

B-cl-H

V 4886

1963

$\text{BNCl}_2$  (Vi)

$\text{B}_2\text{H}_5\text{Cl}$  (P, Tb, Tm, Ve)

Lyers H.W., Putnam R.E.

Inorgan. Chem., 1963, 2, N 3, 655-657

On the properties of monochlorodiborane

PJX., 1964, 9B14

Bc., J.

F

1964

Соединения  
бора

З Б119. Спектроскопическое изучение реакции трех-  
хлористого бора с водородом. Мочалов К. Н., Ру-  
сецкий О. И. «Тр. Казанск. хим.-технол. ин-та», 1964,  
вып. 33, 103—106

X. 1967.3

1970

B-H-Cl

B<sub>5</sub>H<sub>8</sub>Cl

Y

Murphy C. B.,  
Ensign R. E.

Int. J. Mass Spectrom.  
and Ion Phys, 1970,  
5, ~ 1-2, 157.

(Cu. B<sub>5</sub>H<sub>9</sub>)III

1976

$\text{ClB}_5\text{H}_8$   
 $\text{BrB}_5\text{H}_8$   
 $\text{IB}_5\text{H}_8$   
 $\text{CH}_3\text{B}_5\text{H}_8$   
 $\text{SiH}_3\text{B}_5\text{H}_8$

8Д415. Влияние заместителей в кластерах. Фотоэлектронные спектры 1-, 2- и  $\mu$ -замещенных пентаборана. Ulman J. A., Fehlner T. P. Substituent effects in cluster species. Photoelectron spectra of 1-, 2-, and  $\mu$ -substituted pentaborane (9). «J. Amer. Chem. Soc.», 1976, 98, № 5, 1119—1125 (англ.)

Получены HeI фотоэлектронные спектры 1-ClB<sub>5</sub>H<sub>8</sub> (I), 1-BrB<sub>5</sub>H<sub>8</sub> (II), 1-IB<sub>5</sub>H<sub>8</sub> (III), 1-CH<sub>3</sub>B<sub>5</sub>H<sub>8</sub> (IV), 2-ClB<sub>5</sub>H<sub>8</sub> (V), 2-BrB<sub>5</sub>H<sub>8</sub> (VI), 2-IB<sub>5</sub>H<sub>8</sub> (VII), 2-CH<sub>3</sub>B<sub>5</sub>H<sub>8</sub> (VIII), 1-SiH<sub>3</sub>B<sub>5</sub>H<sub>8</sub> (IX), 2-SiH<sub>3</sub>B<sub>5</sub>H<sub>8</sub> (X),  $\mu$ -SiH<sub>3</sub>B<sub>5</sub>H<sub>8</sub> (XI). Первые вертикальные потенциалы ионизации I—IX равны (в эВ): 10,03; 9,71; 9,06; 10,20; 10,24; 10,04; 9,30; 10,30; 10,40; 10,42; 10,17. Влияние заместителей на МО пентаборана исследовано при помощи модели ЛКВО (линейная комбинация валентных орбиталей). Показано, что на относит. стабильность изомера влияют 2 эффекта: электроотрицательность заместителя и сопряжение  $\pi$  заместителя с остовом пентаборана. Анализ фотоэлектронных спектров I—XI согласуется с измеренными относит. кислотностями по Бронстеду. Библи. 52.

Ю. В. Чижов

(7)

(+2) X

Ф. 1976. 18

$B_2H_5Cl$

1977

9 Б59. Электронографическое исследование молекулярной структуры моноклордидборана. Iijima Такао,

Hedberg Lise, Hedberg Kenneth. An Electron Diffraction Investigation of the Molecular Structure of Monochlorodiborane,  $B_2H_5Cl$ . «Inorg. Chem.», 1977, 16, № 12, 3230—3233 (англ.)

Методом газовой электронографии при комн. т-ре

молекул.  
структ.



№ 1978 N 9

изучена структура молекулы моноклордиборана  $B_2H_5Cl$ .  
 Полученные данные согласуются с моделью симметрии  $C_s$ . Из-за близости расстояний  $B-B$  и  $B-Cl$  точно измерить можно только их среднее значение, однако предположения, основанные на сопоставлении с др. молекулами, позволили получить достаточно точные значения каждого из них. Найдены след. значения основных межъядерных расстояний ( $r_a$ , Å), углов и амплитуд колебаний ( $l$ , Å):  $r(B-Cl)_B$  1,775(2),  $r(B-Cl)$  1,775(5),  $r(B-B)$  1,775(15),  $r(B-H)_{cp}$  1,277(2),  $r(B-H)_h$  1,205(13),  $r(B-H)_m$  1,331(15),  $\angle BVCi$  120,9(3)°,  $\angle H_kBH_k$  125,0(60)°,  $l(B-Cl)$  0,057(3),  $l(B-B)$  0,060(3),  $l(B-H)_k$  0,090(13),  $l(B-H)_m$  0,107(13),  $l(B \dots Cl)$  0,084(5). Амплитуды колебаний, вычисленные из приближенного силового поля, удовлетворяющего частотам колебаний, хорошо согласуются с найденными значениями.

В. Спиридонов

1979

 $\text{CH}_3\text{BCl}_2$ Ссыл. пост.  
колеб. спектры

13 Б199. Колебательные спектры и силовые постоянные нормального и дейтерированного метилдихлорида бора. Becher H. J., Bramsire F. Schwingungsspektren und Kraftkonstanten von normalem und deuteriertem Methylbordichlorid. «Spectrochim. acta», 1979, A35, № 1, 59—61 (нем., рез. англ.)

Измерены ИК-спектры (газ, поликрист. пленка при  $t = -190^\circ$ ) и спектры КР (жидкости)  $\text{CH}_3\text{BCl}_2$  (I) и  $\text{CD}_3\text{BCl}_2$  (II). Используя эксперим. данные по изотопозамещению H/D и  $^{11}\text{B}/^{10}\text{B}$ , предложено отнесение основных колебаний I и II. В приближении модифицированного валентного силового поля выполнен расчет нормальных колебаний I и II, используя точечную группу симметрии  $\text{C}_{2v}$  для скелета  $\text{BCl}_2$ . Получен набор силовых постоянных, включающий коэф. взаимодействия, чувствительные к изотопозамещению. Для I силовая постоянная связи B—C вычислена равной 4,05 мдин/А, а связи B—Cl—3,73 мдин/А. Проведено сравнение силовых постоянных скелета, вычисленных для I, с силовыми постоянными для соединений  $\text{BF}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{BF}_2$ ,  $\text{B}(\text{CH}_3)_3$ ,  $\text{BCl}_3$  и показана переносимость силовых постоянных в этом ряду.

С. Букалов

2.10.79, N13

Соединение В  
 $(\text{H}_3\text{O})_2 - \text{B}_{10}\text{Cl}_{10}$

1983

24 Б337. Соединения с  $2n$ -электронным остовом. Термическое разложение  $(\text{H}_3\text{O})_2 - \text{B}_{10}\text{Cl}_{10}$ . Доказательство образования полиэдрических галогенидов бора,  $\text{B}_n\text{Cl}_n$ ,  $n=13-20$ .  $2n$  Framework electron compounds: the thermal decomposition of  $(\text{H}_3\text{O})_2\text{B}_{10}\text{Cl}_{10}$  revisited. Evidence for the formation of the polyhedral boron halides,  $\text{B}_n\text{Cl}_n$ ,  $n=13-20$ . Saulys D. A., Kutz N. A., Morrison J. A. «Inorg. Chem.», 1983, 22, № 12, 1821-1824 (англ.)

термическое  
разложение

Проведено повторное исследование термич. разложения  $(\text{H}_3\text{O})_2\text{B}_{10}\text{Cl}_{10}$  в условиях динамич. вакуума. Показано, что образуется не один, а несколько кластеров с  $2n$ -электронным остовом. Основными из них являются  $\text{H}_2\text{B}_5\text{Cl}_7$ ,  $\text{HB}_9\text{Cl}_8$ ,  $\text{B}_9\text{Cl}_9$ , смесь к-рых была ранее принята за индивидуальное соединение  $\text{HB}_9\text{Cl}_5$ . Относит. кол-во различных кластеров зависит от условий, в к-рых проводится р-ция. При частоте ЯМР  $^{11}\text{B}$  28,9 МГц спектр  $\text{HB}_9\text{Cl}_8$  состоит из двух линий с отношением интенсивностей 8:1. С помощью ЯМР  $^{11}\text{B}$  и масс-спектрометрии идентифицированы соединения

Х. 1983, 19, ~24

$B_{10}Cl_{10}$ ;  $B_{11}Cl_{11}$  и  $B_{12}Cl_{12}$ . Масс-спектры также указывают на образование транскосаэдрич. галогенидов бора  $B_nCl_n$ , где  $n=13-20$ . А. Н. Китайгородский

$B_3O_3 \cdot HCl_2$

от 16764

1983

10 Д84. Электроотрицательность и энергия связи.  
Electronegativity and bond energy. Sanderson R. T.  
«J. Amer. Chem. Soc.», 1983, 105, № 8, 2259—2261  
(англ.)

Для атомов главных групп предложена система согласованных параметров (электроотрицательностей, неполярных ковалентных радиусов и энергии гомоядерных связей) по эксперим. данным для 304 соединений. Определение энергии связи А—В в отличие от традиционных концепций сводится при известных межъядерных расстояниях к расчету энергии чисто ионной и чисто ковалентной связи А—В и весовых коэф. для этих составляющих, исходя из эффективных зарядов на атомах, вычисляемых на основе принципа выравнивания электроотрицательностей. В качестве примера проведен расчет энергии атомизации молекулы  $B_3O_3 \cdot HCl_2$ .

А. Ф. Шестаков

расчет энергии  
атомизации

Р. 1983, 18, N 10

$B_2H_5Cl$

DM. 23045

1985

5 Л180.. Микроволновый спектр хлордиборана ( $B_2H_5Cl$ ). Microwave spectrum of chlorodiborane,  $B_2H_5Cl$ . Sugie M., Takeo H., Matsumura C. «J. Mol. Struct.», 1985, 131, № 3—4, 225—231 (англ.)

В диапазоне 30—60 ГГц исследованы МВ-спектры 4 изотопич. разновидностей молекулы  $B_2H_5Cl$ . Идентифицированы линии вращательных переходов с  $J \leq 7$  в основном колебательном состоянии, а также квадрупольная СТС линий. Определены значения вращательных постоянных, постоянных квартичного центробежного искажения и постоянных квадрупольной связи ядер хлора ( $^{35}Cl$  и  $^{37}Cl$ ). Вычислены структурные параметры  $B_2H_5Cl$ :  $B...B=1,776$ ,  $B-Cl=1,766$  Å,  $H_b...H_b=2,03$  Å,  $B-B-Cl=121,1^\circ$ . М. Р. Алиев

МВ спектр

ср. 1986, 18, 45

$B_2H_5Cl$

[Dm. 23045]

1985

/ 104: 58642t Microwave spectrum of chlorodiborane,  $B_2H_5Cl$ . Sugie, M.; Takeo, H.; Matsumura, C. (Natl. Chem. Lab. Ind., Yatabe, Japan 305). *J. Mol. Struct.* 1985, 131(3-4), 225-31 (Eng). The microwave spectra of the normal species and 3 isotopic species of  $B_2H_5Cl$  were measured. The rotational consts. obtained are:  $A = 35948.5 \pm 0.2$ ,  $B = 4754.10 \pm 0.03$  and  $C = 4336.18 \pm 0.02$  MHz for a normal species,  $A = 35880.3 \pm 0.2$ ,  $B = 4660.60 \pm 0.03$  and  $C = 4257.23 \pm 0.03$  MHz for  $H_2BH_2BH^{10}Cl$ ,  $A = 36262.8 \pm 0.5$ ,  $B = 4947.23 \pm 0.06$  and  $C = 4501.20 \pm 0.06$  MHz for  $H_2^{10}BH_2BHCl$ , and  $A = 37037.1 \pm 0.8$ ,  $B = 4767.24 \pm 0.11$  and  $C = 4363.01 \pm 0.08$  MHz for  $H_2BH_2^{10}BHCl$ . The structural parameters detd. from these rotational consts. are  $r_s(B...B) = 1.776 \pm 0.003$  Å,  $r_s(B-Cl) = 1.766 \pm 0.004$  Å and  $\angle B-B-Cl = 121.1 \pm 0.1^\circ$ . The distance between the bridge H atoms is  $2.03 \pm 0.03$  Å from the aplanarity ( $I_a + I_b - I_c$ ).

ув спектр,  
транс-ам.  
пост. и  
структурн.  
пост.

с. А. 1986, 104, N 8

$B_2H_5Cl$

(DM-23045)

1985

9 Б1282. Микроволновый спектр хлордиборана,  $B_2H_5Cl$ . Microwave spectrum of chlorodiborane,  $B_2H_5Cl$ . Sugie M., Takeo H., Matsumura C. «J. Mol. Struct.», 1985, 131, № 3—4, 225—231 (англ.)

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 30—50 ГГц измерены вращат. спектры 4 изотопич. образцов хлордиборана,  $H_2BH_2BHC1$  (I),  $H_2BH_2BH^{37}Cl$ ,  $H_2^{10}BH_2BHC1$  и  $H_2BH_2^{10}BHC1$ , в основном колебат. состоянии. Анализ спектров выполнен с учетом кватричного центробежного искажения и Cl-ядерного квадрупольного взаимодействия. Вращат. постоянные I равны в МГц  $A=35948,5(2)$ ,  $B=4754,10(3)$ ,  $C=4336,18(2)$ . Замещенные структурные параметры, определенные из МВ-данных,  $r(B...B)=1,776(3)$ ,  $r(B-Cl)=1,766(4)$  А, угол  $BBC1$   $121,1(1)^\circ$  согласуются со структурными данными по электронной дифракции.

С. Н. Мурзин

кометр,  
структура,  
м.л.,  $\mu$

Х. 1986, 19, 19

$\text{BCl}_2\text{H}^+$  om. 30490 1988  
( $\text{HBCl}_2^+$ ) Jacob M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.  
Data, 1988, 17, N2, 378.

$B_2 - H_2Cl$

1990

Буданцев М. О.,  
Будычев В. Т. и др.

М. П. Оптика и спектроскопия. 1990. 68, № 6.

С. 1296-1302.

(сер.  $N_2 - H_2F$ ; III)

$H_2B-BCl_2$  [OM-33710] 1990

$F_2B-BCl_2$  Stølevik R., Bakken P.,

U. N. J. Mol. Struct. 1990,  
216, 105-111.

$H_4B_2Cl_2$  Cao Yang,  
Wang You-Liang.

1991

Гаогэн. Сюэсяо хуахуе.

Сейрек - Chem. J. Chin. Univ.

1991. 12, N3. C. 353-355.

муре,  
панем

(сир. ●  $B_2H_6$ ; I)

B<sub>2</sub>H<sub>6</sub> - HCl

1991

115: 122749q Tunneling in a linear diborane(6)-hydrogen chloride (B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>-HCl) dimer. Chuang, Carl; Klots, T. D.; Ruoff, R. S.; Emilsson, Tryggvi; Gutowsky, H. S. (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 95(3), 1552-62 (Eng). Rotational spectra were obsd. for eight isotopic species of the diborane-HCl complex with a Balle-Flygare, pulsed nozzle, Fourier transform microwave spectrometer. The dimer has a linear, or at most slightly bent B-B.. H/DCl equil. structure with the H/D end of the HCl attracted sym. to a terminal BH<sub>2</sub> group of the diborane. Three B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>-HCl species homonuclear in the boron were obsd. to tunnel while those with <sup>10</sup>B<sup>11</sup>BH<sub>6</sub> or DCl did not. The tunneling splits each rotational transition into two components of comparable intensity, sepd. by several MHz depending on J and K. The α-dipole transitions are characteristic of a prolate, very near sym. top; only K = 0 and ± 1 transitions were found. Rotational consts. are reported for all species. The B, D<sub>J</sub>, H, (B-C), and D<sub>JK</sub> consts. detd. for <sup>11</sup>B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>-H<sup>35</sup>Cl are for the A<sub>1</sub> tunneling state 1273.364(1) MHz, 5.56(5) kHz, 1.0(8) Hz, 5.3 (2) MHz, and -2.1(3) MHz; for the A<sub>2</sub> tunneling state 1273.856(1) MHz, 11.64(7) kHz, 33.1(9) Hz, 5.70(4) MHz, and -3.21(5) MHz. The chlorine hyperfine

1/8 cncm  
M.A.

C.A. 1991, 115, N12

structure gives the av. torsional displacement of the H/DCl from the  $a$  axis to be  $26.3^\circ$  for the HCl complexes and  $22.5^\circ$  for the DCl. The torsional displacement of the  $B_2H_6$  was found by an inertial anal. of the complexes with HCl. It is very anisotropic, being  $0^\circ$  in the ethylene plane and  $9^\circ$  in the  $BH_2B$  bridging plane. It is suggested that in the tunneling the  $B_2H_6$  reorients by  $180^\circ$  in the bridging plane, coupled with a gear-like counter rotation of the HCl by  $360^\circ$ . The B-H distance is  $2.693 \text{ \AA}$  in the dimers with HCl and the B...D distance is slightly longer at  $2.702 \text{ \AA}$ .



$HCl \dots BCl_3$

1794

Scholz G.,

ab initio THEOCHEM 1994, 115(3), 227-34.  
perman

( $Cl \dots HF \dots BF_3$ ; III)

(Cl<sub>2</sub>B)B<sub>5</sub>H<sub>8</sub>

1995

123: 123683r Molecular structure of 1-(dichloroboryl)pentaborane(9), in the gas phase as determined by electron diffraction and supported by theoretical calculations. Brain, Paul T.; Rankin, David W. H.; Robertson, Heather E.; Alberts, Ian L.; Downs, Anthony J.; Greene, Tim M.; Hofmann, Matthias; von Rague Schleyer, Paul (Dep. Chem., Univ. Edinburgh, Edinburgh, UK EH9 3JJ). *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 1995, (13), 2193-9 (Eng). The structure of gaseous 1-(dichloroboryl)pentaborane(9), 1-(Cl<sub>2</sub>B)B<sub>5</sub>H<sub>8</sub>, was detd. by electron diffraction. The mol. consists of a pentaborane(9) cage substituted at the apical B atom, B(1), by a dichloroboryl group; the BCl<sub>2</sub> moiety is essentially free to rotate about the exo B-B bond. Salient exptl. structural parameters (*r<sub>a</sub>*) are *r*(B-B) (base-base) 182.1(14), *r*(B-B) (base-apex) 173.9(26), *r*(B-B) (apex-exo) 170.1(18), *r*(B-Cl) 172.0(15), *r*(B-H<sub>t</sub>) 126.2(22), and *r*(B-H<sub>b</sub>) 134.6(16) pm (H<sub>t</sub> = terminal H, H<sub>b</sub> = bridging H); Cl-B-Cl 121.7(28)°, B-H<sub>t</sub> 'rise' (above basal-B plane) 15.1(26)°, and B-H<sub>b</sub> 'dip' (below basal-B plane) 62.0(39)°. These conclusions are supported by ab initio (MP2/6-31G° or MP2/DZP level) optimizations of the mol. geometry, and by comparison of the calcd. <sup>11</sup>B NMR chem. shifts (individual gauge for localized orbitals (double zeta)//= gas-phase electron diffraction level [IGLO(DZ)//GED level]) with the exptl. NMR data.

2-й электро-  
структурные  
параметры

C.A. 1995, 123, N10



Rasul, Golam; et al, 2001

теор.  
расчет  
структ.  
и  
стабильн.

Inorg Chem. 2001, 40(10),  
2453-56.

(ср.  $\bullet$   $\text{BFH}_3^+$ ; III)

$BF_2 H_4^+$

2001

Rasul, Golam; et al.,

Inorg. Chem. 2001,  
40(10), 2453-56

неор.  
расшир.  
структ.  
и  
смаф.

(cell.   $BFH_3^+$ ; III)

$BCl_2H_2^+$

2001

Rasul, Bolam; et al.,

неоп.  
расчет  
структ.

Inorg. Chem. 2001,

40(10), 2453-56

смаф.

(calc.  $BFH_3^+$ ; III)



Rasul, Golam; et al., <sup>2001</sup>

теоретический  
анализ.

Inorg. Chem. 2001,  
40 (10), 2453-56

и  
смаз.

(all.  $\text{BF} \bullet \text{H}_3^+$ ; III)