

B-cl-H

1963

V 4886

$\text{BHCl}_2$  (Vi)

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

Lyers H.W., Putnam R.E.

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

On the properties of monochlorodiborane

PJX. 1964, 9B14

Be., J.

F

1964

Сульфиды  
Боры

З Б119. Спектроскопическое изучение реакции треххлористого бора с водородом. Мочалов К. Н., Руслецкий 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

Murphy C. B.

Shacon R. E.

Int. J. Mass Spectrom.

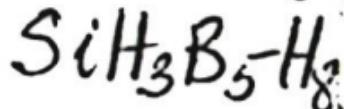
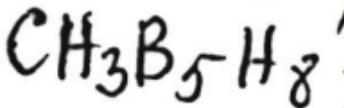
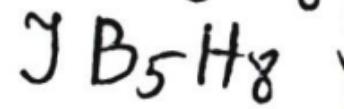
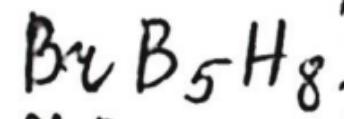
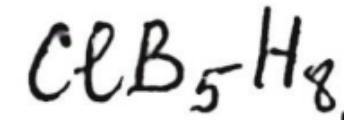
J

and Ion Phys; 1970,

5, n 1-2, 157.

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

1976



(γ)

+2 | 8

8 Д415. Влияние заместителей в кластерах. Фотоэлектронные спектры 1-, 2- и  $\mu$ -замещенных пентaborана. 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-JB<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-JB<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 пентaborана 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 пентaborана. Анализ фотоэлектронных спектров I—XI согласуется с измеренными относит. кислотностями по Бронстеду. Библ. 52.

Ю. В. Чижов

Ф.1976.18

*B<sub>2</sub>H<sub>5</sub>Cl*

*1977*

9 Б59. Электронографическое исследование молекулярной структуры монохлородиборана. Iijima Takaо,

Hedberg Lise, Hedberg Kenneth. An Electron Diffraction Investigation of the Molecular Structure of Monochlorodiborane, B<sub>2</sub>H<sub>5</sub>Cl. «Inorg. Chem.», 1977, 16, № 12, 3230—3233 (англ.)

Методом газовой электронографии при комн. т-ре

*исследоват.  
Смирнов.*

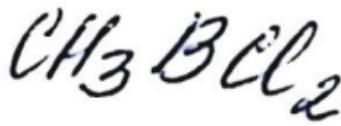
СТБ

*п. 1978 № 9*

изучена структура молекулы монохлордиборана  $B_2H_5Cl$ . 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):  $r(B-Cl, B)_{ср}$  1,775(2),  $r(B-Cl)$  1,775(5),  $r(B-B)$  1,775(15),  $r(B-H)_{ср}$  1,277(2),  $r(B-H)_k$  1,205(13),  $r(B-H)_m$  1,331(15),  $\angle BBCl$  120,9(3) $^\circ$ ,  $\angle H_kBH_k$  125,0(60) $^\circ$ ,  $l(B-Cl)$  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

79/9



Сост. канд.  
Коэф. симм.

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

Измерены ИК-спектры (газ, поликрист. пленка при т-ре —190°) 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  $C_{2v}$  для скелета  $\text{BCl}_2$ . Получен набор силовых постоянных, включающий коэф. взаимодействия, чувствительные к изотопозамещению. Для I силая 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

2.1079N13

Соединение В

$(H_3O)_2 - B_{10} Cl_{10}$

1983

24 Б337. Соединения с  $2n$ -электронным остовом.  
Термическое разложение  $(H_3O)_2 - B_{10} Cl_{10}$ . Доказательство образования ~~полиэдрических~~ галогенидов бора,  $B_n Cl_n$ ,  $n=13-20$ .  $2n$  Framework electron compounds: the thermal decomposition of  $(H_3O)_2 B_{10} Cl_{10}$  revisited. Evidence for the formation of the polyhedral boron halides,  $B_n Cl_n$ ,  $n=13-20$ . Saulys D. A., Kutz N. A., Moggison J. A. «Inorg. Chem.», 1983, 22, № 12, 1821—1824 (англ.)

Проведено повторное исследование термич. разложения  $(H_3O)_2 B_{10} Cl_{10}$  в условиях динамич. вакуума. Показано, что образуется не один, а несколько кластеров с  $2n$ -электронным остовом. Основными из них являются  $H_2 B_9 Cl_7$ ,  $HB_9 Cl_8$ ,  $B_9 Cl_9$ , смесь к-рых была ранее принята за индивидуальное соединение  $HB_9 Cl_5$ . Относит. кол-во различных кластеров зависит от условий, в к-рых проводится р-ция. При частоте ЯМР  $^{11}B$  28,9 МГц спектр  $HB_9 Cl_8$  состоит из двух линий с отношением интенсивностей 8 : 1. С помощью ЯМР  $^{11}B$  и масс-спектрометрии идентифицированы соединения

термическое  
разложение

Х. 1983, 19, № 24

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



*B<sub>3</sub>O<sub>3</sub>·HCl<sub>2</sub>*      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

9.1983, 18, N 10

$B_2H_5Cl$

дт. 23045

1985

15 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  $B_2C_5Cl$ . Идентифи-  
цированы линии вращательных переходов с  $J \leq 7$  в ос-  
новном колебательном состоянии, а также квадруполь-  
ная СТС линий. Определены значения вращательных  
постоянных, постоянных квартичного центробежного  
искажения и постоянных квадрупольной связи ядер  
хлора ( $^{35}Cl$  и  $^{37}Cl$ ). Вычислены структурные параметры  
 $B_2H_5Cl$ :  $B \dots B = 1,776$ ,  $B - Cl = 1,766 \text{ \AA}$ ,  $H_b \dots H_b =$   
 $= 2,03 \text{ \AA}$ ,  $B - B - Cl = 121,1^\circ$ . М. Р. Алиев

МВ спектр

оф. 1986, 18, N5

$B_2H_5Cl$

[Om. 23045)

1985

104: 58642t Microwave spectrum of chlorodiborane,  $B_2H_5Cl$ . Sugie, M.; Takeo, H.; Matsumura, C. (Natl. Chem. Lab. Ind., Yatake, 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  $H_2BH_2BH^{37}Cl$ ,  $A = 36262.8 \pm 0.5$ ,  $B = 4947.23 \pm 0.06$  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  $H_2BH_2^{10}B\bar{H}Cl$ . 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 ( $I_a + I_b - I_c$ ).

N8 CNEKMP,  
HALLSAM.  
NOCM. u  
CNYKMPH.  
NOCM.

c.A.1986, 104, N8

*B<sub>2</sub>H<sub>5</sub>Cl*

om. 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 врашат. спектры 4 изотопич. образцов хлордиборана,  $H_2BH_2BHCl$  (**I**),  $H_2BH_2^{37}Cl$ ,  $H_2^{10}BH_2BHCl$  и  $H_2BH_2^{10}BHCl$ , в основном колебат. состояниях. Анализ спектров выполнен с учетом квартичного 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,  $r(B \dots B) = 1,776(3)$ ,  $r(B - Cl) = 1,766(4)$  Å, угол BBCl  $121,1(1)^\circ$  согласуются со структурными данными по электронной дифракции.

С. Н. Мурзин

*Испитр.,  
Структур.,  
м.н., Ри*

*X. 1986, 19, N 9*

$\text{BCl}_2\text{H}^+$       lom. 30490/      1988  
 $(\text{HB}\text{Cl}_2^+)$       Jacob et al.,

$T_i, P_i$ ;      J. Phys. and Chem. Ref.  
Data, 1988, 17, n2, 378.

$B_2 - H_2$

1990

Будапешт И. О.,  
Будорж Б. Т. и др.

М.Н. Оптика и спектро-  
спектр. 1990. 68, №.

С. 1296-1302.

(см.  $N_2 - H_2 F$ ; III)

H<sub>2</sub>B-BCl<sub>2</sub>      OM·33710      1990

F<sub>2</sub>B-BCl<sub>2</sub> Stølevik R., Bakken P.,

M.N.  
g. mol. struct. 1990,  
216, 105-111.

$H_4B_2Cl_2$  1991

Cao Yang,  
Wang You-Liang.

Paoguo Chongqing Xyachde.

Seepruk - Chem. J. Chin. Univ.  
nypa, 1991. 12, N.3. C. 353-355.  
Naivem

(Cell.  $B_2H_6$ ; I)

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

*1991*

115: 122749q Tunneling in a linear diborane(6)-hydrogen chloride ( $B_2H_6\text{-HCl}$ ) 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  $BH_2$  group of the diborane. Three  $B_2H_6\text{-HCl}$  species homonuclear in the boron were obsd. to tunnel while those with  $^{10}B^{11}BH_6$  or DCl did not. The tunneling splits each rotational transition into two components of comparable intensity, sep'd. by several MHz depending on  $J$  and  $K$ . The  $\alpha$ -dipole transitions are characteristic of a prolate, very near sym. top; only  $K = 0$  and  $\pm 1$  transitions were found. Rotational consts. are reported for all species. The  $B$ ,  $D_J$ ,  $H$ , ( $B\text{-C}$ ), and  $D_{JK}$  consts. detd. for  $^{11}B_2H_6\text{-H}^{35}Cl$  are for the  $A_1$  tunneling state 1273.364(1) MHz, 5.55(5) kHz, 1.0(8) Hz, 5.3 (2) MHz, and -2.1(3) MHz; for the  $A_2$  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

*c.A. 1991, 115, n/2*

structure gives the av. torsional displacement of the H/DCl from the  $\alpha$  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... BCl<sub>3</sub>

1394

Scholz f.,

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

(Cu·RF... BF<sub>3</sub>; III)

$(Cl_2B)B_5H_8$

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),  $1-(Cl_2B)B_5H_8$ , 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  $BCl_2$  moiety is essentially free to rotate about the exo B-B bond. Salient exptl. structural parameters ( $r_a$ ) 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),  $r(B-H_t)$  126.2(22), and  $r(B-H_b)$  134.6(16) pm ( $H_t$  = terminal H,  $H_b$  = bridging H);  $Cl-B-Cl$  121.7(28) $^\circ$ ,  $B-H_t$  'rise' (above basal-B plane) 15.1(26) $^\circ$ , and  $B-H_b$  'dip' (below basal-B plane) 62.0(39) $^\circ$ . These conclusions are supported by ab initio (MP2/6-31G $^\circ$  or MP2/DZP level) optimizations of the mol. geometry, and by comparison of the calcd.  $^{11}B$  NMR chem. shifts (individual gauge for localized orbitals (double zeta)//=gas-phase electron diffraction level [IGLO(DZ)//GED level]) with the exptl. NMR data.

2af necmposh,  
emykmyph  
napanemph

C.A. 1995, 123, N10

$\text{BCH}_5^+$  Rasul, Bolam; et al; 2001

neop.  
racem  
enantiom.  
anadinit.

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

$\text{BCl}_2 \text{H}_4^+$

2001

Rasul, Golam; et al.,

neop.  
racem  
cymeyn.

ii

cmaf.

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

(cell.   $\text{BF}_3\text{H}_2^+;\underline{\text{II}}$ )

$\text{B}(\text{Cl}_2\text{H}_2)^+$

2001

Rasul, Bolan; et al.,

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

CMAF.

(C<sub>11</sub>-BFH<sub>3</sub>)<sup>+</sup>; III,



Rasul, Bolam; et al.,  
2001

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

<sup>K</sup>  
cmas.

(all.  $B\bar{F}_2 H_3^+ ; \text{II}$ )