

B-C-N-F-H

V 5221

1950

$\text{CH}_3\text{CN} \cdot \text{BF}_3$ (mon. crystal type)

Heard J.L., Owen T.B., Buzzell A., Salmon O.N.
Acta Cryst., 1950, 3, 130-37

Structures of molecular addition compounds.
II. Methyl cyanide-boron trifluoride, $\text{H}_3\text{CCN} \cdot \text{B} \cdot \text{BF}_3$.

CA., 1950, 44, 7117a

J

$\text{BCl}_2 \cdot \text{VF}_3 \cdot \text{H}_3$

V 5225

1957

$N(CH_3)_3 \cdot BF_3$ (empirical type)

Geller S., Hoard J.L.

Acta Cryst., 1951, 4, 399-405

Structures of molecular addition compounds. IV. Trimethylamine-boron trifluoride

CA., 1951, 9981e

J

CH_3CNBF_3 (comp-p^a). XV-3722 1951

Hoard J. L., Geller S., Owen J. B.
Structure of molecular addition
compounds. V. Comparison of four
related structures.

Acta crystal., 1954, 4, 405-407

CA, 1954, 9981g

nn.

7954
V4298
(CH₃)₃NBF₃ (CH₃)₃NBF₃ (CH₃)₃N, (CH₃)₃NBH
BH₃, B₂H₆, COBH₃, BF₃, COBF₃,
NBH₃, (5₃₀₀)

Shepp A., Bauer S.H.

J. Am. Chem. Soc., 1954, 76, 265-70

Computation of entropy increments in gaseous
bimolecular associations. I. Donor-acceptor
reactions.

C.A., 1954, 5618i.

У 5003

1960

Прокофьев А.М., Шипуло Г.П.

Оптика и спектроскопия, 1960, 8, № 3, 419

Радиоспектроскопическое исследование молекул

F_3BNH_3 $F_3BN(CH_3)_3$ (см. стр. 404)

РЖХ, 1960, № 20, 79996

Ю

$(CH_3)_3NBBr_3$
 $(CH_3)_3NBSe$
 $(CH_3)_3NBBr_2$
(V_i)

5 Д397. Спектральные исследования кислотно-основных комплексов Льюиса. I. Колебательные спектры и отнесение частот триметилиминных комплексов борогаллоидов. Amster Robert L., Taylor Robert C. Spectroscopic studies of Lewis acid-base complexes. I. Vibrational spectra and assignments for trimethylymine complexes of boron halides. «Spectrochim. acta», 1964, 20, № 10, 1487—1502 (англ.)

Исследованы ИК-спектры и спектры комб. рас. 1:1 комплексов $(CH_3)_3NBX_3$, $X=F, Cl, Br$, в твердом состоянии. Наряду с образцами с обычным соотношением $B^{11}:B^{10}$ исследованы обогащенные образцы 99% B^{11} и 92% B^{10} . Приведены таблицы частот и дано отнесение полос в предположении о симметрии комплексов. ~~Сэр.~~
Енбл. 32 назв. Э. Броун

42.1966.58

1964
V-5265

Физ. 10

539.293

Inoue M., Ikeda M.

Piezo-Hall effect in p-type germanium.

J. Phys. Soc. Japan, 1965, 20, N 8, 1542—1543.

Пьезо-эффект Холла в германии *p*-типа.

A-825

1965

ν_i, ν_e , симм. и ас. (комплексы типа
 X_3Z-NR_3 , где

$Z = B, Al$

$X = CH_3, H, F, Cl, Br$ и $R = CH_3, H$

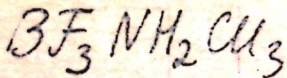
Sandberg W., Goubeau J.,

Z. phys. Chem (BRD), 1965, 44, 227-241

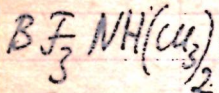
Преп, 1966,

161

10



1987

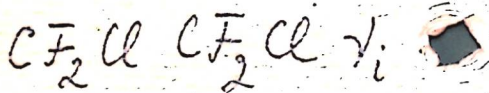
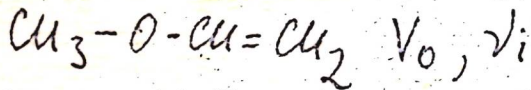
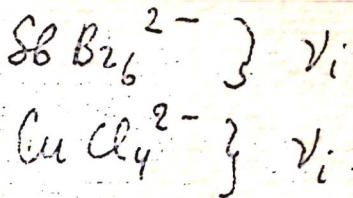
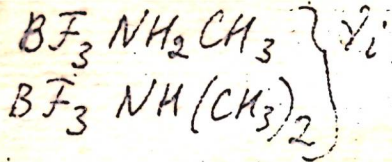


109938a Far infrared, Raman, and N.M.R. spectroscopic studies of molecular structures and properties. Alfred Derek Hunter Clague (Texas A. & M. Univ., College Station). Univ. Microfilms (Ann Arbor, Mich.), Order No. 67-228, 159 pp.; Diss. Abstr. B 27(7), 2310(1967)(Eng). SNDC

$$V_i$$

+6 (corr. no. adsp.) ☒

C. A. 1987. 66. 24



1983

BF₃NH₂CH₃

5 Д358. Протонный магнитный резонанс и спектр в далекой ИК-области комплексов BF₃NH₂CH₃, BF₃NH-(CH₃)₂ и BF₃N(CH₃)₃. Clague A. Derek H., Danti Alfred. Far infrared and proton magnetic resonance spectra of BF₃NH₂CH₃, BF₃NH(CH₃)₂ and BF₃N(CH₃)₃. «Spectrochim. acta», 1967, A 23, № 8, 2359—2369 (англ.)

С целью изучения комплексообразования в системе BF₃ — метиламин исследованы ИК-спектры (50—750 см⁻¹) соединений BF₃NH₂CH₃ (I) и BF₃NH(CH₃)₂ (II) в растворе в хлористом метиле и в виде суспензии в нуйоле. Произведена идентификация полученных полос по типу колебаний. Обсуждено влияние понижения симметрии (C_{3v} → C_s) при переходе от BF₃NH₃ (III)

10, 1983 570

и $\text{BF}_3\text{N}(\text{CH}_3)_3$ (IV) к соединениям I и II на спектр в далекой ИК-области. Изучены также спектры магн. резонанса на протонах метиловой группы соединений I и II. Найдено, что эти ядра связаны с протоном группы $\text{N}-\text{H}$ и с ядром бора. Полученные спектры сравнены с изученными ранее аналогичными спектрами комплексов III и IV. Показано, что в случае IV протоны метиловых групп (кроме ядра бора) связаны также и с ядром F. Определены величины химич. сдвига и констант связей $J_{\text{H}-\text{H}}$ и $J_{\text{H}-\text{B}}$. Библ. 26. А. П. Коузов

V 5932

1967

Kommerey $\text{CH}_3\text{NH}_2\text{-BF}_3$, $(\text{CH}_3)_2\text{NH-BF}_3$,
и $(\text{CH}_3)_3\text{N-BF}_3$ (Vi)

Delaulé J., Taillandier E., Taillander^{M.}

~~Revue. Lett~~ C. r. Acad. sci. Paris, ser. A,
B, 1967, 265 B, n° 7, 921-924

CA, 1968, 68, n° 24, 10969g

10

F₃B · N(CH₃)₃

1969

Lojko M. S.,
Beers V.

sp. noem.

N. Res. Nat. Beer. Stand.,

A43, ~ 2, 233.



(Cu. H₂O) III



B-C-N-F-H

1970

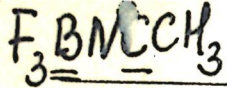
Lappert M.F. и др.

(у)
оценка

J. Chem. Soc., A,
N13, 2320.

Bgr-101-XV

● (см. BCl_3) III



1970

(20191v) Vibrational spectra, vibrational analysis, and bonding in acetonitrile-boron trifluoride. Swanson, Basil; Shriver, Duward E. (Dep. of Chem., Northwestern Univ., Evanston, Ill.). *Inorg. Chem.* 1970, 9(6), 1406-16 (Eng). The ir and Raman data in the 4000-70-cm⁻¹ region have been detd. at 200° for five isotopic species of F_3BNCCH_3 . Also, vibrational data were obtained for 3% F_3BNCCH_3 in host crystals of F_3BNCCD_3 . Several interesting temp.- and host-dependent features were obsd. The foregoing in conjunction with Raman polarization data for the complex in soln. form the basis of assignments. Normal-coordinate calens. based on a constrained general-valence force field aid in assigning the low-frequency region. The frequencies and force consts. are discussed in terms of donor-acceptor interaction. RCHH

1/1

und. vol. 7.

C.A. 1970. 13. 4

$\text{CH}_3\text{CN}-\text{BF}_3$

1970

1 Б253. Колебательные спектры, колебательный анализ и характер связи в комплексе ацетонитрил — трифторид бора. Swanson B., Shriver D. F. Vibrational spectra, vibrational analysis, and bonding in acetonitrile—boron trifluoride. «Inorg. Chem.», 1970, 9, № 6, 1406—1416 (англ.)

ИК и КР-
спектры

Исследованы ИК-спектры и спектры КР (He — Ne-лазер) комплекса $\text{CH}_3\text{CN} - \text{BF}_3$, напыленного на охлажденную подложку при $t_{\text{ре}} - 196^\circ$, а также отожженного до $t_{\text{ры}} - 78^\circ$. Исследованы также спектры р-ров комплекса в CH_3CN (Ar⁺-лазер). Проведена интерпретация колебательного спектра комплекса. По сравнению с свободными донором и акцептором ряд колебаний комплекса испытывает сильный сдвиг, причем полосы вал. кол. $\text{C}\equiv\text{N}$ и $\text{C}-\text{C}$ связей сдвинуты в сторону больших частот. Полосы 651 и $\sim 100 \text{ см}^{-1}$

X. 1971. 1

отнесены к вал. кол. связи В—N и деф. кол. группы В—N—C. Проведен расчет нормальных колебаний комплекса. Образование комплекса приводит к увеличению силового коэф. связи $C \equiv N$, в то время как силовой коэф. связи C—C остается без изменений. Наблюдаемое повышение частоты вал. кол. C—C связи объясняется изменением форм колебаний C—C и В—N связей. Сравнение спектров комплексов BF_3 с рядом доноров обнаруживает наличие зависимости между сил. коэф. В—N и энтальпией образования комплекса.

Я. М. Кимельфельд

$(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{BF}_3$

6 Д445. Микроволновый спектр трифторида триметиламин-бора. Длина связи бор — азот. Bryan Philip S., Kuczkowski Robert L. The microwave spectrum of trimethylamine-boron trifluoride. The boron-nitrogen distance. «Inorg. Chem.», 1971, 10, № 1, 200—201 (англ.)

1971

и в. спектр

С помощью спектрометра со штарковской модуляцией при комнатной т-ре измерены и отождествлены микроволн. спектры трех изотопич. образцов молекулы $(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{BF}_3$ в газовой фазе. Определена средняя величина вращательной постоянной B и значение постоянной центробежного искажения ($D_J \approx 0,1 \pm 0,1 \text{ кгц}$). Значение B — N -связи найдено равным $1,65 \pm 0,02 \text{ \AA}$, что отличается от данных $(1,585 \pm 0,63 \text{ \AA})$ рентгеновского анализа (см. «Acta Crystallogr.», 1951, 4, 399) и теоретич. значения $1,636 \pm 0,004 \text{ \AA}$, полученного с помощью метода замещения из ур-ния Крейтчмана («Amer. J. Phys.», 1953, 21, 17).

Г. П.

ф. 1971. 68

1971

13 Б200. Микроволновый спектр триметиламинтрифторид бора. Расстояние бор—азот. Bryan Philip S., Kuczkowski Robert L. The microwave spectrum of trimethylamine—boron trifluoride. The boron—nitrogen distance. «Inorg. Chem.», 1971, 10, № 1, 200—201 (англ.)

Исследованы МВ-вращательные переходы $J=8 \rightarrow 9$ и $J=9 \rightarrow 10$ донорно-акцепторных комплексов триметил-амина с трифторидом бора $(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{BF}_3$ (I), $(\text{CH}_3)_3\text{N}^{15}\text{BF}_3$ (II) и $(\text{CH}_3)_3\text{NB}^{10}\text{F}_3$ (III) в области 31 500—35 200 Мгц. Определены вращательные постоянные $B = 1756,073$ (I), 1759,772 (II) и 1751,621 Мгц (III). Эффекты центробежного искажения малы ($D_J \approx 0,1 \pm 0,1$ кгц) и при анализе не учитывались. С помощью ур-ний Крейч-

$(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{BF}_3$
= 3

м. и.

мол. спектр

X. 1971. 13

мена определены координаты атомов N и B в I—III и определена длина связи $r(\text{B—N}) = 1,636 \pm 0,004$ А. Найденная величина $r(\text{B—N})$ может быть сопоставлена с рентгенографич. значением в тв. образце (S. Geller, L. L. Hoard, Acta Cryst., 1951, 4, 399), $r(\text{B—N}) = 1,585 \pm 0,03$ А, однако определенных суждений о характере изменения этой связи при переходе газ — кристалл сделать невозможно из-за малой точности рентгенографич. исследования. Величина связи $r(\text{B—N})$ I—III сопоставлена также с ее значениями в ряду др. комплексов $(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{BHal}_3$ ($\text{Hal} = \text{Br}, \text{Cl}, \text{J}$) и триметиламин-боране.

А. П. Александров

1941

H_3CCNBF_3

5 Б88. Расчет частот, форм колебаний и средних амплитуд колебаний молекулы ацетонитрил-терхфтористый бор. Devaajan V., Cyvin S. J. Normal coordinate analysis and mean amplitudes of vibration in acetonitrile — boron trifluoride. «Z. Naturforsch.», 1971, 26a, № 8, 1346—1349 (англ.)

Выполнен расчет частот и форм колебаний молекулы H_3CCNBF_3 (I) (симметрия C_{2v}). Из лит. данных для структурных параметров и частот колебаний 5 изотопич. разновидностей I вычислены силовые постоянные наиболее общего силового поля I в координатах симметрии. Из полученных силовых постоянных вычислены средние амплитуды колебаний и величины эффекта сокращения для I (при 0° и $298^\circ K$). Отмечена высокая чувствительность амплитуды несвязанной пары атомов F...N (гош) к частоте крутильного колебания.

М. Р. Алиев

См. п.

76

X. 1942. 5

CH_3CNBF_3

$\nu_{\text{C}}, \mu_{\text{N}}$

C.A. 1941. 45.24

1941

(145588f) Normal coordinate analysis and mean amplitudes of vibration in acetonitrile-boron trifluoride. Devarajan, V., Cyvin, S. J. (Inst. Theor. Chem., Tech. Univ. Norway, Trondheim, Norway). *Z. Naturforsch. A* 1971, 26(8), 1346-9 (Eng). A complete normal coordinate anal. for the MeCN.BF_3 complex was carried out on the basis of a staggered C_{3v} structure and known structural parameters. Mean amplitudes of vibration, Bastiansen-Morino linear shrinkages, and the most important Coriolis coupling consts. were detd.



1971

47752q

Microwave spectrum of trimethylamine-boron trifluoride. Boron-nitrogen distance. Kuczkowski, Robert L.; Bryan, Philip S. (Dep. Chem., Univ. Michigan, Ann Arbor, Mich.). *Inorg. Chem.* 1971, 10(1), 200-1 (Eng). By means of microwave spectroscopy of Me₃N.BF₃, the $J = 8 \rightarrow J = 9$ and the $J = 9 \rightarrow J = 10$ rotational transitions for 3 isotopic species were investigated at sufficiently low pressures to resolve the broad bands into the typical pattern expected for a symmetric-top mol. The B-N-bond distance of the complex in the gas phase was detd. as $1.636 \pm 0.004 \text{ \AA}$.

CJJN

γ
B-N

C.A. 1971. 74. 10

$(CH_3)_3NBF_3$

XV-3434

1977

complex
in a paper

87: 191421s Microwave spectrum and structure of trimethylamine-boron trifluoride. $Me_3N \cdot BX_3$ adduct stability and the reorganization energies of trifluoroborane and borane. Cassoux, Patrick; Kuczkowski, Robert L.; Serafini, Alain (Lab. Chim. Coord., CNRS, Toulouse, Fr.). *Inorg. Chem.* 1977, 16(12), 3005-8 (Eng). The microwave spectrum of D and ^{13}C enriched samples of $Me_3N \cdot BF_3$ were assigned. The structure of the complex was detd. as $d(BN) = 1.636 \pm 0.004$ Å, $d(BF) = 1.387 \pm 0.005$ Å, $d(CN) = 1.476 \pm 0.005$ Å, $d(CH) = 1.10 \pm 0.03$ Å, $\angle CNC = 108.6 \pm 0.2^\circ$, $\angle FBF = 112.4 \pm 0.2^\circ$, and $\angle HCH = 111 \pm 2^\circ$. The reorganization energies of BF_3 and BH_3 upon complexation with Me_3N were calcd. by using an ab initio method (IBMOL6) as 27.9 and 15.1 kcal/mol, resp. This work shows that the differences in the reorganization energies of the 2 acids parallel their Me_3N adduct stabilities and quan. account for a major contribution to their difference in stability.

C.A. 1977, 87, 124

$(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{BF}_3$

XV-3434

1977

м. в. спектр

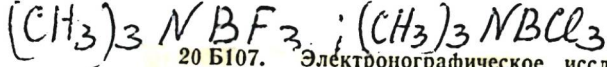
10 Б236. Микроволновый спектр и структура три-
метиламин-бортрифторида. Стабильность аддукта
 $\text{Me}_3\text{N} \cdot \text{BX}$ и энергии перестройки BF_3 и BH_3 . Cas-
soux Patrick, Kuczkowski Robert L., Se-
rafini Alain. Microwave spectrum and structure of
trimethylamine—boron trifluoride. $\text{Me}_3\text{N} \cdot \text{BX}_3$ adduct
stability and the reorganization energies of BF_3 and
 BH_3 . «Inorg. Chem.», 1977, 16, № 12, 3005—3008
(англ.)

Измерены в области частот от 20 до 36 ГГц
МВ-спектры четырех изотопич. образцов триметиламин-
бортрифторида (I), содержащем изотопы D, ^{10}B , ^{11}B
и ^{13}C , в основном и нескольких возбужденных колеба-

2. 1978, N10

тельных состояниях. Для всех образцов определен момент инерции I_B . Постоянная центробежного искажения D_I лежит в пределах от 0,1 до 0,2 кгц. По относит. интенсивностям линий для образца D_9 —I оценена колебательная частота, находящаяся в области от 150 до 200 см^{-1} . Вместе с известными данными для трех других изотопич. образцов I полученные результаты использованы для определения структурных параметров молекулы $r(\text{BN})=1,636(4)$ А, $r(\text{BF})=1,387(5)$ А, $r(\text{CN})=1,476(5)$ А, $r(\text{CH})=1,10(3)$ А, $r(\text{F}\dots\text{F})=2,305(10)$ А, $r(\text{C}\dots\text{C})=2,400(10)$ А, $\angle\text{CNC}=108,6(2)^\circ$, $\angle\text{FBF}=112,4(2)^\circ$, $\angle\text{HCH}=111(2)^\circ$, $\angle\text{CNB}=110,4(3)^\circ$, $\angle\text{FBN}=106,3(2)^\circ$, $\angle\text{HCN}=109(2)^\circ$. На основе структурных данных вычислены энергии перестройки BF_3 и BN_3 при комплексообразовании с триметиламином, соотв., равные 27,9 и 15,1 ккал/моль.

С. Н. Мурзин.



1977

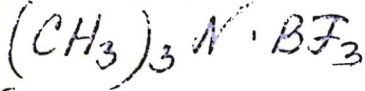
20 Б107. Электронографическое исследование молекулярной структуры двух аддуктов триметиламин — галогенид бора в парообразной фазе. Hargittai Magdolna, Hargittai István. Electron diffraction investigation of the molecular structures of two trimethylamine-boron halide adducts in the vapour phase. «J. Mol. Struct.», 1977, 39, № 1, 79—89 (англ.)

молек.
структ.

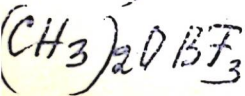
Методом газовой электронографии изучена структура молекул $(\text{CH}_3)_3\text{N}\cdot\text{BF}_3$ (I) и $(\text{CH}_3)_3\text{N}\cdot\text{BCl}_3$ (II). Установлено, что обе молекулы обладают шахматной конформацией. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_a , Å) и углов: I, B—F $1,354 \pm 0,006$, N—C $1,468 \pm 0,010$, B—N $1,664 \pm 0,011$, $\angle\text{FBF}$ $113,1 \pm 0,9^\circ$, $\angle\text{CNC}$ $108,5 \pm 0,7^\circ$; II, B—Cl $1,839 \pm 0,004$, N—C $1,495 \pm 0,004$, B—N $1,659 \pm 0,006$, $\angle\text{ClB/Cl}$ $110,8 \pm 0,3^\circ$, $\angle\text{CNC}$ $108,7 \pm 0,5^\circ$. Структурные изменения, наблюдаемые в акцепторной части молекул, свидетельствуют, что BCl_3 является более сильным акцептором, чем BF_3 . На основе полученных данных обсуждена структура молекулы $(\text{CH}_3)_3\text{N}\cdot\text{B}(\text{CH}_3)_3$. В. Спиридонов.

отмечен 5265
-ссылка на Hargittai

2. 1977 № 20



1977

молекул.
структ.

15 Б114. Молекулярные структуры донорно-акцепторных комплексов трифторида бора с триметиламином и диметиловым эфиром. Shibata Shuzo, Iijima Kinya. Molecular structures of donor-acceptor complexes of boron trifluoride with trimethylamine and dimethyletner. «Chem. Lett.», 1977, № 1, 29—32 (англ.).

Методом газовой электронографии изучены структуры молекул $(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{BF}_3$ (I) и $(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BF}_3$ (II). Установлено, что обе молекулы обладают скрещенной конфигурацией. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_g , Å) и углов: I, N—B 1,673(6), N—C 1,485(3), B—F 1,374(2), F...F 2,291(3), C—H 1,100(4), C...C 2,428(5), FBF 112,9(3)°, CNC 109,6(5)°, BNC 109,3(5)°; II, O—B 1,719(23), O—C 1,425(10), B—F 1,358(7), F...F 2,324(20), C—H 1,117(13), C...C 2,311(42), FBF 117,6(19)°, COC 108,4(31)°, BOC 119,2(32)°.

В. Спиридонов

2. 1977 N 15

$(CH_3)_3 N \cdot BF_3$ [commun 6352] 1978

$(CH_3)_3 N BCl_3$

89: 119839h Spectroscopic calculations for the $(CH_3)_3 N \cdot BF_3$ and $(CH_3)_3 N \cdot BCl_3$ complexes. Cyvin, B. N.; Cyvin, S. J.; Hargittai, M.; Hargittai, I. (Norw. Inst. Technol., Trondheim, Norway). *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1978, 440, 111-18 (Eng). Mean amplitudes of vibration and perpendicular amplitude correction coeffs. are calcd. for $Me_3N \cdot BF_3$ and $Me_3N \cdot BCl_3$ complexes using different versions of force fields originating from spectroscopic studies with somewhat different assignments. The results are discussed in conjunction with the electron diffraction results and bonding features.

cas. res.

(2)

P.A. 1978, 89, N14

$(\text{CH}_3)_3\text{NBH}_2\text{F}$

Оттиски 6358 1978

21 Б267. Микроволновый спектр и структура три-
метиламин-монофторборана. Cassoux Patrick,
Kuczkowski Robert L., Fong Gerald D.,
Geanangel Russell A. The microwave spectrum and

спектр, м.п.



2-1978, N21

structure of trimethylamine-monofluoroborane. «J. Mol. Struct.», 1978, 48, № 1, 25—32 (англ.)

Измерены в области частот от 20 до 38 ГГц МВ-спектры четырех изотопич. образцов триметиламин-монофторборана $\text{Me}_3^{14}\text{N}^{11}\text{BH}_2\text{F}$ (I) $\text{Me}_3^{15}\text{N}^{11}\text{BH}_2\text{F}$ (II), $\text{Me}_3^{14}\text{N}^{10}\text{BH}_2\text{F}$ (III) и $\text{Me}_3^{15}\text{N}^{10}\text{BH}_2\text{F}$ (IV). При идентификации переходов использован метод РЧ-МВ двойного резонанса. Для I—IV соотв. определены вращательные постоянные (Мгц) $A=4620,91$ (2), $4621,24$ (10), $4655,95$ (10) и $4656,05$ (10); $B=2585,20$ (1), $2582,25$ (1), $2595,79$ (1) и $2592,95$ (2), $C=2562,28$ (1), $2559,38$ (1), $2583,49$ (1) и $2580,64$ (2). В предположении, что структурные параметры $r(\text{CH})$, $r(\text{BH})$, NCH , BNC близки к значениям для Me_3NBF_3 (V) и Me_3NBH_3 (VI) для остальных структурных параметров получены значения $r(\text{BN})=1,633$ (6) А, $r(\text{BF})=1,402$ (15) А, $r(\text{C}_1\text{N})=1,492$ (9) А, $r(\text{C}_2\text{N})=r(\text{C}_3\text{N})=1,494$ (16) А, $\text{NBH}=104,7$ (3,7)°, $\text{NBF}=105,3$ (0,5)°. Полученное значение $r(\text{BN})$ близко к $1,636$ (4) А для V и к $1,638$ (10) А для VI, в то время как величины $r(\text{CN})$ и $r(\text{BF})$ отличаются от аналогичных длин связей в аддуктах.

С. Н. Мурзин

литис 9389

1978

$F_3B \cdot N(CH_3)_3$
 $Cl_3B \cdot N(CH_3)_3$

6 Б105. О барьере внутреннего вращения в триметиламинных комплексах трифторида и трихлорида бора. Hargittai Magdolna, Brunvoll Jon. On the barrier to internal rotation in the trimethylamine complexes of boron trifluoride and boron trichloride. «Inorg. chim. acta», 1978, 31, № 1, L379—L380 (англ.)

С использованием полученных ранее электронографич. данных («J. Mol. Struct.», 1977, 39, 79) оценены барьеры внутреннего вращения V_0 вокруг связи бор-азот в молекулах $F_3B \cdot N(CH_3)_3$ (I) и $Cl_3B \cdot N(CH_3)_3$ (II). Найдено, что $V_0 = 6,2$ ккал/моль в I и $V_0 = 13,7$ ккал/моль в II. Полученные значения сопоставлены с аналогичными величинами в родственных молекулах. В. Спиридонов

ИО

2. 1979, N 6

9097. W6

1949

 $\text{CH}_3\text{CN} \cdot \text{BF}_3$ CH_3CN

C.A. 1949

90: 194810r Study of the effect of complexing with boron trifluoride on the force constant of the nitrile group of acetonitrile. Gabdrakipov, V. Z.; Markina, T. I. (Inst. Khim. Nauk, Alma-Ata, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1979, 53(3), 585-7 (Russ). The electronic structures of MeCN and $\text{MeCN} \cdot \text{BF}_3$ were calcd. by the CNDO/2 method. The force const. of the CN bond in the complex and in free MeCN were calcd. by numerical differentiation. The force const. of the CN band increased by 1.04-fold in the complex in comparison to the isolated MeCN mol. which corresponded to an increase in the valence vibration frequency of CN by 48 cm^{-1} , which agreed with the exptl. shift of $70\text{--}100 \text{ cm}^{-1}$. The source of the increase in the force const. of the CN bond is the increase of the skeleton repulsion with a linear configuration of the complex.

(+1) ☒

C.A. 1949, 99, N24

$(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{BF}_3$

17 Б94. Молекулярное строение и внутреннее вращение в трехфтористом бортриметилаmine. Совместное рассмотрение данных по диффракции электронов и спектральных данных. Iijima Kinya, Shibata Shuzo. Molecular structure and internal rotation of trimethylamine-boron trifluoride. A combination of electron diffraction and spectroscopic data. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1979, 52, № 3, 711—715 (англ.)

Методом газовой электронографии проведено исследование трехфтористого бортриметиламина $(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{BF}_3$; на основании полученных результатов и с привлечением известных лит. данных по колебательным и вращательным спектрам определены структурные параметры r_g : N—B 1,674(4) Å, B—F 1,374(2), C—N 1,485(2), C—H 1,100(3), F...F 2,288(2) и C...C 2,420(4). Барьер вращения вокруг оси N—B в газ. фазе найден равным $4,3 \pm 0,3$ ккал/моль, что заметно больше найденной ранее методом ЯМР величины 1,7 ккал/моль. Построено уточненное силовое поле Юри—Брэдли из 20 силовых коэф. и рассчитаны вращательные постоянные молекулы. Б. В. Рассадин

молекуляр.
структ.
иссл. работы

1979, N 14

$NHMeBF_2$

1985

NMe_2BF_2

Kroto Harold W.
McNaughton Donald.

формо-
закрп.
черкрас

J. Chem. Soc. Dalton
Trans., 1985, N 9, 1167-
-1169.

(cell. NH_2BF_2 ; III)

$N(CH_3)_2 \cdot BF_2$

1986

Folly William L.

спектр
связи,
теор.
расчет.

J. Phys. Chem. 1986,
90 (26), 6790-3.

(ср. NH_2BH_2 ; III)



от 28004

1987

7 Б1354. Микроволновый спектр N-метиламинодифторборана, $\text{CH}_3\text{NH}=\text{BF}_2$. The microwave of N-methylaminodifluoroborane $\text{CH}_3\text{NH}=\text{BF}_2$. Georgiou K., Kirby C., Kroto H. W. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 125, № 1, 243—249 (англ.)

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 26,5—40 гГц измерены вращат. спектры двух изотопич. образцов N-метиламинодифторборана, $^{12}\text{CH}_3^{14}\text{NH}^{11}\text{B}^{19}\text{F}_2$ (I) и $^{12}\text{CH}_3^{14}\text{NH}^{10}\text{B}^{19}\text{F}_2$ (II), в основном колебат. состоянии. Образцы I и II получены в результате нагрева до т-р 100—140°С аддукта метиламин-трифторид бора 1:1, $\text{CH}_3\text{NH}_2 \cdot \text{BF}_3$. Анализ МВ-спектров выполнен с учетом квартичного центробежного искажения и внутр. вращения метильной группы. Для I и II, соотв., вращат. постоянные равны в МГц $A=9346,83(48)$ и $9345,32(58)$, $B=3697,786(19)$ и $3702,666(23)$, $C=2692,423(33)$ и $2694,963(40)$. Из $A-E$ расщепления вращат. переходов определен барьер внутр. вращения $V_3=926(25)$ кал/моль. При ряде допущений определены возможные структурные параметры молекулы.

С. Н. Мурзин

М.П.

X. 1988, 19, 17

$\text{CH}_3\text{NH} \cdot \text{BF}_2$ (Im. 28004)

1987

107: 225119y The microwave spectrum of N-methylaminodifluoroborane $\text{CH}_3\text{NH} \cdot \text{BF}_2$. Georgiou, K.; Kirby, C.; Kroto, H. W. (Sch. Mol. Sci., Univ. Sussex, Falmer/Brighton, UK BN1 9QJ). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 125(1), 243-9 (Eng). When the solid donor-acceptor complex $\text{MeNH}_2 \cdot \text{BF}_3$ is heated to 100-140°, the new species $\text{MeNH} \cdot \text{BF}_2$, produced by HF elimination, is found in the vapor. This species was detected and studied by microwave spectroscopy, which yielded no evidence for the parent complex in the vapor. The rotational spectra for $^{12}\text{CH}_3^{14}\text{NH}^{11}\text{B}^{19}\text{F}_2$ and $^{12}\text{CH}_3^{14}\text{NH}^{10}\text{B}^{19}\text{F}_2$ were studied, and the anal. indicates $r(\text{N} = \text{B}) = 1.427 \pm 0.010 \text{ \AA}$, an increase of $\sim 0.025 \text{ \AA}$ on Me substitution over the length in NH_2 . Many of the transitions consist of doublets due to the effects of Me group internal rotation. Anal. of these splittings indicates that the barrier to Me group internal rotation is $926 \pm 25 \text{ cal mol}^{-1}$.

MB complex,
V₀

C.A. 1987, 107, 224.

HCN-BF₃

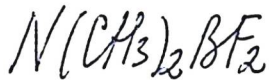
1987

7 10 Д78. Теоретическое исследование влияния координации: силовые постоянные валентных колебаний $C\equiv N$ для $HCN-BF_3$ и $HCN-BCl_3$. Theoretical study of the coordination effect: the $C\equiv N$ bond stretch force constants of $HCN-BF_3$ and $HCN-BCl_3$. Hase Yoshiyuki. «J. Mol. Struct. Theochem», 1987, 151, 223—226 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении МПДП рассчитаны потенциалы связи $C\equiv N$ в HCN (I) и его комплексах с BF_3 (II) и BCl_3 (III). Потенциалы включали члены второй, третьей и четвертой степени. С этими потенциалами оценены гармонические силовые постоянные валентных колебаний: 23,26; 24,18 и 23,85 мдин/А, что качественно согласуется с эксперим. данными. Показано, что за ВЧ-сдвиг колебат. частот при координации за счет комплексообразования ответственны преимущественно квадратичная и кубическая силовые постоянные, причем первая уменьшается, а вторая увеличивается, характеризуя изменение длины связи. В. Л. Лебедев

(4) ☒ ср. 1987, 18, N10

(см. HCN·BCl₃; II)



OM. 28455

1986



Jolly W.L.,

оценка
теории
связи

J. Phys. Chem., 1986, 90,
N26, 6790-6793.

HCN - BF₃

1993

(48 camp)

/ 119: 190998c Microwave spectra and structure of hydrogen cyanide-boron trifluoride: an almost weakly bound complex. Reeve, S. W.; Burns, W. A.; Lovas, F. J.; Suenram, R. D.; Leopold, K. R. (Dep. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, MN 55455 USA). *J. Phys. Chem.* 1993, 97(41), 10630-7 (Eng). Rotational spectra of HCN-BF₃ were obsd. using pulsed-nozzle Fourier transform microwave spectroscopy. Spectra were obsd. for the ¹¹B and ¹⁰B species with both HC¹⁴N and HC¹⁵N, and the hyperfine structures analyzed. The complex has the expected C_{3v} structure, with the nitrogen end of the HCN toward the boron, but the obsd. BN bond length of 2.473(29) Å is notably shorter than that in the related weakly bound systems N:N-BF₃ and N:C-C:N-BF₃. The out-of-plane distortion of the BF₃ cannot be detd. accurately but is probably <3°. The authors compare the structure, force consts., quadrupole coupling consts., and binding energy of the complex with those of other species formed from BF₃ and a variety of nitrogen donors. Despite the rather short B-N bond length, the force const. for the intermol. bond and the boron and nitrogen nuclear quadrupole coupling consts. are comparable to those of a truly weakly bound system.

C. A. 1993, 119, N 18