поправок теории возмущений. Предложена классификация молекул по таким структурным характеристикам как неподеленные пары и двойные связи, что позволяет установить корреляцию с энергетич. вкладами. А. В. Немухин

B-N

1984

5 Д47. Улучшенные расчеты методом орбиталей связей для вращательных барьеров и геометрического изомеризма. Improved bond-orbital calculations of rotation barriers and geometrical isomerism. Musso Gian Franco, Magnasco Valerio. «Mol. Phys.», 1984, 53, № 3, 615—630 (англ.)

Неэмпирически в рамках метода орбиталей связей рассчитаны вращательные барьеры в 19 молекулах с единственным углом внутреннего вращения вокруг центральной связи $B-N$, $C-C$, $C-N$, $C-O$, $N-N$, $N-O$, $O-O$, а также геометрии изомеризма в 3 молекулах с двойной связью $N=N$. Начальное приближение, в котором химич. группы в молекулах описываются в терминах неортогональных ССП орбиталей связей, сконструированных из энергетически-оптимизированных полярностей, и параметров гибридизации связей, уточняется введением однократных возбуждений со связывающих орбиталей на разрыхляющие и учетом обмена, включающего индукцию (поляризацию и делокализацию), в рамках теории возмущений второго порядка. Данные, полученные в базисе ОСТ—ЗГФ, согласуются с экспе-

теор.
расчет

ⓧ (47)

фр. 1985, 18,
15

риментом и соответствующими расчетами ССП МО в том же базисе. Установлена четкая корреляция между вращательными барьерами и химич. структурой, причем в зависимости от структуры барьеры могут быть обусловлены стерич. взаимодействиями (отталкиванием Паули), либо конкуренцией между отталкиванием Паули 1-го порядка и характеристич. делокализацией геминальных $\sigma-\sigma^*$ -орбиталей 2-го порядка, либо значительной делокализацией вицинальных $\pi-\pi^*$ -орбиталей, либо, наконец, конкуренцией всех рассмотренных эффектов.

Н. В. В.

He BN 1988
Ar BN Franking Gernot,
Koch W., et al.

Себастьян. J. Am. Chem. Soc.
Себрукт. 1988, 110 (24),
8007-16.

●
(ср. He BeO; III)

NBN³⁻

(OM 32059)

1989

PyyKKO P.,

Chem. Phys. Lett.,

1989, 156, N4, 337-340.

(r, Di)
ab initio

B_2N

BN_2

ab initio
calculations,
Vi, Do,

1989
Martin J. M. L.,
Francois J.-P. et al.

J. Chem. Phys. 1989,
90 (11), 6469-85.

(see B_3 ; III)

NH₄ BH₄

1990

7 Б1061. Теоретическое исследование структурной нежесткости, стабильности и водородной связи в молекулах гидридных и гидрид-фторидных солей DX_4AY_4 ($D=N$ и P , $A=B$ и Al , $X=H$ и $Y=H$ и F) / Баранов Л. Я., Чаркин О. П. // Ж. неорганич. химии.— 1990.— 35, № 11.— С. 2888—2898.— Рус.

Выполнены неэмпирич. расчеты $ССП/3-21Г+3d(Al, P)$ с частичной оптимизацией геометрии молекул $DX_4AY_4 = NH_4BH_4$, NH_4AlH_4 , PH_4BH_4 , PH_4AlH_4 , NH_4BF_4 , NH_4AlF_4 и PH_4BF_4 при различных взаимных ориентациях тетраэдрич. катионов и анионов. Сделан вывод о структурной нежесткости этих молекул по отношению к внутримолек. вращениям катиона и аниона с барьерами порядка нескольких ккал. Приведены оценки энергий распада $DX_4AY_4 \rightarrow DX_3 + XY + AY_3$ этих солей. Гидриды энергетически нестабильны, а гидрид-фториды стабильны к данному распаду. Обсуждена роль вз-вий $D-H \dots H-A$ в гидридах $DH_4^+AH_4^-$ и $D-H \dots F-A$ в гидрид-фторидах $DH_4^+AF_4^-$.

Резюме

М.П.

46

X. 1991, № 7

NBN 3-

1990

Pyykkö Pekka.

Ann. acad. sci. fenn.

M. n. Ser. A2. 1990. N 227.

C. 187.

(C. 187. ● C_2^{2-} ; $\overline{III}$)

H_2BNH_2 1990
 $NBNH$ Sana M., Leroy G.,
et al.

M.R. J. Chim. Phys. et Phys.-
-chim. Biol. 1990. 87,
N^o. C. 1-11.

(Ces. ● M_2BBM_2 ; III)

BN_4^-

1991

Ryykkö Pekka, Runeberg Nino.

расположение
катиона,
структура

J. Mol. Struct. Theochem.
1991. 234. С. 279-290.

(сер. $\bullet$ OCNCO^+ ; III)

ВНВ

1992

№ 14 Б1033. Изучение соединений $^{11}\text{B}^{14}\text{N}^{11}\text{B}$ и $^{10}\text{B}^{14}\text{N}^{11}\text{B}$ методом ЭПР в матрице и теоретически; получение испарением под действием лазера. Matrix isolation ESR and theoretical investigations of $^{11}\text{B}^{14}\text{N}^{11}\text{B}$ and $^{10}\text{B}^{14}\text{N}^{11}\text{B}$: laser vaporization generation / Knight Lon B., Hill Devon W., Kirk T. J., Arrington C. A. // J. Phys. Chem.— 1992.— 96, № 2.— С. 555—561.— Англ.

Описан метод получения радикалов $^{11}\text{B}^{14}\text{N}^{11}\text{B}$ и $^{10}\text{B}^{14}\text{N}^{11}\text{B}$ при испарении тв. нитрида бора под действием лазерного излучения. Полученные радикалы изолированы в матрицах Ne, Ar и Kr при 4 К и для них сняты спектры ЭПР. Проведено теор. изучение электронной структуры полученных радикалов методом ССП и по теории возмущений (ТВ) Меллера-Плессета 2-го и 4-го порядков. Расчет проведен в базисе 6—31 G. Методы ССП и ТВ второго порядка приводят

М.П.

Х. 1992, № 14

к потенциальным поверхностям с двумя минимумами, а ТВ 4-го порядка — с одним. Наиболее точный расчет приводит к линейной равновесной конфигурации с основным электронным состоянием симметрии $^2\Sigma_u$. Рассчитан А-тензор, определяющий сверхтонкие ядерные взаимодействия, при этом теор. результаты хорошо согласуются с эксперим. Найдено, что неспаренный электрон локализован в основном на *sp*-орбиталях двух атомов бора. Магнитные параметры изученных радикалов в различных матрицах очень близки. Для случая неоновой матрицы при 4 К они равны (в МГц): $g_{\parallel} = 2,0020(4)$, $g_{\perp} = 2,0011(3)$; $A_{\parallel} = 434(1)$, $A_{\perp} = 485(2)$ для ^{11}B ; $|A_{\parallel}| \leq 3$, $|A_{\perp}| = 20(1)$ для ^{14}N . Библи. 31.

В. Б. Павлов-Веревкин

B_2N , B_2N^+ , B_2N^- , B_2N_2

1992

ЗБ1084. Структура, стабильность и инфракрасный спектр B_2N , B_2N^+ , B_2N^- , BO , B_2O и B_2N_2 . The structure, stability, and infrared spectrum of B_2N , B_2N^+ , B_2N^- , BO , B_2O and B_2N_2 /Martin J. M. J., Francois J. P., Gijbels R. //Chem. Phys. Lett. .—1992 .—193 ,№ 4 .—С. 243—250 .—Англ.

Рассчитаны структуры, ИК-спектры и теплоты образования молекул B_2N , B_2N^+ , B_2N^- , BO , B_2O и B_2N_2 . Геометрич. параметры оптимизированы при расчете методом ССП в базисе 6-31ГФ*. Относит. стабильности структур рассчитаны квадратичным методом конфигурац. вз-вия. Для наиболее стабильных структур вычислены колебат. частоты по теории возмущений Меллера — Плессета второго порядка. Энергии атомизации BO , B_2O и B_2N составили 193,1, 292,5 и 2225,0 ккал/моль соотв. Потенциал ионизации и сродство к электрону B_2N равны 8,62 и 3,34 эВ соотв. Библ. 51. А. А. Сафонов

М.П.



(+2)

Х. 1994, №3

B_2N , B_2N^+ ,
 B_2N^- , B_2N_2

1992

1992

структура,
 стабильность,
 ИК спектр,
 Дано: Ac ,
 Do , Fe , $ab initio$
 ИК спектр
 С. А. 1992, 117, N 10

117: 97794g The structure, stability, and infrared spectrum of boron nitrides (B_2N , B_2N^+ , B_2N^- , B_2N_2) and boron oxides (BO , B_2O). Martin, J. M. L.; Francois, J. P.; Gijbels, R. (Dep. SBG, Limburgs Univ. Cent., 3590 Diepenbeek, Belg.). *Chem. Phys. Lett.* 1992, 193(4), 243-50 (Eng). The structure, IR spectrum, and heat of formation of B_2N , B_2N^- , BO , and B_2O have been studied by ab initio calcs.. B_2N is very stable; B_2O even more so. B_2N , B_2N^- , B_2O , and probably B_2N^+ have sym. linear ground-state structures; for B_2O , an asym. linear structure lies about 12 kcal/mol above the ground state. B_2N^+ , B_2N^- and B_2O have intense asym. stretching frequencies, predicted near 870, 1590, and 1400 cm^{-1} , resp. The predicted harmonic frequencies and isotopic shifts for B_2O confirm the recent exptl. identification by Andrews and Burkholder. Absorptions at 1889.5 and 1998.5 cm^{-1} in noble-gas trapped boron nitride vapor belong to the BNB and BBN ($^3\Pi$), resp.; a tentative assignment of 882.5 cm^{-1} to BNB+ is proposed. Total atomization energies $\sum D_0$ ($\sum D_0$) are computed (accuracy ± 2 kcal/mol) as: BO 193.1 (190.4), B_2O 292.5 (288.7), B_2N 225.0 (250.3) kcal/mol. The ionization potential and electron affinity of B_2N are predicted to be 8.62 ± 0.1 and 3.34 ± 0.1 eV. The MP4-level additivity approxns. involved in G1 theory results in errors on the order of 1 kcal/mol in the $\sum D_0$ values.

B₁₂ N₁₂

1993

Jensen Frank,
Taftlund Hans.

структура

и

стабильны.

Chem. Phys. Lett.
1993, 201 (1-4), 89-96.

(ср. C₂₄ ; III)

B₃N

1993

118: 87924f The structure, energetics, and harmonic vibrations of boron nitride (B₃N). Slanina, Zdenek; Martin, Jan M. L.; Francois, Jean-Pierre; Gijbels, Renaat (Limburgs Univ. Cent., Dep. SBG, Univ. Campus, 3590 Diepenbeek, Belg.). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 201(1-4), 54-8 (Eng). The structure, energetics, and harmonic vibrations of B₃N were calcd. at a correlated, ab-initio level. The lowest potential-energy structure found exhibited a linear BBNB arrangement, followed by a D_{3h} structure sepd. by about 60 kJ/mol. C_{2v} And linear BBBN configurations are still higher in energy, so that they are located above triplet min.-energy structures. The predicted IR lines only partly match the available obsd. matrix data.

copy copy,
Do, Pi

C.A. 1993, 118, N 10

B₃N

1993

120: 62939t On the relative stabilities of the linear and triangular forms of boron nitride (B₃N). Slanina, Zdenek; Martin, Jan M. L.; Francois, Jean-Pierre; Gijbels, Renaat (Limburgs Universitair Centrum, Departement SBG, Universitaire Campus, B-3590 Diepenbeek, Belg.). *Chem. Phys.* 1993, 178(1-3), 77-82 (Eng). The two recently elucidated isomers of B₃N lowest in energy, the singlet linear (¹Σ⁺) and triangular (¹A₁) structures, are studied further. The all-electron limited CI method with all single and double excitations (CISD), quadratic CI with all singles and doubles (QCISD), and with a quasiperturbative treatment of higher excitations (QCISD(T)) are used together with a no. of basis sets of the Pople family. Using std. G1 theory, the total atomization energy ΣD₀ for the linear structure is found to be 1397 kJ/mol, which means the mol. is quite stable with respect to fragmentation. The X¹Σ⁺ state has two intense IR bands in the 1100-1200 and 2000-2100 cm⁻¹ ranges and should be observable; isotopic substitution data have been given. The inter-isomeric thermodyn. is described using the best computed parameters, and it is shown that even at high temps. the triangular form should represent at most about 3% of the B₃N system.

смаз убох,
смаз убох

C.A. 1994, 120, N 6

1994

1 Б1049. Структура, энергетика и гармонические колебания B_3N и BN_3 . The structure, energetics, and harmonic vibrations of B_3N and BN_3 /Martin Jan M. L., Slanina Zdeněk, François Jean-Pierre, Gijbels Renaat //Mol. Phys. .—1994 .—82, № 1 .—С. 155—164 .—Англ.

Методом связанных кластеров исследована потенциальная поверхность молекулы BN_3 . Показано, что в основном состоянии молекула линейна $NNBN$ ($^1\Sigma^+$). Методом связанных кластеров с учетом трехкратно возбужденных конфигураций (СКТ) и использованием расширенных базисных наборов АО рассчитаны частоты гармонич. колебаний молекул B_3N и BN_3 . Показано, что равновесные структурные параметры и частоты колебаний молекулы BN_3 очень чувствительны к методу учета электронной корреляции. В приближении СКТ в трехэкспонентном базисе, дополненном двумя наборами поляризац. ф-ций частоты колебаний и изотопные сдвиги хорошо согласуются с экспериментом. Наилучшие оценки энергий атомизации молекул B_3N и BN_3 составляют 337,6 и 378,8 ккал/моль соотв.; основные каналы распада: $B+B_2N$ и $BN+N_2$.
Е. А. Рыкова

BN_3
 B_3N

М.П.

Х. 1995, №1

B_3N
 BN_3

1994

121: 43233n The structure, energetics, and harmonic vibrations of B_3N and BN_3 . Martin, Jan M. L.; Slanina, Zdenek; Francois, Jean-Pierre; Gijbels, Renaat (Dep. SBG, Limburgs Univ. Centrum, B-3590 Diepenbeek, Belg.). *Mol. Phys.* 1994, 82(1), 155-64 (Eng). The potential energy surface of the BN_3 mol. was explored using coupled cluster methods. It is shown unambiguously that the ground state is linear $NNBN(^1\Sigma^+)$. Harmonic frequencies for B_3N and BN_3 were computed using extended basis sets and coupled cluster methods including triple excitations (CCSD(T)). Computed frequencies and geometry for BN_3 are very sensitive to the electron correlation method. CCSD(T)/TZ2P frequencies and isotope shifts for BN_3 are in excellent agreement with expt. Best ests. for the total atomization energies (ΣD_0) of B_3N and BN_3 are 337.6 and 378.8 kcal mol⁻¹, resp. Preferred fragmentation channels are into $B + B_2N$ and $BN + N_2$, resp.

структура,
стабильность,
и, тепло-распад

C.A. 1994, 121, N4

BN₂

1994

1994

121: 18539j Ab initio study of the spectroscopy, kinetics, and thermochemistry of the BN₂ molecule. Martin, Jan M. L.; Taylor, Peter R.; Franois, J. P.; Gijbels, R. (Departement SBG,

Limburgs Universitair Centrum, Universitaire Campus, 3590 Diepenbeek, Belg.). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 222(5), 517-23 (Eng). Several low-lying structures and electronic states of the BN₂ mol. have been studied using complete active space SCF, multireference averaged coupled-pair functional (ACPF), and coupled-cluster (CCSD(T)) methods. BNN(²Π) and BN₂(²A₁) are very close together in energy: at the ACPF level, the sepn. is 2.8 kcal/mol. The potential surface for the transition between these structures appears to have a significant energy barrier, so it is surprising that the ²A₁ state has not yet been obsd. Conversely, the low-lying BN₂(²B₂) state has a very low barrier towards dissocn., which explains why it has not been obsd. The sym. linear species NBN(²Π), on the other hand, is substantially higher in energy, but has a very large barrier towards dissocn. and is therefore obsd. exptl. At the highest level of theory, the ground BNN(²Π) state is nearly isoenergetic with B(²P)+N₂(X ¹Σ⁺).

ab initio
param. u.n.,
m.x.

C.A. 1994, 121, N2

BN₂

1994

5 B1052. Неэмпирическое изучение спектроскопии, кинетики и термохимии молекулы BN₂. Ab initio study of the spectroscopy, kinetics, and thermochemistry of the BN₂ molecule /Martin Jan M. L., Taylor Peter R., Francois J. P., Gijbels R. //Chem. Phys. Lett. .—1994 .—222 ,№ 5 .—С. 517—523 .—Англ.

Методами ССП в полном активном пространстве, усредненного функционала связанных пар с несколькими исходными конфигурациями и методом связанных кластеров (с учетом одно-, двух- и частично трехкратных возбуждений) исследованы низколежащие структуры и электронные состояния молекулы BN₂. Показано, что молек. линейная структура основного состояния BNN (²π) и циклич. структура BN₂ в состоянии ²A₁ очень близки по энергии и разделены значит. энергетич. барьером. На самом высоком уровне расчета структура BNN (²π) является изоэнергетич. с продуктами диссоциации B (²P) + N₂

И.А.

X.1995, N5

($X^1\Sigma^+$). Найдено также, что для молек. структуры BN_2 в состоянии 2B_2 барьер диссоциации очень низок, в то время как для более высокоэнергетич. симм. линейной структуры NBN ($^2\pi$) барьер, препятствующий диссоциации молекулы, является очень высоким.

Н. С.



(BN)₂

(BN)₃

1994

14 Б1045. Структура и устойчивость микрокластеров [нитрида бора] BN. Неэмпирический расчет (BN)_n (n=2—4). Structure and stability of BN microclusters: Ab initio calculations for (BN)_n (n=2—4) / Sutjianto Amin, Pandey Ravindra, Recio J. Manuel // Int. J. Quantum Chem. — 1994. — 52, № 1. — С. 199—210. — Англ.

Неограниченными методами ХФ и МП2 исследованы кластеры (BN)_n с n=2—4. Показано, что линейная и ромбич. формы (BN)₂ являются почти изоэнергетическими, в то время как циклич. форма предпочтительна для кластеров (BN)₃ и (BN)₄, при этом для линейных изомеров характерно триплетное спиновое состояние, для циклич. изомеров — синглетное. Степень полярности связи В—N увеличивается с увеличением размера кластера. Найдено также, что нейтр. кластеры (BN)_n имеют структурные конфигурации, тождественные соответствующим структурам C_{2n}.

Н. С.

структура

X. 1995, N 14

$(BN)_n$

$n = 2 \div 4$

структура

аб иницио
расчет

С.А. 1994, 121, № 20

1984

121: 238775y Structure and stability of BN microclusters: ab initio calculations for $(BN)_n$ ($n = 2-4$). Sutjianto, Amin; Pandey, Ravindra; Recio, J. Manuel (Physics Dep., Michigan Technological Univ., Houghton, MI 49931 USA). *Int. J. Quantum Chem.* 1994, 52(1), 199-210 (Eng). UHF calcns., coupled with MP2 correlation corrections, were done to study the structures and energetics of microclusters. For $(BN)_2$, linear and rhombus forms are almost isoenergetic; whereas, cyclic forms are preferable for the $(BN)_3$ and $(BN)_4$ clusters. As a general trend, linear isomers prefer the triplet spin state; whereas, cyclic isomers prefer the singlet spin state. Total charge-d. plots show a strong dominance of the B-N bond, indicating that the extent of its polar character becomes stronger with increase in the cluster size. The loss of a BN monomer is shown to be the most likely fragmentation channel for both neutral and singly-ionized clusters. This similarity follows the isoelectronic principle, and is of importance due to recent interest in the investigations of BN fullerene analogs.

B-N

1995

Diaz F., Guillermo;
Campos V., Marcelo; et al.,

Vib. Spectrosc., 1995,
9(3), 257-64.

(D)

(all. Re-N;  III)

1995

21 Б141. Структура и термохимия B_3N_3 и B_4N_4 . Struc-

tures and thermochemistry of B_3N_3 and B_4N_4 / Martin Jan M. L., El-Yazal Jamal, Francois Jean-Pierre, Gijbels Renaat // Chem. Phys. Lett. — 1995. — 232, № 3. — С. 289—294. — Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в расширенных гауссовых базисах с учетом электронной корреляции методами связанных кластеров и включением возбуждений вплоть до трехкратных исследовано электронное строение B_3N_3 (I) и B_4N_4 (II). Основными состояниями являются состояния $^1A'$ и 1A_g с моноклинной структурой, одинаковыми длинами связей кумуленового типа и чередующимися углами (угол BNB меньше, чем угол NBN). Стабильными, но менее выгодными являются линейные структуры BNBNBN (BN) в состоянии $^3\Pi$ с альтернирующими связями полиенового типа. Энергии атомизации I и II оценены в 697,0 и 995,6 ккал/моль соответственно. Рассчитаны положения полос в ИК-спектрах.

Н. Л.

М.Л., ΔH_f

XII (11)

X 1995, № 21

 B_3N_3 , B_4N_4 (ΔH_f)

DM. 37 966

1995

123: 155131a The structure and energetics of B_3N_2 , B_2N_3 , and BN_4 . Symmetry breaking effects in B_3N_2 . Martin, Jan M. L.; El-Yazal, Jamal; Francois, Jean-Pierre; Gijbels, Renaat (Department SBG, Limburgs Universitair Centrum, B-3590 Diepenbeek, Belg.). *Mol. Phys.* 1995, 85(3), 527-37 (Eng). The structures of B_3N_2 , B_2N_3 , and BN_4 were studied using complete active space SCF (CASSCF) and augmented coupled cluster (CCSD(T)) methods. B_3N_2 has a symmetry-broken linear ground state structure $BNBNB(^2\Sigma^+)$ and is very stable. B_2N_3 has a linear ground state structure $BNBNN(^2\pi)$ and is nearly isoenergetic with its (thermodynamically preferred but symmetry forbidden) dissociation products $BNB(^2\Sigma_g^+)$. BN_4 has the ground state structure $NNBNN(^2\pi_g)$ that is symmetry broken at the CCSD(T), but sym. at the CASSCF level. Predictions for the IR spectrum of the species involved were given. The best computed total atomization energies ΣD_0 (error bar ± 4 kcal mol $^{-1}$) are: B_3N_2 , 504.6 kcal mol $^{-1}$; B_2N_3 , 479.1 kcal mol $^{-1}$; and BN_4 , 460.8 kcal mol $^{-1}$.

B_3N_2
 B_2N_3
 BN_4
 sat H & cmat
 (comp-ra)
 prop. part

C.A. 1995, 123, N12

By Na4

1996

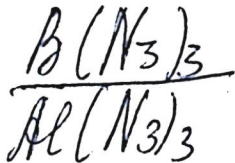
Jiang, Xin-Tian, et al.,

ab initio
param
emp-M, P_i

Chin. J. Chem. 1996, 14 (6),
490-496.

(Cell. ● Na8; III)

1996



127: 312589h Low temperature matrix isolation studies of $B(N_3)_3$ and $Al(N_3)_3$. Linnen, C. J.; Gilbert, J. V. (Department of Chem. & Biochem., University of Denver, Denver, CO 80208 USA). *Int. Conf. Low Temp. Chem.*, 2nd 1996, 143-144 (Eng). Edited by Durig, James R.; Klabunde, Kenneth J. BkMk Press: Kansas City, Mo. A method is described for the prepn. of low-temp. Ar matrixes contg. the title (not particularly stable) compds. The IR spectra of these samples is presented and discussed.

UK 6

R

manuscript

(11)

C. A. 1997, 127, N 22

1996

OF 38204

F: B3N3

P: 3

97. 13B150. Структура и колебания [кластеров] $B[n]N[n]$ ($n=3-10$). [Расчет методом функционала плотности]. Structure and vibrations of $B[n]N[n]$ ($n=3-10$) / Martin Jan M. L., El-Yazal Jamal, Francois Jean-Pierre // Chem. Phys. Lett. - 1996. - 248, N 1 - 2. - С. 95-101. - Англ.

РМХ 1997

B_2N^- (Om. 39929) 1999

Knut L. Asmis et al;

J. Chem. Phys., 1999,
III, N19, 8838-8851

Anion photoelectron spectroscopy of $B_2 \bullet N^-$.

F: B2N

P: 3

132:143908 Anion photoelectron spectroscopy of small boron nitride clusters: adiabatic detachment energies and vibrational frequencies of low-lying electronic states in B2N and B3N. Asmis, K. R.; Taylor, T. R.; Neumark, D. M. Department of Chemistry, University of California Berkeley, CA 94720, USA Eur. Phys. J. D, 9(1-4), 257-261 (English) 1999 Vibrationally resolved photoelectron spectra of B2N- and B3N- at 266 nm are reported. The spectroscopy of B3N was studied exptl. The spectral detn. of adiabatic detachment energies

C.A. 2000, 132

and vibrational frequencies for several low-lying electronic states of the neutral species. Both ground state anions have linear geometries. For B2N- transitions to 2 electronic states of the neutral are obsd. The electron affinity of B2N (X2.SIGMA.u is 3.098 .+- . 0.010 eV. The term energy of the electronically excited st (A2.SIGMA.g+) is 0.785 eV. Transitions to 3 electronic states of B3N are obsd., of which the 1st 2 show vibrational structure. The adiabatic detachment energies for these 2 states are 2.919 and 3.062 eV. Preliminary calcns. indicate that the photodetachment transition between the electron ground states of B3N- and B3N is spin-forbidden and not obsd. in the spec

F: B3N

P: 3

132:143908 Anion photoelectron spectroscopy of small boron nitride cluste adiabatic detachment energies and vibrational frequencies of low-lying electronic states in B2N and B3N.

Asmis, K. R.; Taylor, T. R.;
Neumark, D M. Department of Chemistry, University of
California Berkeley, CA 94720, USA Eur. Phys.

J. D, 9(1-4), 257-261 (English) 1999 Vibrationally resolved photoelectron spectra of B2N- and B3N- at 266 nm are reported. The spectroscopy of B3N was studied exptl. The spectra al detn. of adiabatic detachment

C.A. 2000, 132

energies and vibrational frequencies for several low-lying electronic states of the neutral species. Both ground state anions have linear geometries. For B2N-transitions to 2 electronic states of the neutral are obsd. The electron affinity of B2N ($X2.SIGMA.u$) is 3.098 $\pm$ 0.010 eV. The term energy of the electronically excited st ($A2.SIGMA.g+$) is 0.785 eV. Transitions to 3 electronic states of B3N are obsd., of which the 1st 2 show vibrational structure. The adiabatic detachment energies for these 2 states are 2.919 and 3.062 eV. Preliminary calcns. indicate that the photodetachment transition between the electron ground states of B3N- and B3N is spin-forbidden and not obsd. in the spec

F: B2N-

P: 3

1999

132:28079

Anion photoelectron spectroscopy of B2N-

Asmis, Knut R.; Taylo Travis R.; Neumark, Daniel

M. Department of Chemistry, University of Cali

Berkeley, CA, USA

J. Chem. Phys., 111(19),

8838-8851 (English) 1999

Vibrationally resolved 355

and 266 nm anion photoelectron spectra of B2N are

presented. Photodetachment to two electronic states of

linear B-N-B obsd. and, aided by electronic structure

calcns., assigned to the X 1.SIG 2.SIGMA.u++e- and X

1.SIGMA.g+ A 2.SIGMA.g++e- transitions. The electron

affinity of B2N is 3.098 .+- . 0.005 eV and the A

2.SIGMA.g+ term energy T 0.785 .+- . 0.005 eV.

Observation of excitations involving uneven quanta

antisym. stretching mode (v3) indicates a breakdown of

the Franck-Condon approxn. and results from Herzberg-

Teller vibronic coupling between the X 2.SIGMA.u+ and A

C. A. 2000, 132

2.SIGMA.g+ states involving the v3 mode. Measurement of angular dependence of the photodetached electrons serves as a sensitive p for the identification of these FC forbidden transitions. A linear vibro coupling model qual. reproduces the perturbed v3 potentials of the X and states. Artifactual symmetry breaking along the v3 coordinate is obsd. i ab initio wave functions for the neutral ground state up to the coupled-c level of theory, even when Brueckner orbitals were used. No evidence is for an energetically low-lying cyclic state of B2N, which was invoked in assignment of the matrix IR spectrum of B2N. However, the matrix IR data well with the peak spacing obsd. in the photoelectron spectra and reassign the linear X 2.SIGMA.u+ ground state.

10M 38976

1999

F: B3N-

P: 3

132:56361

Anion photoelectron spectroscopy of
B3N-. Asmis, Knut R.; Taylor, Travis R.; Neumark,
Daniel M. Department of Chemistry, University of
California Berkeley, CA 94720, USA J.
Chem. Phys., 111(23), 10491-10500 (English) 1999

Vibrationally resolved neg. ion photoelectron
spectra of B3N- at 355 and 266 nm are presented. Two
intense bands are obsd. with adiabatic detachment
energies (ADEs) of 2.923 $\pm$ 0.008 eV and 3.063 $\pm$
0.008 eV and markedly different photoelectron angular
distributions. Aided by electronic structure
calcns., the 2 bands are assigned to transitions from
the linear X 4.SIGMA.- state of B3N- to the linear

CA.2000, 132

3.PI. and 5.SIGMA.- electronically excited states of neutral B₃N, with all 3 states having a B-N-B-B structure. Weak signal obsd. at lower electron binding energies is tentatively assigned to 2 addnl. linear-to-linear transitions from the low-lying electronically excited 2.PI. state of B₃N- to the 1.SIGMA.+ and 3.PI. states of neutral B₃N. Based on these assignments the electron affinity of linear B-N-B-B is 2.098 $\pm$ 0.035 eV. It remains uncertain if the 1.SIGMA.+ state of linear B-N-B-B or the 3A₁ state of cyclic B₃N is the overall ground state. At the highest level of theory used here, CCSD(T)/aug-cc-pVTZ, the 1.SIGMA.+ state is predicted to lie 0.09 eV below the 3A₁ state.

F: B2N-

P: 3

132:28079

Anion photoelectron spectroscopy of
B2N-. Asmis, Knut R.; Taylo Travis R.; Neumark,
Daniel M.

Department of Chemistry, University of
California Berkeley, CA, USA J. Chem. Phys.,

111(19), 8838-8851 (English) 1999

Vibrationally
resolved 355 and 266 nm anion photoelectron spectra
of B2N are presented.

Photodetachment to two
electronic states of linear B- is obsd. and, aided by
electronic structure calcns., assigned to the X

1.SIGMA.g+ X 2.SIGMA.u++e- and X 1.SIGMA.g+ A

2.SIGMA.g++e- transitions. electron affinity of B2N

is 3.098 +/- 0.005 eV and the A 2.SIGMA.g+ term

energy T0 is 0.785 +/- 0.005 eV. Observation of

excitations involving uneven quanta of the antisym.

1999

C.A. 2000, 132

stretching mode (v_3) indicates a breakdown the Franck-Condon (FC) approxn. and results from Herzberg-Teller vibronic coupling between the $X\ 2\Sigma^+.$ and $A\ 2\Sigma^+.$ states involving the v mode. Measurement of the angular dependence of the photodetached electron serves as a sensitive probe for the identification of these FC forbidden transitions.

A linear vibronic coupling model qual. reproduces the pertu v_3 potentials of the X and A states. Artifactual symmetry breaking along v_3 coordinate is obsd. in the ab initio wave functions for the neutral gr state up to the coupled-cluster level of theory, even when Brueckner orbi were used. No evidence is found for an energetically low-lying cyclic st of B_2N , which was invoked in the assignment of the matrix IR spectrum of However, the matrix IR data agrees well with the peak spacing obsd. in th photoelectron spectra and reassigned to the linear $X\ 2\Sigma^+.$ ground st

F: BnNn+

P: 3

CM.40482

2000

133:35470 Structural, Rotational, and Vibrational Properties of Mixed Ionized Boron-Nitrogen Clusters BnNn+ ($n = 3-10$). Giuffreda, M. G.; Deleuze, M. S.; Francois, J-P. Department SBG Institute for Materials Science (IMO), Limburgs Universitair Centrum Diepenbeek B-3590, Belg.

J. Phys. Chem. A, 104(24), 5855-5860

(English) 2000

~~Properties, 65~~ The structural, rotational, and vibrational properties of BnNn+ clusters ($n = 3-10$) were studied using d. functional theory (DFT) and compared with that of their neutral counterparts. The BnNn+ species with $n = 4, 6, 8, 10$ possess as lowest energy form a fully regular structure of Dnh symmetry, as the neutral species. In both cases, their IR vibrational

C.A. 2000

spectrum invariably contains four lines, relating to one out-of-plane nondegenerate and three in-plane doubly degenerate normal modes. However, the B_nN_n clusters with $n = 3, 5, 7, 9$ evolve from a fully regular D_{nh} structure to a more alternating one upon an adiabatic ionization process. In this case, ionization is also shown to strongly enhance the IR activity. Rotational moments and adiabatic ionization potentials are eventually provided to trace the structural variations induced by ionizing these clusters.

~~... ..~~

2000

F: BnNn

P: 3

134:271531 Quantum-chemistry calculation of BnNn rings ($n = 1-6$) and fulborenes, the fullerene-like molecules BnNn ($n = 12, 24, 60$). Sheichenko, D. M.; Pokropivny, A. V.; Pokropivny, V. V. Institute for Problems of Materials Science, National Academy of Sciences of Ukraine, Kiev, Ukraine. Semicond. Phys., Quantum Electron. Optoelectron. (2000), 3(4), 545-549. in English.

Electronic structure of the boron nitride rings and fullerene-like BN-mols. (the fulborenes) are calcd. using MNDO, AM1, Extended Huckel, INDO and ab initio (STO-3G) methods. The fulborene B60N60 is confirmed as the boron nitride analog of buckminsterfullerene C60. Comparisons with other calcns. are presented and possible applications as nanoporous materials and photonic crystals are discussed.



2000

F: B12N12

P: 3

132:242180 Structure and Stability of Boron
Nitrides: Isomers of B12N12. Strout, Douglas L.

Department of Physical Sciences, Alabama
State University Montgomery, AL 36101, USA

J. Phys. Chem. A, 104(15), 3364-3366
(English) 2000 A no. of recent studies have
explored the energetics of intermediate-size
clusters, such as small fullerenes. For example,
the isomer energies of have proven difficult to
ascertain as different theor. methods give widel
varying results. For cluster sizes around 20-30

C.A. 2000, 132

atoms, it is not immediately clear whether a monocyclic, graphitic, or fullerene structure is energetically preferred. In the present work, the isomers of $B_{12}N_{12}$, a ring, a "graphite sheet", and a fullerene-like cage of four- and six-membered rings, are examined. The energies of the three isomers are calculated using Hartree theory and density functional theory (DFT) in local and gradient-corrected forms. Dunning correlation-consistent basis sets are used, with geometries optimized to the triple-zeta level and energies calculated at the quadruple-zeta level. The effects of the basis set, as well as the effects of local vs. nonlocal are discussed. The results are compared to those of similar studies of C which is isoelectronic with $B_{12}N_{12}$.

$B(N_3)_3$

Om. 40 442

2000

Michael J. Travers and
Julanna V. Gilbert^{*},

J. Phys. Chem. A 2000,
104, 3780 - 85.

UV Absorption ● Spectra ~~99~~

Intermediates generated via
Photolysis of $B(N_3)_3$, $BCl(N_3)_2$,
and $BCl_2(N_3)$ in Low-Temperature
Argon Matrices.

2000

F: BnNn+

P: 3

133:35470 Structural, Rotational, and
Vibrational Properties of Mixed Ionized Boron-
Nitrogen Clusters BnNn+ (n = 3-10). Giuffreda, M.
G.; Deleuze, M. S.; Francois, J-P. Department SBG
Institute for Materials Science (IMO), Limburgs
Universitair Centrum Diepenbeek B-3590, Belg.

J. Phys. Chem. A, 104(24), 5855-5860
(English) 2000 The structural, rotational,

C.A. 2000, 133

and vibrational properties of $BnNn^+$ clusters ($n = 3-10$) were studied using d. functional theory (DFT) and compared with that of their neutral counterparts. The $BnNn^+$ species with 4, 6, 8, 10 possess as lowest energy form a fully regular structure of D_n symmetry, as the neutral species. In both cases, their IR vibrational spectrum invariably contains four lines, relating to one out-of-plane nondegenerate and three in-plane doubly degenerate normal modes. However the $BnNn$ clusters with $n = 3, 5, 7, 9$ evolve from a fully regular D_{nh} structure to a more alternating one upon an adiabatic ionization process. this case, ionization is also shown to strongly enhance the IR activity. Rotational moments and adiabatic ionization potentials are eventually provided to trace the structural variations induced by ionizing these clusters.

2000

B₁₂ N₁₂,
 B₂₄ N₂₄
 B₆₀ N₆₀

meopem.
 pacem
 cmateuon

134: 106133w Boron nitride analogs of fullerenes (the fulborenes), nanotubes, and fullerites (the fulborenes). Pokropivny, Vladimir V.; Skorokhod, Valery V.; Oleinik, Galina S.; Kurdyumov, Alexander V.; Bartnitskaya, Tamara S.; Pokropivny, Alex V.; Sisonyuk, Alexander G.; Sheichenko, Dmitry M. (Institute for Problems of Materials Science, National Academy of Sciences of Ukraine, Kiev, Ukraine 252142). *J. Solid State Chem.* 2000, 154(1), 214-222 (Eng), Academic Press. The mols. B₁₂N₁₂, B₂₄N₂₄ and B₆₀N₆₀ (named by the authors as fulborenes) are proposed as boron nitride analogs of the fullerenes, esp. B₆₀N₆₀ as the analog of C₆₀. MNDO computation was performed to confirm their stability. Multiwalled BN nanotubes and onions were produced by carbothermal synthesis. Their structure and mechanisms of growth and formation were studied by TEM, x-ray spectral microanal.; and mol. dynamics techniques using B-B, B-N,

C. H. 2001, 134, N8.

and N-N original interat. potentials. Ten possible zeolite-like crystals built from these mols. (named by the authors as fulborenites) were predicted, and their lattice parameters and densities were calcd. Comparison with explosive expts. allow the authors to identify the simple cubic fulborenite $B_{12}N_{12}$ with intermediate phase of BN. New original ideas were suggested of: (i) a hyper-diamond based on $B_{12}N_{12}$ -fulborenite with zincblende lattice, (ii) a superdense diamond based on $Me_2B_{12}N_{12}$ -fulborenide with bcc. lattice, and (iii) a quantum hypersound generator based on BN nanotube. (c) 2000 Academic Press.

236 N36

2001

135: 157920d High-resolution electron microscopy and structural optimization of C_{36} , $B_{36}N_{36}$ and $Fe@B_{36}N_{36}$ clusters. Oku, T.; Suganuma, K. (Industrial Research, Osaka University, Ibaraki, Osaka.

Japan 567-0047). *Diamond Relat. Mater.* 2001, 10(3-7), 1205-1209 (Eng), Elsevier Science S.A. At. structures and the structural stability of C_{36} and $B_{36}N_{36}$ clusters were investigated by high-resoln. electron microscopy and MO/mechanics calcns. The obsd. high-resoln. image was related to a $Fe@B_{36}N_{36}$ metallofullerene structure, and a structure model was constructed. Total energy calcns. of the clusters showed that the C_{36} , $B_{36}N_{36}$ and $Fe@B_{36}N_{36}$ are stable in this order. Image simulations of these clusters agreed well with obsd. images, which confirmed the proposed structure models.

CM 75

B₁₂N₁₂

2001

134: 152866k Structure and Stability of Boron Nitrides: The Crossover between Rings and Cages. Strout, Douglas L. (Department of Physical Sciences, Alabama State University, Montgomery, AL 36101 USA). *J. Phys. Chem. A* 2001, 105(1), 261-263 (Eng), American Chemical Society. A previous study on B₁₂N₁₂ showed that the Hartree-Fock (HF) method, local d. approxn. (LDA), and gradient-cor. d. functional theory (specifically B3LYP) all agree in predicting that the cage isomer of B₁₂N₁₂ is the most stable. If the cage is the most stable (BN)_x for x = 12, then the energetic crossover between rings and cages must take place at some x < 12. Rings would be most stable for small mols., and cages would be most stable for larger mols. The current study explores the question of whether rings or cages are more stable at sizes smaller than B₁₂N₁₂, with the goal of defining a crossover point between rings and cages. These issues are examd. by theor. calcns. using the HF, LDA, and B3LYP methods, along with second-order perturbation theory (MP2). In particular, an energetic comparison is carried out between the ring and cage isomers of (BN)_x for x = 8-11. The major result is that boron nitride cages are more stable than rings if at least two of the six four-membered rings are isolated by hexagons, an arrangement that is first seen for the B₁₁N₁₁ cage.

наиболее
стабильный
изомер,
теор. расчет
структуры
и стабильн.
С. А. 2001, 134, N11

Box No 24

[Am. 41883]

2003

описание,
структура

Takeo Oae, Atsushi Nishi-
waki et al;

Chem. Phys. Lett., 2003,
380, N 5-6, 620-623.