

HB F_2

HBF_2

U. K.

Bp - 4821-V

1964

✓ Preparation and properties of difluoroborane. T. D. Coyle, J. J. Ritter, and T. C. Farrar (Natl. Bur. of Standards, Washington, D.C.). *Proc. Chem. Soc.* 1964(Jan.), 25. Pyrolysis of di- or tetraborane at 100° in the presence of BF_3 or organoboron fluorides gave small amts. HBF_2 . Treating 45.6 millimoles $\text{HB}(\text{OMe})_2$ with 90.8 millimoles BF_3 for 30 min. at 0° in a sealed tube gave a white solid, nonvolatile at -80° , and 32.7 millimoles gas, consisting of a mixt. of HBF_2 , BF_3 , and a trace of B_2H_6 . HBF_2 disproportionated slowly to BF_3 and B_2H_6 at room temp.; HBF_2 added smoothly to $\text{CH}_2:\text{CH}_2$ at room temp. to give EtBF_2 . The proton magnetic resonance and infrared spectrum of HBF_2 were detd. HBF_2 was monomeric. C. L. Deasy

C.A. 1964. 60. 8

8880a

1964

HBF_2
 represents
 diborane
 peroxide

Proton and fluorine nuclear magnetic resonance (N.M.R.) spectra of HBF_2 . T. C. Farrar and T. D. Coyle (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 41(9), 2612-13 (1964). Proton and F N.M.R. spectra of HBF_2 were recorded, 140-230°K. The values for the spin-coupling consts. J_{HF} , $J^{11}\text{B-H}$, and $J^{11}\text{B-F}$ are 108 ± 1 , 211 ± 2 , and 84 ± 1 cycles, resp. J_{HF} is temp. independent. The apparent values of $J^{11}\text{B-H}$ and $J^{11}\text{B-F}$ decrease below 165°K. owing to the interaction of rapidly fluctuating elec. field gradients with the elec. quadrupole moment of B. The center of the proton multiplet is ~ 0.12 p.p.m. downfield from the center of the terminal proton multiplet in diborane. The F multiplet is ~ 60 p.p.m. downfield from the F resonance in BF_3 , which in this case was a single structureless line. The dependence of $^{11}\text{B-H}$ coupling consts. on the orbital hybridization of B is discussed. RCJQ

C.A. 1964.61.12

14063 f

1965

HBF₂DBF₂ИК-
спектры

12 Д236. ИК-спектры и отнесение частот HBF₂ и DBF₂. Lynds Lahmer. Infrared spectra and vibrational assignments of HBF₂ and DBF₂. «J. Chem. Phys.», 1965, 42, № 3, 1124—1126 (англ.)

Зарегистрированы ИК-спектры HBF₂ и DBF₂, полученных в разряде в смеси HB(OCH₃)₂ и BF₃. Предложено отнесение полос для молекул H¹¹BF₂, H¹⁰BF₂, D¹¹BF₂, D¹⁰BF₂.

г. 1965. 128

ВР-4822-1

1965

HBF₂
DBF₂

W.K.

11089

INFRARED SPECTRA AND VIBRATIONAL ASSIGNMENTS OF HBF₂ AND DBF₂. Lahmer Lynds (North American Aviation Science Center, Thousand Oaks, Calif.). J. Chem. Phys., 42: 1124-6 (Feb. 1, 1965).

The vibrational assignments of both HBF₂ and DBF₂ were made utilizing the Green's function and matrix partitioning techniques. All the dynamics of the perturbed molecules were determined from the Green's function of the unperturbed molecules. Results showing the observed spectra (estimated band centers for A₁ modes) and vibrational assignments are collected in tabular form. (M.C.G.)

NSA-1965-19 7

B9-4822-1

1965

HBF₂

enough

Infrared spectra and vibrational assignments of HBF₂ and DBF₂. Lahmer Lynds (N. Am. Aviation Sci. Center, Thousand Oaks, Calif.). *J. Chem. Phys.* 42(3), 1124-6(1965)(Eng). By utilizing Green's functions and matrix partitioning techniques, vibrational assignments of HBF₂ and DBF₂ are made. In this procedure, all the dynamics of perturbed mols. (H¹¹BF₂, H¹⁰BF₂, D¹¹BF₂, D¹⁰BF₂) were detd. from Green's function of the unperturbed mols. (¹¹BF₃ and ¹⁰BF₃) without invoking a force const. model or geometric charges. The general features of rotational vibration bands are in agreement with anticipated band shapes.

M. Adhikari

B9p-4822-V

C.A. 1965-62.11
12609e

НВF₂

(Vii

структур)

молекулы

8 Д254. Колебательно-вращательный спектр дифторборана и дифторборана-d. Lynds L., Bass C. D. Vibrational-rotational spectrum of difluoroborane and difluoroborane-d. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, № 12, 4357—4364 (англ.)

Получены спектры поглощения НВF₂ в области 510—2700 см⁻¹ и DBF₂ в области 760—2000 см⁻¹ со специальной шириной щели 0,6—1,5 см⁻¹. Расположенные в исследованной области полосы, соответствующие основным колебаниям ν_1 , ν_2 , ν_3 (тип симметрии A_1) и ν_6 (тип симметрии B_2) молекулы НВF₂ и ν_1 и ν_2 молекулы DВF₂ проявляют явно выраженную вращательную структуру. Рассмотрение молекул НВF₂ и DBF₂ в приближении симметричного волчка позволяет сделать отнесение линий

1965
ВФ-4823-V

ф. 1966. 82

к определенным K , вычислить положение центров полос и разности вращательных постоянных $A—B$ в верхнем и нижнем колебательных состояниях. Определен наименьший момент инерции I_A , из которого вычислена величина угла $F—B—F$, получившаяся равной $117,4 \pm 2^\circ$. Длина связи BF принята равной $1,295 \text{ \AA}$ (r_{BF} в BF_3) и длина связи BH $1,20 \text{ \AA}$ (r_{BH} в B_2H_6). Библ. 13 назв.

С. Станкевич

1965

HBF₂

2;
Cfymppx

Vibrational-rotational spectrum of difluoroborane and difluoroborane-*d*. L. Lynds and C. D. Bass (N. Am. Aviation Sci. Center, Thousand Oaks, Calif.). *J. Chem. Phys.* 43(12), 4357-64(1965)(Eng). Four HBF₂ and 2 DBF₂ fundamentals have been resolved into their fine structure under medium dispersion. The 3 *A*₁ modes, ν_1 , ν_2 , and ν_3 are characterized by a series of evenly spaced lines having the general appearance of a $\perp$ band of a symmetric-top mol. The *B*₂ modes, ν_6 , have a strong *Q* branch in addn. to a well-defined subband system and have the appearance of type-*C* bands near the prolate limit. On using a symmetric-top approxn., an analysis of the spectra provided 6 independent measurements for the smallest moment of inertia, from which the av. apex angle F-B-F was calcd. to be $117.4 \pm 2^\circ$, assuming the BH(BD) bond distance to be 1.20 Å. In HBF₂, interband agreement of the rotational const. *A*, assocd. with the smallest moment of inertia, was quite good. It was possible to assign *K* values to the individual lines and to det. the position of the band centers for the resolvable fundamentals ν_1 , ν_2 , ν_3 , and ν_6 .

RCJQ

C.A. 1966.

64.4

4466 de

Bp - 4823 - V

HBF₂DBF₂(2i, ш.п.,
структур.)

(1и.)

4 Д413. ИК-спектры дифторборана и дифторборана-d. Регес М., Вебка L. N. Infrared spectra of difluoroborane and difluoroborane-d. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, № 2, 721—727 (англ.)

Исследованы спектры поглощения H—BF₂ (I) и D—BF₂ (II) в газовом состоянии в области 400—2800 см⁻¹. Путем сравнения спектров I, II и B₂H₆ и BF₃ определены основные частоты колебаний I и II. Наблюдаемые значения частот удовлетворительно согласуются с расчетными по данным других авторов. Анализ спектров при высоком разрешении с применением представления о симметричном волчке позволил определить моменты инерции, длины связи, углы между связями и соответствующие изотопич. сдвиги для I и II. Вычислены силовые постоянные. Библиограф. 15 назв. М. Киселева

1-4824-V
B99-4824-V

H-BF₂
D-BF₂

Un. center

1965

Infrared spectra of difluoroborane and difluoroborane-d.
M. Perec and L. N. Becka (Univ. Buenos Aires). *J. Chem. Phys.* 43(2), 721-7(1965)(Eng). Gaseous H-BF₂ and D-BF₂ were obtained by a new method of prepn. Analysis of high-resolution ir spectra gave approx. values for the B-F distance (1.30 ± 0.15 A.) and the F-B-F angle ($120^\circ \pm 5^\circ$). Five of the 6 fundamentals were observed and assigned unambiguously: $\nu_2 = 2620$ and 1962 cm.⁻¹, B-H and B-D stretches; $\nu_1 = 1166$ and 1128 cm.⁻¹, ¹¹B-F symmetric stretches in H-BF₂ and D-BF₂; $\nu_3 = 545$ and 540 cm.⁻¹, F-¹¹B-F bending in H-BF₂ and D-BF₂; $\nu_4 = 1402, 1392, 1419$ cm.⁻¹, ¹¹B-F asymmetric stretches in H-BF₂ and D-¹¹BF₂ and ¹⁰B-F stretch in D-¹⁰BF₂, resp.; $\nu_6 = 944, 924, 810, 790$ cm.⁻¹, out-of-plane deformation in H-¹⁰BF₂, H-¹¹BF₂, D-¹⁰BF₂, and D-¹¹BF₂, resp. The H-B-F bending appears to have a frequency $\nu_5 = 1200$ cm.⁻¹ for H-¹¹BF₂ and is estd. at 887 cm.⁻¹ for D-¹¹BF₂. A force-const. calcn. was made, obtaining the following values (in millidynes per angstrom): $f_D = 3.66, f_d = 6.625, f_d' = 0.725, f_{Dd} = 0.37, f_r = 0.772$. RCJQ

C.A. 1965-63-4
3779 fg

BP-4824-V

HBF_2 (газ)

1965

ИК-спектр

ΔH_f°

6 Б199. Реакция бороксина с BF_3 (газ). Инфракрасный спектр и стабильность HBF_2 (газ). Porter Richard F., Wason Satish K. Reaction of boroxine with BF_3 (g). Infrared spectrum and stability of HBF_2 (g). «J. Phys.. Chem.», 1965, 69, № 7, 2208—2212 (англ.)

Исследована хим. р-ция тв. бороксина (I) с газ. BF_3 . Обмен водорода в I на фтор в BF_3 приводит к образованию HBF_2 . При обычных т-рах BF_3 реагирует с I более быстро, чем с дибораном. Определена теплота образования HBF_2 (газ) при 298°K , равная $-175,5 \pm \pm 1,5$ ккал/моль. Получены ИК-спектры HBF_2 и DBF_2 , и 5 из 6 основных колебаний HBF_2 определены с помощью правила произведения Теллер — Редлиха.

Резюме авторов

Вар - 4826 - V

х. 1967 - 6

17

KB" F₂

Т.ф.

ср. амп.

колебан

7 Б302. Поляризуемость молекул и связей, амплитуды колебаний и термодинамические функции некоторых дигалогидоборанов. Nagarajan G. Bond and molecular polarizabilities, mean amplitudes of vibration and thermodynamic functions in some dihaloboranes. «Acta phys. polon.», 1966, 29, № 6, 841—852 (англ.)

На основе структурных и спектроскопич. данных, полученных ранее различными авторами, проведен расчет поляризуемости связей и молекул некоторых дигалоборанов, обладающих плоской конфигурацией (HB" F₂, DB" F₂, HB¹⁰Cl₂ т. п.). Расчет проведен по методу Липпинкотта — Штутмана с использованием для хим. связи модели δ -функции. Вычислены средние амплитуды колебаний связанных и несвязанных пар атомов при t -ре 298 и 500° K. На основе модели жесткого ротатора и гармонич. осциллятора по стандартным ф-лам вычислены термодинамич. функции для области t -р 200—2000° K. Результаты вычислений приведены в виде таблиц.

В. Морозов

1966
V
Bp-4592-V

x. 1967. 7

(X)

HBF_2

DBF_2

отнесение
масс

ν_i

10 Д113. Об отнесении колебаний типа B_1 в молекулах HBF_2 и DBF_2 . Перес М., Вебка L. N. On the assignment of the B_1 modes of HBF_2 and DBF_2 . «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 8, 3149—3150 (англ.)

Проведено сравнение отнесений полос к колебаниям ν_4 и ν_5 типа B_1 в молекулах HBF_2 и DBF_2 , предложенных различными авторами. Приводится ряд соображений в пользу правильности отнесения этих колебаний, данного авторами настоящей работы ($\nu_4=1402$, $\nu_5=1200$, для H^{11}BF_2 и $\nu_4=1392$, $\nu_5=887 \text{ см}^{-1}$ для D^{11}BF_2). Значение частоты ν_5 для DBF_2 получено с помощью правила произведений, однако отнесение полосы при 1200 см^{-1} к колебанию ν_5 HBF_2 остается сомнительным. М. Алиев

1966

Вор-4825-1

ф. 1966. 102

1966

HBF₂DBF₂

Assignment of the B_1 modes of HBF₂ and DBF₂. M. Percec and L. N. Becka (Univ. Buenos Aires). *J. Chem. Phys.* 44(8), 3149-50(1966)(Eng). Recent ir spectroscopic measurements on HBF₂ and DBF₂ are in good agreement with data reported by Lynds (CA 62, 12609d) except for the assignment of the B_1 modes. The assignment of the ν_4 mode is correct because (1) a very weak peak at 1200 cm.⁻¹ was obtained in a spectrum of DBF₂, similar to that in the material used by Lynds, (2) the band at 1402 cm.⁻¹ of the HBF₂ spectrum cannot be solely due to the ν_5 mode, (3) if the ν_4 mode of HBF₂ lies at ~ 1461 cm.⁻¹, the intensity of that region of the spectrum would be much higher than it actually is, and (4) if the D-B deformation mode, ν_5 , is at 1200 cm.⁻¹ the corresponding H-B mode should lie at ~ 1600 cm.⁻¹, by application of the product rule. A very small peak at 1200 cm.⁻¹ has been observed in the spectrum of DBF₂. Whatever the assignment of ν_5 may be, it will not change force const. calens. appreciably as far as the B-F stretching const. is concerned, since the frequency of ν_5 depends mainly on bending and bending-stretching force const. A. J. J. van Rensburg

C. A. 1966. 65.10
14655 bc

B92-4825-V

B9P-5817-V

1968

HB¹⁰F₂HB¹¹F₂

вращ. пос.

структур.
параметры;

22 B298. Микроволновой спектр, структура, константы квадрупольного взаимодействия и дипольный момент дифторборана. Kasuya T., Lafferty W. J., Lide D. R. Microwave spectrum, structure, boron quadrupole coupling constants, and dipole moment of difluoroborane. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 1, 1—4 (англ.)

Проведено отнесение микроволновых спектров HB¹⁰F₂, HB¹¹F₂, DB¹⁰F₂ и DB¹¹F₂. Определены вращательные постоянные для этих молекул. Например, для молекул HB¹⁰F₂ и DB¹⁰F₂ они равны (Мгц) 77244,25; 10495,35; 9221,49 и 54081,82; 10496,89; 8771,57, соответственно. С использованием этих постоянных вычислены структурные параметры: $r_{BF}=1,311\pm 0,005$, $r_{BH}=1,189\pm 0,10\text{Å}$ и $\angle FBF=118,3\pm 1^\circ$. Получены константы квадрупольного взаимодействия и определен дипольный момент. Резюме

X. 1968. 22

HBF₂

B90-5817-V

1968

(M. B. Ches)
(C. H. J. J. J.)

73818m Microwave spectrum, structure, boron quadrupole coupling constants, and dipole moment of difluoroborane. T. Kasuya, W. J. Lafferty, and D. R. Lide, Jr. (Natl. Bur. of Stand.; Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 48(1), 1-4(1968) (Eng). The microwave spectra of H¹⁰BF₂, H¹¹BF₂, and D¹⁰BF₂ have been assigned. Rotational consts. are 74,494.82, 10,496.74, and 9181.67 for H¹¹BF₂; 77, 224.25, 10,495.35, and 9221.49 for H¹⁰BF₂; 52,896.09, 10,498.29, and 8740.46 for D¹¹BF₂; and 54,081.81, 10,496.89, and 8771.57 Mc./sec. for D¹⁰BF₂. The structural parameters obtained from thses consts. and their estd. uncertainties are $r_{BF} = 1.311 \pm 0.005$, $r_{BH} = 1.189 \pm 0.010$ A., and the angle FBF = $118.3^\circ \pm 1^\circ$. The quadrupole coupling consts. have been obtained. The dipole moment is 0.971 ± 0.010 D. RCJQ

C.A. 1968. 68. 16

ВФР - 5817-У

1968

10 Д327. Микроволновый спектр, структура, постоянные квадрупольного расщепления бора и дипольный момент дифторбора. Kasuya T., Lafferty W. J.,

Lide D. R. Microwave spectrum, structure, boron quadrupole coupling constants, and dipole moment of difluoroborane. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 1, 1-4 (англ.)

Отождествлены микроволн. спектры молекул H^{10}BF_2 , H^{11}BF_2 , D^{10}BF_2 и D^{11}BF_2 . Получены вращательные постоянные. Найдены структурные параметры: $d(\text{BF}) = 1,311 \pm 0,005$ А, $d(\text{BH}) = 1,189 \pm 0,010$ А и $\angle \text{FBF} = 118,3^\circ \pm 1^\circ$. Определен дипольный момент, равный $0,971 \pm 0,10$ ед. Дебая. И. И. Б.

НВФ₂
См. 6.
С. 129/130

$d(\text{BH}) =$
1,189

09. 1968

109



МВФ₂

кв.-мех.
расчет,
Атомизация
У

1979
21 Б47. Электронные энергии и строение дифторбo-
рана Armstrong D. R. The electronic energies and
structure of difluoroborane. «Inorg. Chem.», 1970, 9, № 4,
874—877 (англ.)

Электронное строение дифторборана рассчитано по ме-
тоду ССП МО ЛКАО в гауссовом базисе с использова-
нием орбитальных экспонент из работы (РЖХим, 1967,
19Б27). Геометрич. параметры приняты по данным мик-
роволновых спектров равными: $l_{B-F}=1,311 \text{ \AA}$, $l_{B-H}=$
 $=1,189 \text{ \AA}$, угол $FBF=118,3^\circ$. Использован базис из 7 орби-
талей s -типа и 3 орбиталей p -типа для атомов В и F, и
3 орбиталей s -типа для атома Н ((7,3,3)-базис), к-рый
авторы считают достаточным для вычисления полной
энергии в хартри-фоковском пределе. Найденная полная
энергия диссоциации на атомы с учетом эмпирич. попра-
вок на электронную корреляцию равна $414,3 \text{ ккал/моль}$
в хорошем согласии с величиной $377,4 \text{ ккал/моль}$, полу-
ченной как сумма энергий отдельных связей (эксперим.

ригу,

энергия диссоциации неизвестна). Высшей занятой орбиталью является МО σ -типа, к-рая содержит гл. обр. s-АО водорода. Потенциал ионизации по теореме Купманса найден равным 15,4 эв. Первой виртуальной орбиталью является орбиталь π -типа, содержащая в основном p -орбитали бора. Анализ заселенностей указывает на большой положит. заряд на атоме бора (1,049) с переносом 0,594 e от атомов F по σ -связям с обратным донированием по π -связям в 0,12 e , тогда как атом H остается нейтральным. Заселенность перекрывания связи B—H меньше чем в BH_3 или чем для терминальной связи в диборане, но указывает на достаточно прочную связь (0,706). Связи F—F и H—F имеют значительный разрыхляющий характер, первая в меньшей степени, чем вторая, что может быть причиной меньшего угла FBF. Кривые потенциальной энергии, полученные с (5,2,2)-базисом приводят к хорошему согласию с эксперим. геометрией молекулы. Найдена энергия перехода молекулы в пирамидальную конформацию, энергия локализации π -электронов на атомах F и обсуждена проблема π -связи в молекуле.

А. Багатурьянц

MBF₂

1970

114979t Electronic energies and structure of difluoroborane. Armstrong, David Reed (Comput. Dep., Univ. Newcastle upon Tyne, Newcastle upon Tyne, Engl.). *Inorg. Chem.* 1970, 9(4), 874-7 (Eng). The electronic energy and distribution of difluoroborane, HBF_2 , were examd. by mol. quantum-chem. calcs. using Gaussian-type AO. The structure of HBF_2 was investigated, and excellent agreement with the exptl. parameters was obtained. The π -localization and reorganization energies of difluoroboranes were calcd. to be 35.7 and 24.4 kcal/mole, resp.
RCHH

список

кб. мех.

проект

C.A. 1970. 72. 22

1970

HBF₂

10 Д128. Электронные энергии и структура дифторборана. Armstrong D. R. The electronic energies and structure of difluoroborane. «Inorg. Chem.», 1970, 9, № 4, 874—877 (англ.)

Методом самосогласованных МО в базисе гауссовых орбиталей с орбитальными экспонентами, табулированными Чизмадна и др. (РЖФиз, 1967, 8Д109), и с геометрич. параметрами ($l_{B-F}=1,311 \text{ \AA}$, $l_{B-H}=1,189 \text{ \AA}$ и угол $FBF=118,3^\circ$), взятыми из данных микроволн. спектроскопии, рассмотрена электронная структура дифторборана HBF₂ (I). Согласно результатам расчетов высшей занятой орбиталью в I является орбиталь σ -типа с основным вкладом от s-орбитали атома H и с потенциалом ионизации 15,4 эв, а первая виртуальная орбиталь локализована на p_z -орбиталях атома B (орбиталь π -типа). Атом B заря-

Электрон.
структура
(расчет)

09. 1970.

108

жен положительно (+1,05), а атомы F — отрицательно (—0,525). Эффективный заряд на атоме H близок к нулю. Около 0,594 части σ -электронов переносится от атома B к атомам F и около 0,12 части π -электронов переносится от атомов F к атому B. Обе связи F—H и F—F являются разрыхляющими, причем первая более сильно разрыхляющей. Это, по мнению автора, может служить объяснением причины того, что угол FBF в I меньше 120° . Обсуждается электронная природа донорно-акцепторных свойств трехвалентных соединений B. С этой целью вычислены полные энергии, одноэлектронные уровни и распределение электронной плотности для плоской и пирамидальной конфигураций I с длинами связей, взятыми из данных для $\text{BF}_3 \cdot \text{NH}_3$ и $\text{BN}_3 \cdot \text{CO}$. Плоская структура оказалась устойчивей на 24,4 ккал/моль, что хорошо согласуется с известными донорно-акцепторными свойствами соединений B, обладающих плоской структурой.

Ю. Удачни

BMF₂

BH₂F

N

D.

Ganguli P.S. u gp.

1970

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

(see. BH) III

1970

BH_2F

Schwartz M. S.,
Allen L. C.

BF_2

J. Amer. Chem. Soc., 92 (6),
1466.

ол. стр-ра

(coll. BH_3) III

HBF_2

1971

сн. и.

22 Б197. Использование постоянных колебательно-вращательного взаимодействия для расчёта силового поля дифторборана. Креденцер Е. И., Свердлов Л. М. «Изв. высш. учебн. заведений. Физика», 1971, № 6, 26—30

Силовые постоянные дифторборана HBF_2 (I) рассчитаны с использованием 20 основных частот четырех изотопозамещенных молекул, 11 постоянных центробежного искажения и 4 дефектов инерции. Приводятся удобные ф-лы для расчета производных от постоянных центробежного искажения по силовым постоянным. Для

X. 1971. 22

проверки правильности вычисления этих производных
 получено соотношение $\sum (\partial \tau_{\alpha\beta\gamma\delta} / \partial K_{ij}) K_{ij} = -\tau_{\alpha\beta\gamma\delta}$. Для
 всех вычисленных величин наблюдается хорошее сов-
 падение с экспериментом. Приведены таблицы вычис-
 ленных частот, кориолисовых постоянных, постоянных
 центробежного искажения и дефектов инерции. Силовая
 постоянная связи В—F в I $K_{\text{В-F}} = 10,485$ (при длине
 связи 1,311 Å), что меньше значения силовой постоянной
 для BF_3 $K_{\text{В-F}} = 13,014$ (при длине связи 1,295 Å). Си-
 ловая постоянная связи В—Н, равная 6,4 (длина связи
 1,189 Å) сравнивается с аналогичной силовой постоян-
 ной диборана 5,84 (единицы 10^6 см^{-2}). Автореферат

B-F-H

1971

суд.
начет,

(Dr Vi)

114350t } Use of vibrational-rotational coupling constants for calculating the force field of difluoroborane. Kredentser, E. I.; Sverdlov, L. M. (Sarat. Politekh. Inst., Saratov, USSR). *Izv. Vyssh. Ucheb. Zaved., Fiz.* 1971, 14(6), 26-30 (Russ). By using literature exptl. data, the force consts., the centrifugal-distortion consts., the inertial defects in excited vibration states, the Coriolis consts., and some characteristic frequencies for difluoroborane were calcd. by known procedures. Comparison of the calcd. values with their obsd. counterparts, where available, is given. The importance of vibration-rotation interaction consts. as supplementary data on the force field of molecules is discussed.
M. Hubik

C.A. 1971. 45

HBF_2

1971

11 Д192. Использование постоянных колебательно-вращательного взаимодействия для расчета силового поля дифторборана. Креденцер Е. И., Свердлов Л. М. «Изв. высш. учебн. заведений. Физика», 1971, № 6, 26—30

Силовые постоянные дифторборана HBF_2 рассчитаны с использованием 20 основных частот четырех изотопозамещенных молекул, 11 постоянных центробежного искажения и 4 дефектов инерции. Дается критич. оценка использованного эксперим. материала на основе расчетных данных. Приводятся удобные ф-лы для расчета производных от постоянных центробежного искажения по силовым постоянным. Для проверки правильности вычисления этих производных получено соотношение:

ν_i ; см.к.
см.к.

Ф. 1971. 11Д

$$\sum_{i,j} \frac{\partial \tau_{\alpha\beta\gamma\delta}}{\partial K_{ij}} K_{ij} = -\tau_{\alpha\beta\gamma\delta}.$$

Для всех вычисленных величин наблюдается совпадение с экспериментом. Приводятся таблицы вычисленных частот, кориолисовых постоянных, постоянных центробежного искажения и дефектов инерции. Силовая постоянная связи В—F в этой молекуле $K_{\text{В-F}} = 10,485$ (при длине связи 1,311 Å), что меньше значения силовой постоянной для BF_3 13,014 (при длине связи 1,295 Å). Силовая постоянная связи В—Н, равная 6,4 (длина связи 1,189 Å), сравнивается с аналогичной силовой постоянной дибора 5,84 (вес в ед. 10^6 см^{-2}).

Автореферат

НВФ₂

1971

10Д214. Силовое поле, постоянные центробежного искажения и константы кориолисовой связи НВФ₂, DBF₂. Venkateswarlu K., Rudra Warriar M. K. Force field, centrifugal distortion constants and Coriolis coupling constants of НВФ₂ and DBF₂. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1971, 9, № 4, 233—234 (англ.)

сич.
пост.

На основе новых данных о молекулярных параметрах (РЖФиз, 1968, 10Д327) определены заново силовые постоянные и рассчитаны d -константы Ватсона и g -постоянные. Наибольшее расхождение между рассчитанными и эксперим. значениями d -постоянных составляет ~7% для НВФ₂(d_{UK}) и ~22% для DBF₂(d_K). Полученные силовые постоянные лучше, чем известные ранее, воспроизводят d -постоянные.

Ю. С. Макушкин

92, 1972, 12

(+1)



HBFe

1971

cu. noc

vi

(2773/1) force field, centrifugal distortion constants and Coriolis coupling constants of difluoroborane and difluoroborane-d.
Venkateswarlu, K.; Warriar, M. K. Rudra (Dep. Phys., P. S. G. Arts Coll., Coimbatore, India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1971, 9(4), 233-4 (Eng). A set of force consts. of the general valence type has been detd. for the mols. HBF_2 and DBF_2 by using the recently reported mol. parameters and is used to det. the centrifugal distortion consts. and Coriolis coupling consts.

C.A. 1971.75.4

НВF₂

ДФF₂

гос. инст.

Т. 9. 9.

ф. 1974 № 1

XV - 1178
миссия 1153

1973

→ третий автор: Warriar A. K.

1 Д377. Средние амплитуды и термодинамические функции НВF₂ и ДВF₂ по спектроскопическим данным. Muraleedhara Warriar K., Girijavallabhan C. P. Mean amplitudes & thermodynamic functions of НВF₂ & ДВF₂ from spectroscopic data. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1973, 11, № 3, 221—222 (англ.)

С привлечением новых данных о структурных параметрах вычислены средние амплитуды колебаний НВF₂ и ДВF₂. Несмотря на некоторое изменение значений I , среднеквадратичные амплитуды для связей В—Н и В—F согласуются с аналогичными величинами для молекулы ВFCl₂. Рассчитаны термодинамич. ф-ции НВF₂ и ДВF₂. Библи. 7.

М. В. Тонков

⊕ Т. 9. 9.

⊗ ⊕ Ем. ву

1974

 HBF_2 BF_3 CH_3BF_2

85: 25602r Geometry optimized ab initio study of ABF_2 , A = hydrogen, methyl, ethyl, vinyl, fluorine. Fitzpatrick, N. J.; Mathews, N. J. (Dep. Chem., Univ. Coll., Belfield/Dublin, Ire.). *Proc. Int. Conf. Coord. Chem.*, 16th 1974, 2.2a, 3 pp. (Eng). Univ. Coll., Dublin, Dep. Chem.: Dublin, Ire. The results of an ab initio MO calcn. and mol. structure of the title compds. are presented. All bond lengths, except C-H are optimized as are all XBF angles (X is a neighboring H, C, or F). The XBF_2 moiety is assumed planar and rotations about the B-C bonds are considered.

 $\text{C}_2\text{H}_5\text{BF}_2$

(список, кв. ссх. фактов)

②



C.A. 1976. 25N4

50812.7224
Ch, TC

40534
HBF₂ (A₄⁺)

1975
3239

Pierce Robert C., Porter Richard F.

Ion-molecule chemistry of BF₃ and HBF₂
in hydrogen.

"Inorg. Chem.", 1975, 14, N 5, 1087-1093

(англ.)

0421 пик

404 404 4 1 8

ВИНИТИ

70317.1506

34469

1976

Ch, Ph, TC, MGU

HB F₂

* 4-17642

Deb B.M., Boso S.K., Sen P.N.

Geometry predictions for HAB_2 and AB_5
molecules based on their highest occupied
molecular orbitals. "Indian J. Pure and

Appl. Phys.", 1976, 14, N 6, 444-452.

(англ. *см. HCO₃; III*) 0832 БМК

793 793 18231

ВИНИТИ

HBF_2
 DBF_2

XV - 3252

1976

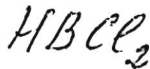
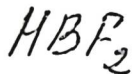
K_p
 ΔH
 ΔS
- mol.
no.

Destefano A.J., Roby R.J.,
Porter R.F.

"Thermochim. acta 1976, 16, 12,
236 - 39.

"A thermodynamic study of H-D
exchange in the hydrogen -
difluoroborane system."

1977



Calc. not.

M. U.

90: 94558w Molecular force fields and mean amplitudes of vibrations of some dihaloboranes - Green's function analysis. Ramaswamy, K.; Shanmugam, G. (Dep. Phys., Annamalai Univ., Annamalai Nagar, India). *J. Annamalai Univ., Part B* 1977, 31, 47-56 (Eng). The Green's function procedure was used to obtain potential energy consts. and the mean amplitudes of vibration for HBX_2 ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$). The central B atom is substituted to arrive at the results. All the mol. consts. obtained in this study are comparable with earlier reported values.

(+2) A

C. A. 1979. 90 N12

BF_2

Dommen 10625 1980.

Geeg K, et al.

Theor. chim. acta,

1980, 54, 131-144

(J)

kv. acc.
factor

BHF_2

BH_2F

omnica 9241

1980

Marsić Z. B., et al.

ξ_i
kv. rex.
factor

Theor. chim. acta,
1980, 54 (2), 145-156

НВF₂

оттиск 10059

1980

24 Б167. Гармоническое силовое поле и средняя структура основного состояния дифторборана. Robiette A. G., Gerry M. C. L. The harmonic force field and ground-state average structure of difluoroborane. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 403—410 (англ.)

А.Н.

геометрия

сил. поле.



Х. 1980 № 24

С использованием лит. значений колебательных частот и постоянных центробежного искажения для четырех изотопозамещенных молекул H^{11}BF_2 , H^{10}BF_2 , D^{11}BF_2 и D^{10}BF_2 по методу НК получен уточненный набор силовых постоянных гармонич. силового поля молекулы дифторборана. Предсказанное на основе расчета значение частоты колебания $\nu_5(B_1)$, не идентифицированного в спектрах, составило $1049 \pm 50 \text{ см}^{-1}$ для HBF_2 и $775 \pm 50 \text{ см}^{-1}$ для DBF_2 . С использованием уточненного силового поля и лит. значений вращательных постоянных рассчитаны геометрич. параметры средней структуры основного состояния молекулы HBF_2 , составившие для длин связей $\text{B}-\text{H}$ и $\text{B}-\text{F}$ $1,195 \pm 0,003$ и $1,315 \pm 0,001 \text{ \AA}$, соотв., для угла FBF — $118 \pm 0,1^\circ$.

А. Н. Курский

HBF₂

DBF₂

(omnica 10059)

1980

93:16057c The harmonic force field and ground state average structure of difluoroborane. Robiette, A. G.; Gerry, M. C. L. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1W5). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 80(2), 403-10 (Eng). An improved harmonic force field of difluoroborane was calcd. using the vibrational wavenumbers and quartic centrifugal distortion consts. of 4 isotopic species. The unidentified vibrational mode ν_5 is predicted at 1049 ± 50 and 775 ± 50 cm⁻¹ for HBF₂ and DBF₂, resp. The ground-state av. structure of HBF₂ is $r_2(\text{BH}) = 1.195 \pm 0.003$ Å; $r_2(\text{Bf}) = 1.315 \pm 0.001$ Å; $\angle(\text{FBF}) = 118.0 \pm 0.1^\circ$.

см/улет.
напач.,
сущ. ност.

CA 1980 93 N2

НВF₂

Оттиски 10059

1580

1 Д371. Гармоническое силовое поле и усредненная по основному состоянию структура дифторборана. The harmonic force field and ground-state average structure of difluoroborane. Robiette A. G., Gerry M. C. L. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 403—410 (англ.)

Проведен повторный анализ микроволн. спектров Н¹¹BF₂, Н¹⁰BF₂, D¹¹BF₂ и D¹⁰BF₂. Определены вращательные постоянные и константы центробежной деформации. Величина τ для D¹⁰BF₂ не укладывается в теоретич. представления, что указывает на необходимость повторного исследования микроволн. спектра этой молекулы. Величины τ для остальных молекул вместе с найденными по ИК-спектрам поглощения частотам основных полос использованы для определения колебательных силовых постоянных. Их величины позволяют предсказать частоты не зарегистрированных ранее в ИК-спектре полос ν_5 НВF₂ и DBF₂. Найденное силовое поле использовано для определения усредненных по основному состоянию геометрич. параметров молекул. Библ. 14.

М. Т.

м. в. спектр,
сил. пост.

ф. 1581 м. 1

1981

Омтиск 1880

BF₂M
 H₂BOH
 FHBOH
 F₂BOH
 HB(OH)₂
 FB(OH)₂
 (геометрия, εi)

(12) 

22 Б45. Точные неэмпирические расчеты структур и конформаций некоторых борных и фторборных кислот градиентным методом. Влияние базиса на валентные углы при атоме кислорода. Boggs James E., Cor-dell Floyd R. Accurate ab initio grandient calculation of the structures and conformations of some boric and fluoroboric acids. Basis-set effects on angles aro-

Тез.
 40

X. 1981 №22, 19АБ

und oxygen. «J. Mol. Struct», 1981, 76, № 4 (Theor. chem», 1981, 1, № 4), 329—347 (англ.)

С помощью программ для неэмпирич. расчета молекул методом ССП и аналитич. расчета сил, действующих на ядра, проведено изучение строения ряда борсодержащих молекул. Все расчеты выполнены в базах типа 4-21, 4-21*, 4-21**, причем при обсуждении ошибок расчета, сравнении с имеющимися эксперим. данными и выборе наиболее надежных теор. оценок используется концепция, согласно к-рой неполнота базиса АО в расчетах методом ССП в какой-то мере компенсируется отсутствием учета корреляц. эффектов при анализе относит. изменений рассчитанных величин. Приведен ряд аргументов в пользу этой концепции. Описаны результаты анализа орбитальных энергий, геометрич. характеристик и электронных распределений молекул BF_2H , H_2BOH , двух конформеров FNBON и F_2BOH , трех конформеров NB(OH)_2 и FB(OH)_2 . В. И. Пупышев

BF₂H

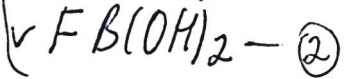
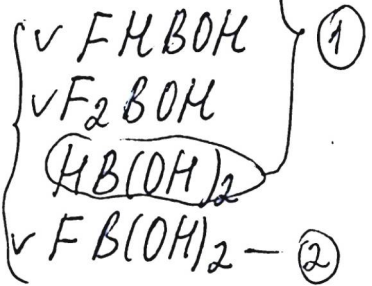
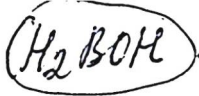
OMMUCK 11880

1981

muo pem.
pa crem
cm pyk myp

C.A. 1981,
95, N 12.

95: 103720a Accurate ab initio gradient calculation of the structures and conformations of some boric and fluoroboric acids. Basis-set effects on angles around oxygen. Boggs, James E.; Cordell, Floyd R. (Dep. Chem., Univ. Texas, Austin, TX 78712 USA). *THEOCHEM* 1981, 1(4), 329-47. (Eng). Accurate geometry detns. by SCF computation are reported for BF₂H, H₂BOH, 2 conformers of FHBOH, F₂BOH, 3 conformers of HB(OH)₂, and 3 conformers of FB(OH)₂. The effect of adding polarization functions to the double zeta basis set is examd. in detail both with respect to alteration of the computed abs. values of the structure parameters and to changes in the consistency of the computed relative values. The geometry computation should be done at a level which is adequate to produce small and const. offset values for the parameters sought, i.e. const. and predictable residual errors resulting from use of a finite basis set and neglect of electron correlation. In the rare situations, when the desired chem. information is found in abs. rather than relative values of the parameters, the offset correction can be added to the computed value. In many cases, such structure evaluations are at least as reliable as those from the best expts. For the compds. in this study, substitution of either F or OH increases the ionic character of both the B-F and B-O bonds. The B-F bond is slightly more ionic than B-O. The OH group is a slightly stronger σ electron-acceptor and π electron-donor than is F.



HBF_2

Оммулек 12433

1981

гомомер.
снелмр

95: 178300x Difluoroborane, HBF_2 . A study by helium(He I) photoelectron spectroscopy, and ab initio methods including perturbation corrections to Koopmans' theorem. Chong, D. P.; Kirby, C.; Lau, W. M.; Minato, T.; Westwood, N. P. C. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *Chem. Phys.* 1981, 59(1-2), 75-83 (Eng). The unstable HBF_2 mol. was generated in the gas phase, and studied by He I photoelectron spectroscopy in the absence of other interfering species. The spectrum was assigned with the assistance of calcns. involving perturbation corrections to Koopmans' theorem, and the semi-empirical MNDO method. No Koopmans' breakdown is obsd., but the $^2\text{A}_1$ ground ionic state is shown to have a geometry appreciably different from that of the neutral mol.

снел. 11874

C.A. 1981, 95, N20.

HBF_2

Оттиск 12433

1981

1 Д713. Дифторборан HBF_2 . Исследование методом фотоэлектронной спектроскопии и неэмпирические расчеты включая расчет поправок к теореме Купманса. Difluoroborane HBF_2 . A study by HeI photoelectron spectroscopy, and ab initio methods including perturbation corrections to Koopmans' theorem. Chong D. P., Kirby C., Lau W. M., Minato T., Westwood N. P. C. «Chem. Phys.» 1981, 59, № 1—2, 75—83 (англ.)

У, геометр,
структура

Электронная структура нестабильной молекулы HBF_2 (I) исследована методом фотоэлектронной спектроскопии. I получали 3-мя методами: а) в СВЧ-разряде $\text{BF}_3 + \text{H}_2$; б) при реакции BF_3 с $(\text{HBO})_3$; в) при реакции BF_3 с NaBH_4 . Вертикальные потенциалы ионизации I равны (в эВ): 14,33; 16,14; 17,96; 18,54; 18,93; 21,03.

● ССЧ. 11814

Ф. 1982, 18, № 1

В 3-, 4- и 6-й полосах обнаружена колебательная структура с частотами (в см^{-1}) 950, 1025 и 1010 соответственно. Спектр I интерпретирован при помощи полуэмпирич. (в приближении MNDO) и неэмпирич. расчетов (в базисах 4—31 ГФ, STO—3ГФ, 7s 3p/3s) с учетом поправок к теореме Купманса. На основе анализа эксперим. и теоретич. данных показано, что геометрия иона в основном состоянии 2A_1 сильно отличается от геометрии нейтральной молекулы. Библ. 40.

Ю. В. Чижов

HBF_2

Оттиск 12433

1981

У, электр.
строение

23 Б153. Дифтоборан, HBF_2 . Исследование с помощью фотоэлектронной спектроскопии с возбуждением He-I и неэмпирических методов с учетом поправок теории возмущений к теореме Купменса. Chong D. P., Kirby C., Lau W. M., Minato T., Westwood N. P. C. Difluoroborane, HBF_2 . A study by HeI photoelectron spectroscopy, and ab initio methods including perturbation corrections to Koopmans' theorem. «Chem. Phys.», 1981, 59, № 1—2, 75—83 (англ.)

Синтезирована нестабильная молекула HBF_2 и измерен ее фотоэлектронный спектр (ФЭС) (источник возбуждения He-I). Методом ССП МО ЛКАО в различных базисах сгруппированных гауссовых ф-ций рассчитано электронное строение HBF_2 и по теореме Купменса определены потенциалы ионизации (ПИ) валентных

ВМ, 11814

Х, 1981, 19, №23.

МО. В рамках теории возмущений Рэлея — Шредингера вычислены поправки к купменсовским ПИ с учетом 3-го порядка разложения теории возмущений. ПИ валентных МО в HBF_2 вычислены также полуэмпирич. методом МНДП с проведением полной оптимизации геометрич. параметров. Структура эксперим. ФЭС HBF_2 интерпретирована на основании данных проведенных расчетов. Хорошее соответствие между эксперим. и теор. значениями ПИ получено для 7 верхних занятых МО в расчетах методом ССП. МО ЛКАО с учетом поправок к теореме Купменса и методом МНДО. Установлено, что в HBF_2 не происходит нарушения теоремы Купменса для ПИ верхних МО. Эксперим. и теоретич. данные указывают на то, что в основном состоянии иона $\text{HBF}_2^+ 2A_1$ происходит существенное увеличение длины связи ВН и увеличивается угол FHF . И. А. Тополь

MBF_2^{2+} 10mmuck 16010 1982

молеку.
геометрия,
электрон.
структура

Макажан Г.Д., Деб В.И.,
Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20,
N6, 453-462.

HBF_2^{2+}

Number 15870

1982

Mahajan G.D., Deb B.M.,

Смесь
метал.
порош.

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20,
N 7, 527-537.



HBF_2

1983

8 Б1112. Фотоэлектронная спектроскопия с возбуждением He-I промежуточных и неустойчивых соединений. HeI photoelectron spectroscopy of transient and unstable species. Westwood N. P. C. «Mol. Ions: Geom. and Electron. Struct. Proc. NATO Adv. Study Inst., Isle of Kos, Sept. 30 — Oct. 10, 1980». New York; London, 1983, 275—278 (англ.)

Рассмотрены проблемы, специфика и некоторые результаты исследований фотоэлектронных спектров неустойчивых молекул и радикалов, в частности HBF_2 , HBCl_2 , HBBr_2 (FBS) $_n$ ($n=1, 2, 3$). В. М. Ковба

фотоэлектр.
спектр

(43) HBCl_2 , HBBr_2 , (FBS) $_n$
($n=1, 2, 3$)

Х. 1984, 19, N8

НВF₂

1983

6 Л285. HeI-фотоэлектронная спектроскопия короткоживущих и нестабильных частиц. HeI photoelectron spectroscopy of transient and unstable species. Westwood N. P. C. «Mol. Ions: Geom. and Electron. Struct. Proc. NATO Adv. Study Inst., Isle of Kos, Sept. 30—Oct. 10, 1980». New York; London, 1983, 275—278 (англ.)

Обсуждены возможности исследования нестабильных (или короткоживущих) частиц в газообразном состоянии методом УФ-молекулярной фотоэлектронной спектроскопии. Отмечено, что реактор, в котором образуются такие частицы, должен быть предельно приближен к области ионизации фотоэлектронного спектрометра. По мнению авторов, обсуждаемая отрасль фотоэлектронной спектроскопии весьма перспективна, т. к. дает прямую информацию об электронном строении «экзотич.» частиц. В качестве примеров проведен анализ HeI-фотоэлектронных спектров молекул НВF₂, НВCl₂, НВBr₂. М. Т.

фотоспектр
спектр

Ⓚ(42)

ср. 1984, 18, № 6

MBF₂

от. 19600

1984

24 Б1321. Микроволновый спектр и постоянные центробежного искажения дифторборана, HBF₂. The microwave spectrum and centrifugal distortion constants of difluoroborane, HBF₂. Westwood N. P. C., Lewis-Bevan W., Gerry M. C. L. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 106, № 1, 227—234 (англ.)

На штатковском МВ-спектрометре в области частот 8—36 ГГц с точностью 0,02 МГц измерены вращательные спектры двух изотопич. образцов дифторборана, H¹⁰B¹⁹F₂ (I) и H¹¹B¹⁹F₂ (II), в основном колебательном состоянии. Идентифицировано 36 вращательных переходов I вплоть до $J=56$, $K_a=9$ и 53 вращательных переходов II вплоть до $J=66$, $K_a=11$. Анализ спектров выполнен в приближении модели асимм. волчка с учетом квартичного и секстичного центробежного искажения и В-ядерного квадрупольного взаимодействия. Для I и II, соотв., определены вращательные постоянные (в МГц) $A=77244,324$ и $74494,669$, $B=10495,4410$ и $10496,8194$, $C=9221,4234$ и $9181,6129$,

м.п., ν_i

Х. 1984, 19, № 24

и постоянные В-ядерного квадрупольного взаимодействия (в МГц) $\chi_{aa} = -1,32$ и $-0,75$, $\chi_{bb} - \chi_{cc} = -13,01$ и $-5,92$. Расчетные частоты в пределах точности измерения хорошо согласуются с эксперим. данными. Однако между вычисленными молек. постоянными имеется сильная корреляц. зависимость. Отношение постоянных квадрупольного взаимодействия χ_{cc} для двух изотопов $^{10}\text{B}/^{11}\text{B}$ равно 2,142 и находится в удовлетворительном согласии с величинами их квадрупольных моментов. Полученные значения молек. постоянных согласуются с лит. данными и используются в настоящее время для анализа ИК-спектра высокого разрешения HBF_2 . С. Н. Мурзин



HBF_2

от. 19600

1984

11 Л206. Микроволновый спектр и постоянные центробежного искажения дифторборана (HBF_2). The microwave spectrum and centrifugal distortion constants of difluoroborane, HBF_2 . Westwood N. P. C., Lewis-Bevan W., Gerry M. C. L. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 106, № 1, 227—234 (англ.)

В диапазоне 8—36 ГГц исследованы микроволн. спектры нестабильных молекул H^{10}BF_2 и H^{11}BF_2 , полученных в потоке из BF_3 и NaBH_4 . Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 56$, $K_a \leq 9$ H^{10}BF_2 и $J \leq 66$, $K_a \leq 11$ H^{11}BF_2 в основном колебательном состоянии. Определены значения вращательных постоянных, постоянных кватерного и секстичного центробежного искажения и постоянных квадрупольной связи ядра бора.

М. Р. Алиев

М. П.

ср. 1984, 18, n 11

HBF_2

Om. 19600

1984

/ 101: 62866z The microwave spectrum and centrifugal distortion constants of difluoroborane, HBF_2 . Westwood, N. P. C.; Lewis-Bevan, W.; Gerry, M. C. L. (Dep. Chem., Univ. Brit. Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *J. Mol. Spectrosc.* 1984, 106(1), 227-34 (Eng). The microwave spectra of 2 isotopic species of the unstable mol. HBF_2 were measured between 8 and 36 GHz. Transitions were measured up to $J = 56$ and $K_a = 9$ for H^{10}BF_2 , and up to $J = 66$ and $K_a = 11$ for H^{11}BF_2 . Improved values for the rotational consts., B nuclear quadrupole coupling consts., and quartic and sextic centrifugal distortion consts. were evaluated for both species.

MB CRKMP,

M.N.

C.A. 1984, 101, 48

BHF₂

1986

107: 105263u Vibrational analysis of difluoroborane. Karunanidhi, N.; Nangai, R. Thamarai (Dep. Phys., Pres. Coll., Madras, 600 005 India). *Indian J. Phys.*, B 1986, 60B(6), 536-42 (Eng). The mol. consts. of difluoroborane and its isotopes were evaluated, on the basis of the method of kinetic consts., employing an independent set of symmetry coordinates. The dependent force consts., assocd. with the FBF bond angle, was obtained in terms of those involving the independent internal coordinates. The values obtained for the mol. consts. are discussed in the light of the theor. and exptl. values reported in the literature.

Calc. NCM.

M.N.

C.A. 1987, 107, ~12

HBF_2

(М.П.)

05Г 23644

1986

У 18 Б1311. Инфракрасный спектр высокого разрешения HBF_2 . Полоса 4_0^1 около 926 см^{-1} . The high-resolution infrared spectrum of HBF_2 . The 4_0^1 band near 926 см^{-1} . Gerry M. C. L., Lewis-Bevan W., MacLennan D. J., Merer A. J., Westwood N. P. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 116, № 1, 143—166 (англ.)

В области $840\text{—}1020 \text{ см}^{-1}$ с высоким разрешением ($0,004 \text{ см}^{-1}$, фурье-интерферометр с HgCdTe -детектором многоходовая оптич. ячейка) измерена вращат. структура полосы 4_0^1 (тип C, внеплоскостное деф. кол.) в ИК-спектре поглощения газ. HBF_2 (I). I получали в проточной системе при пропускании BF_3 над нагретым ($\sim 150^\circ$) NaBH_4 и сразу вводили в ячейку. В линиях с высокими значениями K и J наблюдались возмущения, связанные, как предполагается, что уровнем 6^1 . Начало полосы 4_0^1 для H^{10}BF_2 и H^{11}BF_2 соотв. при $943, 74\,700$ и $926,06578 \text{ см}^{-1}$. Приведены значения вращат. постоянных A, B, C , постоянных центробежного искажения $\Delta_J, \Delta_{JK}, \Delta_K, \delta_J, \delta_K, \Phi_J, \Phi_{JK}, \Phi_{KJ}, \Phi_K, L_{KKKJ}$ для обоих изотопомеров в основном состоянии и состоянии 4^1 . В. М. Ковба

Х. 1986, 19, N 18

HB F_2

Om. 23674

1986

104: 138540y The high-resolution infrared spectrum of difluoroborane: the 4_0^1 band near 926 cm^{-1} . Gerry, M. C. L.; Lewis-Bevan, W.; MacLennan, D. J.; Merer, A. J.; Westwood, N. P. C. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 116(1), 143-66 (Eng). The type-C out-of-plane bending fundamental ν_1 (near 926 cm^{-1}) in the IR spectrum of gaseous $\text{HB}F_2$ was recorded at high resolu. Rotational and centrifugal distortion consts. were obtained for the 2 isotopic species H^{10}BF_2 and H^{11}BF_2 in both the ground and 4^1 levels. A small rotational perturbation in the 4^1 level of H^{11}BF_2 allowed an est. of the position of the ν_6 fundamental, which so far has not been obsd. directly.

(ν_4 , ν_6)

c.A. 1986, 104, N16

HBF_2

сг 23674.

1986

9 Л208. ИК-спектр высокого разрешения полосы 4_0^1 HBF_2 вблизи 926 см^{-1} . The high-resolution infrared spectrum of HBF_2 : the 4_0^1 band near 926 см^{-1} . Гер-гу М. С. Л., Lewis-Bevan W., MacLennan D. J., Me-ger A. J., Westwood N. P. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 116, № 1, 143—166 (англ.)

Методом фурье-спектроскопии исследован ИК-спектр поглощения H^{10}BF_2 и H^{11}BF_2 при давл. $\sim 6 \cdot 10^{-2}$ мм рт. ст. С разрешением $\sim 0,004 \text{ см}^{-1}$, измерены положения линий, образующих структуру основной колебательно-вращательной полосы ν_4 . С привлечением данных о частотах чисто-вращательного спектра HBF_2 (Westwood N. P. C. et al. «J. Mol. Spectr.», 1984, 106, 227) определены положения начала полос и значения молекулярных постоянных HBF_2 в основном и возбужденном колебательных состояниях. Увеличивающаяся разница наблюдаемых и рассчитанных значений частот для линий с большими значениями J и K объяснена локальным взаимодействием Кориолиса между ν_4 и ν_6 .
В. К.

(М. П.)

ср. 1986, 18, № 9

MBF₂

ст 26000

1987

59 Л180. Инфракрасный спектр высокого разрешения молекулы HBF₂: полоса 2₀¹ вблизи 1164 см⁻¹. The high-resolution infrared spectrum of HBF₂. The 2₀¹ band near 1164 cm⁻¹. Gerry M. C. L., Jemson H. M., Lewis-Bevan W., MacLennan D. J., Westwood N. P. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 122, № 1, 135—149 (англ.)

На фурье-спектрометре с разрешением 0,004 см⁻¹ исследованы ИК-спектры поглощения молекул H¹⁰BF₂ и H¹¹BF₂ в области 1070—1240 см⁻¹. Идентифицирована вращательная структура полосы ν_2 . Анализ спектров выполнен совместно с данными по МВ-спектрам. Определены значения вращательных постоянных и постоянных квартичного и секстичного центробежного искажения для основного и возбужденного ($\nu_2=1$) состояний.

М. Р. Алиев

М.П.

ф. 1987, 18, № 9

HBF_2

1987

RT 26000

106: 128176m The high-resolution infrared spectrum of difluoroborane: the 2_0^1 band near 1164 cm^{-1} . Gerry, M. C. L.; Jensen, H. M.; Lewis-Bevan, W.; MacLennan, D. J.; Westwood, N. P. C. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 122(1), 135-49 (Eng). The type-B totally sym. stretching fundamental ν_2 (at $\sim 1164 \text{ cm}^{-1}$) of HBF_2 was recorded. Rotational and centrifugal distortion consts. were evaluated for H^{10}BF_2 and H^{11}BF_2 , in both the ground and 2_1 levels. The spectrum was regular, with no perturbations and no new information on the position of the missing fundamental ν_6 .

(ν_2)

C.A. 1987, 106, N 16.

HBF_2

арт 26000

1987

16 Б1298. Инфракрасный спектр высокого разрешения HBF_2 . Полоса 2_0^1 в области 1164 см^{-1} . The high-resolution infrared spectrum of HBF_2 . The 2_0^1 band near 1164 см^{-1} . Gerry M. C. L., Jemson H. M., Lewis-Bevan W., MacLennan D. J., Westwood N. P. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 122, № 1, 135—149 (англ.)

В области $1070\text{--}1240 \text{ см}^{-1}$ с высоким разрешением ($0,004 \text{ см}^{-1}$) измерена вращат. структура полосы полносимм. вал. кбл. $\nu_2 \text{HBF}_2$. Молекулы HBF_2 получались в проточной системе при прохождении BF_3 над нагретым (150°C) NaBH_4 . Использовалась многоходовая оптич. ячейка. Приведено положение и отнесение наблюдаемых линий H^{10}BF_2 и H^{11}BF_2 . При анализе результатов использовались данные по микроволновым спектрам молекул. Начало полосы при $1192,00685$ и $1164,36684 \text{ см}^{-1}$ для H^{10}BF_2 и H^{11}BF_2 . Значения (в см^{-1}) вращат. постоянных $A'', B'', C'', A', B', C'$ молекулы H^{10}BF_2 (основное состояние и состояние $\nu_2 = 1$): $2,576582$; $0,3500886$; $0,3075922$, $2,606820$; $0,3478966$; $0,3056096$. Приведены значения параметров центробежного искажения $\Delta_J, \Delta_{JK}, \Delta_K, \delta_J, \delta_K, \Phi_J, \Phi_{JK}, \Phi_K$ и аналогичные данные для H^{11}BF_2 . В. М. Ковба

кни. 10/8/87
1/2 10/8/87
7.6. 10/8/87
для 10/8/87
М.П.

Х. 1987, 19, N16

BF_2H^+
(HBF_2^+)

[om. 30490]

1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 377.