

B-F-H-O

1856

$\text{BF}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

$\text{BF}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Ford P.T., Richards R.E.

Y. Chem. Soc., 1856, oct., 3870

Спектр сильного поглощения и
сорисбции моно- и дицидров
Триглицеридов

сорисбция

$[\text{BF}_3\text{OH}]^-$ B8 4843-X 1970

Clark M. J. R., Lynton H.,
Can. J. Chem., 1970, 48,

N 3, 405-9

40205.3912

TE, Ch, Ph

 BF_3OH^-

29864

1973

x 25-3274

Archibald Robert M., Armstrong David R.,
Perkins Peter G.

Ab initio study of the electronic structures and heats of formation of some adducts of boron trifluoride.

"J.Chem.Soc.Faraday Trans.", 1973, Part 2,
69, N 12, 1793-1800

(см. $\text{BF}_3 \cdot \text{NH}_3$; 10) (англ.) 0037

019 021

0 30

ВИНИТИ

40205.8912

TE, Ch, Ph

 $\text{BF}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

29864

1973

4-3274

Archibald Robert M., Armstrong David R.,
Perkins Peter G.

Ab initio study of the electronic structures and heats of formation of some adducts of boron trifluoride.

"J.Chem.Soc.Faraday Trans.", 1973, Part 2,
69, N 12, 1793-1800

(англ.)

0037

019 021

0 30

ВИНИТИ

50905.7562

Ch, Ph, TC

29932

 $B_3FH_2O_3$

1975

* 4-9997

Haworth D.T., Scherr V.M. Semi-empirical
MO calculations of some boroxines. "J.
Inorg. and Nucl. Chem.", 1975, 37, N 9,
2010-2011 (англ.)

(см. $B_3H_3O_3$; III)

0437 пик

424 425

0429

ВИНИТИ

оттиски 6380

1978

12 Д524. Обнаружение молекул BFHON и $\text{BH}(\text{OH})_2$ методом микроволновой спектроскопии. Kawashita Yoshiyuki, Takeo Harutoshi, Matsumura Chi. Microwave spectroscopic detection of BFHON and $\text{BH}(\text{OH})_2$. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 57, № 1, 145—147 (англ.)

В микроволновом спектре (26,5—40 Гц) продуктов гидролиза молекул диборана и BF_3 обнаружены и идентифицированы линии вращательных переходов неустойчивых молекул BFHON (I) и $\text{BH}(\text{OH})_2$ (II) с ^{10}B и ^{11}B в основном колебательном состоянии. Определены значения вращательных постоянных и дипольного момента. Показано, что наблюдаемый спектр I относится к изомеру, в котором водород занимает трансположение относительно фтора, а II имеет такую же структуру, как и молекула $\text{BF}(\text{OH})_2$. М. Р. Алиев

ХУ-362

BFHON
 $\text{BH}(\text{OH})_2$

М. Р.

ф. 1978, № 12

Оттиски 6380

1978

BFHON
BH(OH)₂

22 Б253. Обнаружение BFHON и BH(OH)₂ методом микроволновой спектроскопии. Kawashima Yoshiyuki, Takeo Harutoshi, Matsumura Chi. Microwave spectroscopic detection of BFHON and BH(OH)₂. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 57, № 1, 145—147 (англ.)

Измерены в области частот от 26,5 до 40 ГГц МВ-спектры неустойчивых молекул BFHON (I) и BH(OH)₂ (II) в основном колебательном состоянии. Образцы I и II получены в кварцевой трубке при прогреве газовой смеси из BF₃, диборана и водяных паров до т-ры 900°. В спектрах наблюдали линии изотопич. образцов I и II с атомами ¹¹B и ¹⁰B. Для ¹¹B-изотопич. образцов I и II, соотв., определены вращательные постоянные (Мгц) A=70557(804) и 61491(372), B=10271,24(33) и 10281,12(27), C=8965,44(33) и 8804,71(27), компоненты дипольных моментов $\mu_a=1,85(3)$ и $1,46(2)$ D, $\mu_b=0,91(20)$ и $0,15(12)$ D и полные дипольные моменты $\mu=2,06(8)$ и $1,47(2)$ D. С учетом МВ-данных для детерминированных образцов I и II определены конформации молекул.

С. Н. Мурзин

(и.и.)

(+1) ☒

X-1978, N22

XV-3624

BFHOH

Omumuch 6380

1978

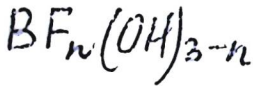
BH(OH)₂

~ confyret.
naplac

89: 120124c Microwave spectroscopic detection of BFHOH and boronic acid (BH(OH)₂). Kawashima, Yoshiyuki; Takeo, Harutoshi; Matsumura, Chi (Natl. Chem. Lab. Ind., Tokyo, Japan). Chem. Phys. Lett. 1978, 57(1), 145-7 (Eng). The transient mols., BFHOH and BH(OH)₂, were detected by microwave spectroscopy in the hydrolysis of diborane and BF₃. Their conformations were detd. from the inertia defects and the differences in moments of inertia between normal and deuterated species.

XV-3621

C.A. 1978, L9, N14



$$n = 0 \div 3$$

кв. мех.
расчет,
геометрия, ρ

ОТТ. 10905



13 Б33. Теоретическое исследование фтороксиборанов $\text{BF}_n(\text{OH})_{3-n}$. DeFrees D. J., Krishnan R., Schlegel H. B., Pople J. A. A theoretical study of the fluorohydroxy boranes $\text{BF}_n(\text{OH})_{3-n}$. «Inorg. chim. acta», 1980, 47, № 1, 19—23 (англ.)

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП проведены расчеты электронного строения, геометрии и колебательных частот для молекул HF , H_2O , $\text{BF}_n(\text{OH})_{3-n}$ ($n = 0-3$). Поиск локальных минимумов на потенциальной поверхности проводился в базисе ОСТ—3ГФ, а геометрия наиболее стабильных ротамеров и частоты гармонич. колебаний уточнялись в расщепленном базисе 3—21ГФ. Расчеты предсказывают для всех соединений плоскую

1980

2.1981. №13

структуру. Из трех ротамеров $\text{BF}(\text{OH})_2$ наиболее стабильна конформация симметрии C_s (что согласуется с эксперим. данными), а ротамеры симметрии C_{2v} имеют энергии на 1,4 и 3,8 ккал/моль больше. Для $\text{B}(\cdot\text{H})_3$ конформация симметрии C_{3h} на 5,1 ккал/моль более стабильна, чем конформация симметрии C_s . Вычисленные геометрич. параметры хорошо согласуются с эксперим. данными, хотя теор. длины связей $\text{B}-\text{F}$ и $\text{B}-\text{O}$ систематически завышены. Теория в согласии с экспериментом указывает на удлинение связей $\text{B}-\text{F}$ и $\text{B}-\text{O}$ при последовательном замещении F группами OH . Обсуждены различия в длинах неэквивалентных связей $\text{B}-\text{F}$ в BF_2OH и $\text{B}-\text{O}$ в $\text{BF}(\text{OH})_2$, отмечено небольшое удлинение связи с лигандом, участвующим во внутримолек. H -связи. Теория несколько преувеличивает величины валентных углов BOH . Рассчитанные частоты колебаний удовлетворительно согласуются с эксперим. данными. Для определения термодинамич. характеристик p -ций последовательного гидролиза BF_3 при найденных оптим. геометриях вычислены корреляционные поправки во 2-м порядке теории возмущений с разделением гамильтониана по Меллеру—Плессету в поляризованном базисе 6—31ГФ. Учтены также колебательные поправки, вычисленные с помощью теор. частот колебаний. Найдено, что полная реакция гидролиза эндотермична и вклады трех стадий гидролиза в полную энергию p -ции (16,9 ккал/моль; эксперим. оценка $12,2 \pm 1,6$ ккал/моль) почти одинаковы: 5,3, 5,7 и 5,9 ккал/моль. Эти изменения энергии получаются в основном уже на хартри-фоковском уровне, а корреляционные и особенно колебательные поправки малы. Вычислены также изменения энтропии и свободной энергии для p -ций гидролиза, проведено сопоставление с др. теор. исследованиями этих реакций.

М. Гофман

FNBOH

[omitted 11880] 1981.

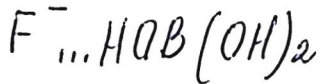
F₂BOH

Boggs J. E., et al.

FB(OH)₂

кв. мех.
расчет
мол. структур
μ

J. Mol. Struct.,
1981, 76, 329-47.

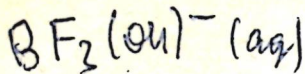


1981

KB. Mex.
jacet

94: 214893h The potassium fluoride-boric acid system. Hydrogen bonding in $KF.H_3BO_3$. Emsley, John; Gold, Victor; Lucas, Jeremy; Overill, Richard E. (Dep. Chem., King's Coll., London, Engl. WC2R 2LS). *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 1981, (3), 783-7 (Eng). Ab initio LCAO-MO-SCF calcns. were made on the most likely interactions between F^- and H_3BO_3 . The ion $[BF(OH)_3]^-$ is the most stable species, but only by 33 kJ/mol relative to the H-bonded system $F^- \cdots HOB(OH)_2$. IR anal. of the solid phase of compn. $KF.H_3BO_3$, which grows from an aq. soln. of KF and H_3BO_3 , shows the H-bonded structure to be the preferred form. The results of ^{19}F and ^{11}B NMR studies on aq. solns. of KF and H_3BO_3 are also consistent, with H bonding being the chief interaction, although an equil. may exist involving $[BF(OH)_3]^-$, since $[BF_3(OH)]^-$ is detectable in such solns.

C.A. 1981. 94 N26



1984

соединение

Расчет электронной структуры и хим. сдвигов ЯМР ^{19}F в $\text{BF}_{4-n}(\text{OH})_n^-$ и $\text{BF}_{4-n}(\text{OON})_n^-$ методом ППДП/2 !
Чернышов Б. Н., Щетинина Г. П., Першин В. Л., Ипполитов Е. Г.

Координац. химия, 1984, т. 10, вып. 2, с. 171—177.

Библиогр.: 19 назв.

— — 1. Фторборные кислоты, соли комплексные — Электронная структура — Расчет.

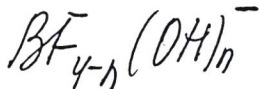
№ 38372

14 № 2846

ВКП 10 IV 84

УДК 541.49

18.5



1984

6 Б1022. Ab initio расчет равновесной структуры комплексных анионов $\text{BF}_{4-n}(\text{OH})_n^-$, BF_3OOH^- . Щетинина Г. П., ~~Першин В. Л.~~, Чернышов Б. Н. «7 Всес. симп. по химии неорганич. фторидов, Душанбе, 9—11 окт., 1984». М., 1984, 351

Неэмпирические расчеты равновесных геометрич. параметров анионов $\text{BF}_{4-n}(\text{OH})_n^-$ и BF_3OOH^- выполнены в базисах OCT-3ГФ и 4-3ГФ по программе GAUSSIAN-76. Обсуждены закономерности изменения электронной и энергетической структуры в ряду $\text{BF}_{4-n}(\text{OH})_n^-$. Из резюме

геометрия,
структура

(H) IX

Х. 1985, 19, N 6

$H_2O \cdot BF_3$

07.26219 1986
У 11 Д129. Электронная структура $H_2O \cdot BF_3$ и родственных соединений $n-v$ аддуктов: совместное исследование методами СЭПЭ — УФЭС в газовой фазе. Electronic structures of $H_2O \cdot BF_3$ and related $n-v$ addition compounds. A combined EELS—UPS study in vapor phase. Durrant M. C., Hegde M. S., Rao C. N. R. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 11, 6356—6360 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Получены спектры энергетич. потерь электронов в интервале 0—16 эВ и УФ фотоэлектронные спектры с возбуждением HeI донорно-акцепторного комплекса $H_2O \cdot BF_3$ (I) в газовой фазе. Для интерпретации эксперимента использованы результаты неэмпирич. расчетов электронной структуры I по программе ГАУССИАН 80 в базе СТОЗГ. Масштабированные одноэлектронные энергии хорошо согласуются с положениями пиков в ФЭС. Построена корреляционная энергетич. диаграмма уровней I и его фрагментов и диаграмма МО, а также обсуждено электронное строение других аддуктов трехфтористого бора.

Е. П. Смирнов

М. А.

ср. 1987, 18, 11

$H_2O \cdot BF_3$

ОМ. 26219

1986

21 Б1138. Электронные структуры $H_2O \cdot BF_3$ и родственных $n-v$ -аддуктов; комбинированное применение фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии потерь энергии электронов в газовой фазе. Electronic structures of $H_2O \cdot BF_3$ and related $n-v$ addition compounds: a combined EELS—UPS study in vapor phase. Dugrant M. C., Hegde M. S., Rao C. N. R. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 11, 6356—6360 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Исследованы спектры потерь энергии электронов (СПЭЭ) в обл. 0—16 эВ для аддуктов льюисовых к-т и оснований: $H_2O \cdot BF_3$ (I), ТГФ (тетрагидрофуран) $\cdot BF_3$ (II) и $(C_2H_5)_2O \cdot BF_3$ (III), а также молекул H_2O , BF_3 , ТГФ, $(C_2H_5)_2O$ в газовой фазе. Для I получен фотоэлектронный спектр (ФЭС) с возбуждением излучением He-I и методом ССП МОЛКАО проведены неэмпирич. расчеты электронной структуры. На основе полученных данных предложено отнесение линий в ФЭС, СПЭЭ и построена корреляц. диаграмма МО для I. Отмечено, что энергии всех орбиталей (как занятых, так и вакантных) BF_3 уменьшаются, а H_2O увеличиваются при обра-

М.П.

⊗ (+2)

Х. 1987, 19, № 21

зовании I (за исключением одной МО $2a_2''$ —BF₃, характеризующей хим. связь) в соответствии с переносом заряда ($\simeq 0,2 e$) от H₂O к BF₃. Предложено предв. отнесение СПЭЭ II и III, к-рые очень близки к СПЭЭ I.

О. А. Басченко

BHF(OH) (om. 25258) 1986

Kawashima Y., Takeo M.,
Matsumura C.,

УФ спектр,
структура

Meizono Kagaku Kaisha,
J. Chem. Soc. Jap., Chem.
and Ind. Chem., 1986,
N11, ● 1465-1475.

BF_3OON^-

Ом. 27654

1987

№ 2 Д129. Ab initio исследование геометрической и электронной структуры аниона BF_3OON^- . Щетинина Г. П., Першин В. Л., Чернышов Б. Н. «Ж. структур. химии», 1987, 28, № 5, 25—29

Приводятся результаты неэмпирич. расчетов геометрической и электронной структуры и барьеров вращения аниона BF_3OON^- . Установлено, что оптимальной является структура аниона с координацией гидропероксигрупп в цис-форме, которая стабилизируется за счет внутримолекулярной водородной связи —OH...F . Барьер внутреннего вращения OH- групп вокруг связи O—O в СТО-3Г равен 3,5 ккал/моль. Получено значение барьера вращения O_1O_2 Н 5,5 ккал/моль (в СТО-3Г) и 11,8 ккал/моль (в 4-31Г), что сопоставимо с энергией водородной связи F...H . Резюме

$V_{\text{вр.}}$

ср. 1988, 18, № 2

BF_3OOH^-

OM. 27654

1987

108: 193037x Ab initio study of the geometric and electronic structures of trifluorohydroperoxyborate (BF_3OOH^-). Sheketinina, G. P.; Pershin, V. L.; Chernyshov, B. N. (Inst. Khim., Vladivostok, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1987, 28(5), 25-9 (Russ). Ab initio calcns. are presented for the mol. and electronic structure and the rotational barrier of BF_3OOH^- . The optimal structure of the anion is with OOH- group coordination in cis-form which is stabilized on account of the intramol. OH...F hydrogen bond. The barrier for internal rotation of the OH group around the O-O bond, calcd. by using an STO-3G basis set, is 3.5 kcal/mol. The barrier to rotation $\text{O}_1\text{O}_2\text{H}$ is 5.5 kcal/mol (with STO-3G) and 11.8 kcal/mol (with 4-31 G), which is comparable with F...H hydrogen bond energy.

моп. прачен
 V_0 , см/сек.

C.A. 1988, 108, N 22

BF_3OON^-

ОМ.

24654

1987

6 Б1069. Ab initio исследование геометрической и электронной структуры аниона BF_3OON^- . Щетинина Г. П., Першин В. Л., Чернышов Б. Н. «Ж. структур. химии», 1987, 28, № 5, 25—29

Проведены неэмпирич. расчеты методом ССП геометрич. и электронной структуры и барьеров вращения аниона BF_3OON^- . Установлено, что оптим. является структура аниона с координацией гидропероксогрупп в цис-форме, к-рая стабилизируется за счет внутримолек. Н-связи $\text{OH}\dots\text{F}$. Барьер внутреннего вращения OH -групп вокруг связи $\text{O}-\text{O}$ в базисе СТО-3ГФ равен 3,5 ккал/моль. Получено значение барьера вращения $\text{O}_1\text{O}_2\text{H}$ 5,5 ккал/моль (в СТО-3ГФ) и 11,8 ккал/моль (в 4—31 ГФ), что сопоставимо с энергией Н-связи $\text{F}\dots\text{H}$. Резюме

М.П.

Х. 1988, 19, № 6

ВФЗОН- 30893, [Ом. 30625] 1988

ВФЗОН- Чернышов Б. И., Кавун В. Я.,
Цетикова Т. И. и др.,

попытка,
структура

жс. Меорган. химии,
1988, 33, № 11, 2761-
● -2767.

$\text{BF}_3 \cdots \text{H}_2\text{O}$ (Dm. 32697) 1988

Evans D. F., Yeo G. A.,
Ford T. A.,

UK chem

ab initio Faraday Discuss. Chem-
soc., 1988, 86, 55-64.

BF₂ OH

Om. 33531

1989

BF₂ OD

Vormann K., Drezler H.,

BF₂¹⁸OH

Z. Naturforsch. A 1989,
44, N 12, 1191-1195

fr. chemp,

M.N.

FOBH₂

Зюбина Т. С.,
Чаркин О. П.

1992

ab initio
расчёт

Ж. неорган. химии.
1992. 37, N 4. С. 865-
-871.

(см. ● FOBH₂; III)

$\text{BF}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

1995

122: 223279m An ab initio study of the $\text{BF}_3\text{-H}_2\text{O}$ complex. Ball, David W. (Department of Chemistry, Cleveland State University, Cleveland, OH 44115 USA). *THEOCHEM* 1995, 331(3), 223-8 (Eng). Ab initio Hartree-Fock and second-order Moeller-Plesset calcns. were performed on the mol. complex $\text{BF}_3\text{-H}_2\text{O}$. Optimized geometries and total energies were detd. using various basis sets, and the calcd. vibrations and interaction energies were detd. using total energies for BF_3 and H_2O . A comparison with exptl. data is presented.

ab initio
paper

C.A. 1995, 122, N18

$\text{BF}_3-\text{H}_2\text{O}$

1995

23 Б1104. Неэмпирическое исследование комплекса $\text{BF}_3-\text{H}_2\text{O}$. An ab initio study of the $\text{BF}_3-\text{H}_2\text{O}$ complex / Ball D. W. // J. Mol. Struct. Theochem .— 1995 .— 331 , № 3 .— С. 223—228 .— Англ.

Неэмпирическим методом ССП, а также с учетом электронной корреляции в рамках теории возмущений Меллера—Плессета второго порядка с использованием базисных наборов различного качества проведены расчеты электронного и геометрич. строения и спектроскопич. х-к комплекса $\text{BF}_3-\text{H}_2\text{O}$. Полученные результаты хорошо согласуются с эксперим. данными.

И. Н. Сенченя

М.П.

Х. 1995, N 23

BF₂DH

[Om 40412]

2010

Marilyn E. Jacox
et al.

UK CRKING

J. Chem. Phys., 2000,
113, N 14, 5705 - 5715