

B-C-H-O

V 5098

1941

$B(OCH_3)_3$  vapor ( $\angle_{B-O}; \angle_{O-C}; \angle BOC$ )

Bauer S.H., Beach J.V.

J. Am. Chem. Soc., 1941, 63, 1394-403

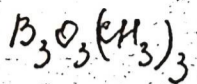
The structures of methyl borate and trimethyltriborine-trioxane. Interatomic distances in boron conformds.

CA., 1941, 4254<sup>5</sup>

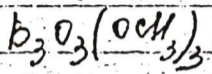
J



1951



Горбун у. Keller H.



Z. anorg. Chem. 267, (13), 1-26

Способы приготовления  
и свойства

сем. пост.



V 5099

1954

$B(OCH_3)_3$  (V1)

Bectrer H.J.

Z. Phys. Chem. (Frankfurt), 1954, 2, N 5-6,  
276-289

Schwingungsspektrum und Struktur des Borsäure  
methylesters.

PJX., 1956, 18505

J



$H_3BO_3$

R. L. Wornat, K. G. O'Brien (1955)

Austral. J. Chem. 8, 355-360.

И. К. сульфид эфиров борной  
кислоты -

Во всех сульфидов и. о. и. полове,  
связаны с  $CH, CH_2, CH_3, CO$ , обнаружены  
линейная полова  $1340 \pm 10 \text{ см}^{-1}$

РМФ  
29886

1956

Исследования описаны в  
симметричных валент. колеб. групп  $BO_3$ .

139-V-534

$\text{HB}(\text{OCH}_3)_2^+$  (A.P.)

1956

Law R.W., Margrave J.L.

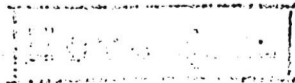
J. Chem. Phys., 1956, 25, N 5, 1086-  
1087. (англ.)

Масс-спектрометрические потенциалы  
появления положительных осколочных  
ионов из  $\text{BF}_3$ ,  $\text{B}(\text{CH}_3)_3$ ,  $\text{B}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$  и

РХ., 1957, N 13, 43703

$\text{HB}(\text{OCH}_3)_2$ .

И



$H_3BO_3$

R. L. Werner, K. G. O'Brien 1956

Austral. J. Chem. 9, 11, 137-138.

И. К. Селефть илюзорно  
символично донес барна  
илюстри

Корона 1340 ± 10 см<sup>1</sup> ирригация  
вакцинация коаб. седи в-о.

РМО, 1957

5110

V 5079

1957

$\frac{B^{10}H_3CO}{B^{10}D_3CO}$ , (Vi; силов. постоянн)

Bethke G.W., Wilson M.K.

J.Chem. Phys., 1957, 26, N 5, 1118-30

Vibrational spectrum of borine carbonyl.

PJX., 1958, N 5, 13524

J.

F

V 5103

1957

$\text{Vi (B(OCH}_3)_3)$

Servoss R.R., Clark H.M.

J.Chem. Phys., 1957, 26, N 5, 1179-1184

Vibrational spectra of normal and  $\text{B}^{10}$ -labeled

PHX., 1958, 42300

J

1958

V 4166

B-O, B-H, B-CH<sub>3</sub>, B-N (Z)

Bellamy L.J., Gerrard W., Lappert M.F.,  
Williams R.L.

J. Chem. Soc., 1958, June, 2412-15

*Ультрафиолетовые спектры соединений бора*

PJK., 1959, N 7, 22251.

J.

V 5094

1958

$(\text{CH}_3)_2\text{BOH}$  (Vi, силов. пост.)

Ulmschneider D., Goubeau J.,  
Z. phys. Chem., (BRD), 1958, 14, N1-2, 56-60

Инфракрасный спектр диметилборной  
кислоты.

PJX., 1959, N 15, 52396

J



V4476 - ВРД

1959

$B(OH)_3$ ,  $B(OD)_3$ ,  $B(CH_3)_3$ ,  $(CH_3)_2BOH$ ,  $CH_3B(OH)_2$ ,  
 $B(OCH_3)_3$ ,  $(CH_3)_2BOCH_3$ ,  $CH_3B(OCH_3)_2$ ,  $F_2BOCH_3$ ,  
 $(F_2BOCH_3)_2$ ,  $FB(OFH_3)_2$ ,  $B_2O_3(CH_3)_3$ ,  $B_3O_3(OH)_3$ ,  
 $B_3O_3(OD)_3$ ,  $Na_3B_3O_3$ ,  $Ca(B_2O_4)$  (Vi силов. поетая.)

Goubeau J., Hummel D.

Z. Phys. Chem. (BRD), 1959, 20, N 12, 15-33

Колебательные спектры радикальных борокислородных соединений

РЖХ., 1960, N 18, 72267  
J



KB(OCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>  
CB(OCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>  
Cl<sub>2</sub>BOCH<sub>3</sub>

Lehmann W. J., Anax T. P., Shapiro I.

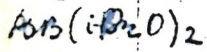
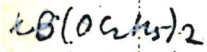
J. Chem. Phys., 1959, 30, 1215

ИК-спектры ароматических

I. KB(OCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> и CB(OCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

ibid., 1219.

II. CB(OCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> и Cl<sub>2</sub>BOCH<sub>3</sub>



Lehmann W. J., Weiss H. G., Shapiro J.,

J. Chem. Phys., 1959, 30, 1222.

UK-неприм алкоксидоуглевод.

III. Ди- и трифтороуглевод.

ibid., 1226.

IV. Ди- и триизопропоксиуглевод.

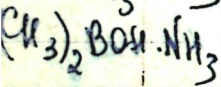
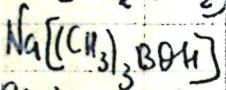
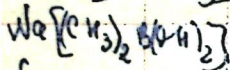
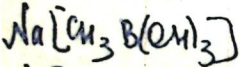
1960

Власт. У. А. и др.  
У. Chem. Soc. 1960 Jan. 380

ИК. спектры этилен- и о-фенилен  
производных берной к-ты

III В-С-Н-О-Х

1960



$\frac{1}{2}$

21Б111. Колебательные спектры некоторых производных диметилборной кислоты. G o u b e a u J., E w e r s J. W. Die Schwingungsspektren einiger Derivate der Dimethylborsäure. «Z. phys. Chem.» (BRD), 1960, 25, № 3-4, 276—282 (нем.).—Исследованы спектры комб. расс. жидкой диметилборной к-ты, а также ИК-спектры поглощения диметилборной к-ты и соединений:  $Na[(CH_3)_3B(OH)_3]$ ,  $Na[(CH_3)_2B(OH)_2]$ ,  $Na[(CH_3)_3BOH]$  и  $(CH_3)_2BOH \cdot NH_3$ . Произведено отнесение наблюдаемых частот.

В. Коряжкин

x. 1961.21

1961

 $(\text{CH}_3)_3\text{BO}$ 

pamuk

Raman spectra of organic compounds. II. Methyl borate. K. Krishnan (Indian Inst. Sci., Bangalore). *Proc. Indian Acad. Sci.* 54A, 89-98(1961); cf. CA 55, 19478h.—The Raman spectra, of Me borate obtained with  $\text{Hg } \lambda 2537$  excitation was recorded. Entropy, heat content, heat capacity, and free energy of the mol. and force consts. were calcd. Raman lines (34) were assigned, based on a comparison of infrared and Raman spectra, and on the assumption that mol. symmetry is  $\text{C}_{3v}$ . I. J. Siewers

C.A. 1962, 56, 9  
9592e

11962

$B_2(OMe)_4$   
 $B_2[N(Me)_2]_4$

v.  
und. no. f.

Infrared and Raman spectra and structures of  $B_2(O-Me)_4$  and  $B_2[N(Me)_2]_4$ . H. J. Becher, W. Sawodny, H. Noeth, and W. Meister. (Tech. Hochschule, Stuttgart, Ger.). *Z. Anorg. Allgem. Chem.* 314, 226-37(1962).  $B_2(O-Me)_4$  spectra were measured in the liquid state. According to the selection rules and the calcd. and observed frequencies, the compd. has a planar arrangement of the skeletal atoms with the point group  $C_{2h}$ . The force consts. are:  $k_{BO} = 5.15$ ,  $k_{BB} = 3.0$ ,  $k_{BO/BO} = 0.35$ ,  $k_{OBO} = 0.50$  millidyne/A.  $B_2[N(Me)_2]_4$  spectra were measured on liquid samples. According to the selection rules and the calcd. and observed frequencies, the mol. has  $D_2$  symmetry; therefore, not all the B, N, and C atoms can be planar. It seems that the  $NC_2$  and the  $BN_2$  groups are twisted out of the mol. plane.

Y. Hess

C.A. 1962. 57. 9

1763 f



1962

1В97. Колебательные спектры и структура  $B_2(OCH_3)_4$  и  $B_2[N(CH_3)_2]_4$ . Becher H. J., Sawodny W., Nöth H., Meister W. Schwingungsspektren und Strukturen von  $B_2(OCH_3)_4$  und  $B_2[N(CH_3)_2]_4$ . «Z. anorgan. und allgem. Chem.», 1962, 314, № 3-4, 226—237 (нем.; рез. англ.)

Измерены спектры комб. расс. и ИК-спектры жидких  $B_2(OCH_3)_4$  (I) и  $B_2[N(CH_3)_2]_4$  (II). Предложено отнесение частот, основанное на правилах отбора и расчетах моделей. I обладает плоской структурой (симметрия  $C_{2h}$ ). Силовые постоянные (мдин/А):  $k_{BO} = 5,15$  и  $k_{BV} = 3,0$ . Последняя величина превышает  $k_{BV}$  в  $B_2Cl_4$ . Упрочение связей В—О и стабилизация плоской структуры I объясняются сопряжением групп  $BO_2$  в результате взаимодействия неподеленных электронных пар атомов О с вакантными р-орбитами атомов В. Структура II является неплоской. Группы  $BN_2$  повернуты друг относительно друга на  $\sim 30^\circ$ . Величина угла определяется конкуренцией между влиянием сопряжения и стерич. факторами. Величина  $k_{BN}$  оценена приближенно (5,5—6,0). Она несколько превышает  $k_{BN}$  в  $B[N(CH_3)_2]_3$ .

 $B_2(OCH_3)_4$  $B_2[N(CH_3)_2]_4$ 

ф. 1963. 1.

Ю. Варшавский

B9-V-7032  
~~V 5113~~

1963

$B_4H_8CO$  (wi, emfayk mypa )

Taylor R.C., Dahl A.J., TerHaar G.L.

Internat. Sympos. Molec. Struct. and spectro  
Tokyo, 1962, s 1, A 312/1-A312/4

Vibrational frequencies, assignments and  
structure of  $B_4H_8CO$ .

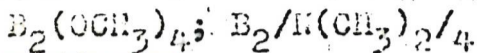
PJX., 1963, 15B86

J





1963



V 5104

(СИЛОВАЯ ПОСТ.)

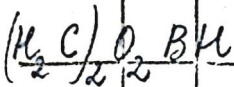
Becher H.J., Sawodny W., Höth H.,  
Meister W.

Schwingungsspektren und Strukturen  
von  $B_2(OCH_3)_4$  und  $B_2/H(CH_3)_2/4$ . "Z. an-  
organ. und allgem. Chem.", 1962, 314,  
N. 3-4, 226-237 (нем., рез. англ.)

РХ., 1963, 1, Б97

10

1984



Finch A., Steele D.

Trans. Far. Soc., 1964, 60, N12,  
2125.

Колесат.  
Спектр

Колесательные спектры  
некоторых гетероциклических  
соединений. М. Т. Вил-  
кинсон.



[Сое.  $(\text{H}_2\text{C})_2\text{O}_2$  ВК]

B(OCH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>

h.k.

V-5702

1964

Isotopic effect in the infrared spectrum of trimethyl borate and its molecular structure. Jose R. Barcelo Martutano. *Anales Real Soc. Espan. Fis. Quim.* (Madrid) Ser. B 60(12), 763-70 (1964)(Span). The ir spectra of the highly volatile B(OMe)<sub>3</sub> were studied by using samples contg. different amts. of <sup>10</sup>B and <sup>11</sup>B. One sample contained only <sup>11</sup>B; another sample had equal amts. of <sup>10</sup>B and <sup>11</sup>B; and a 3rd sample had the natural isotopic compn. The app. used was a Beckman IR 7, with a gas cell 10 cm. long, and 0.5 cm. of pressure preferably, obtaining the spectra

at 650-4000 cm.<sup>-1</sup> A Perkin-Elmer 521 was used for the spectra at 400-650 cm.<sup>-1</sup> The ir spectra were compared to the Raman spectra reported by Kohlrausch (*Raman Spektren*, Leipzig: Acad. Verlag. Becker and Erler, 1943). The results agree with the theoretical, in which 15 different frequencies must be present in the ir spectrum and 22 in the Raman spectrum. It is clear that the Raman spectra reported in the past fall short of 22.

Thomas Garcia-Borras

C.F. 1965. 63. 10

12515h - 12515a

V4202

M. 1969

$\text{CH}_3^+$ ,  $\text{CHO}^+$ ,  $\text{CH}_3\text{O}^+$ ,  $\text{BO}_2^+$ ,  $\text{B}(\text{OCH}_3)(\text{CH}_3)^+$ ,  $\text{BO}_3^+$ ,  
 $\text{B}(\text{OCH}_3)(\text{OCH}_2)^+$ ,  $\text{B}(\text{OCH}_3)_2^+$ ,  $\text{OB}(\text{OCH}_3)_2^+$ ,  $\text{B}(\text{OCH}_3)_3^+$   
 (A.P.,  $\Delta H_f$ )

Bφ-10010-IV

Wada Y., Kiser R.W.

J. Phys. Chem., 1964, 68(6), 1588-90 (ampl)

Amass spectrometric study of trimethye barate.

PJXim., 1965, 9B72  
J., M.

Shewmber m<sup>F</sup>

B-C-H-O  
с. и об.

(y)

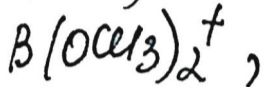
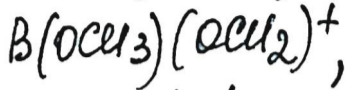
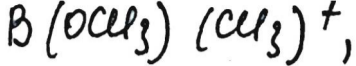
A.P.

11-01001-10

Wada Y, [BQ-4202-V] 1964  
Kisez R.W.

J. Phys. Chem., 1964,  
68, 26, 1588.

[C. B-C-H-O] I



$H_3B-BH_3$  ;  $H_3B-CO$  (D<sub>0</sub>)

8-  
V 4324 1965

Fehlner T. P., Koski. W. S.

J. Amer. Chem. Soc., 1965, 87, N3, 409-413 (auth.)

The dissociation of  $BH_3CO$  into  $BH_3$  and  $CO$ .

PIH Susm., 1965,  
225 ~~509~~ 509

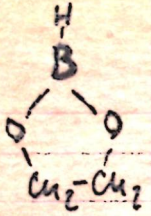
ЕСТЬ ОПТИК.

M (95)

2

1966

V-5607



42099g Microwave spectra, molecular structure, quadrupole coupling, dipole moment, and ring bending vibration of 1,3,2-dioxaborolane. J. H. Hand (Michigan State Univ., East Lansing). *Univ. Microfilms* (Ann Arbor, Mich.), Order No. 66-6129, 123 pp.; *Diss. Abstr. B* 27(4), 1113(1966)(Eng). SNDC

C.A. 1967. 66. 10



1967

Meller A. Schaschel 8

Monatsh Chem. 98, №2, 390

ИК-спектры В-метоксипи  
В-флуоридперометаксидразинол  
-бороксидов и флуоридметоксид( $\alpha_3$ )-бороксидов

III (CD<sub>3</sub>)<sub>3</sub>BF<sub>3</sub>

V 5997

1964

$\text{CH}_3\text{B}(\text{OH})_2$ ,  $\text{Cl}_2\text{BOCH}_3$ ,  $\text{ClB}(\text{OCH}_3)_2$ ,

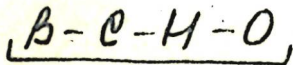
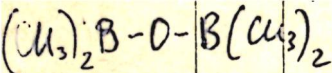
$(\text{CH}_3)_2\text{BOH}$  (Vi, emiss. uoem.)

de Moor J.E., van der Kelen G.P.,  
Eekhout Z.,

J. Organometal. Chem., 1967, 9, 11,  
31-42

CA, 1967, 67, v16, 77634e

HO



1968

38864x  $\pi$ -Bonding in the boron-oxygen bond. Lanthier,  
G. F.; Graham, W. A. G. (Univ. Alberta, Edmonton, Alberta).  
*Chem. Commun.* 1968, (13), 715 (Eng). Results from variable  
temp. N.M.R. studies of dimethylboric anhydride indicated that  
both lone electron pairs were involved in  $\pi$ -bonding to the 2 B  
atoms.

CCJN

C.A. 1968.69.10

B-C-H-O

By  $H_2$  CO

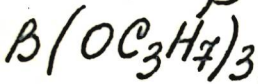
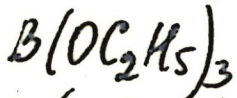
mass-  
spec

Hollins R. 8.  
Stafford F. 8.

1970

Georg. Chem., 9 (4), 877.

(coll. B<sub>5</sub> H<sub>2</sub>) III



(4)  
оценка

BP-101-XV

B-C-H-O

1970

Zappert M. F. и др.

J. Chem. Soc.,

A, n 13, 2320.

(сое.  $BCl_3$ ) III

40219.7293  
Ph, Ch, TE

(BC13)203

56004

1973

1730a

Gropen Odd, Vassbotn Per.  
Approximate self-consistent field  
molecular orbital calculation on  
trithiadiborolane, dichlorotrithiadiboro-  
lane, dimethyltrithiadiborolane,  
trioxadiborolane, dichlorotrioxadibo-  
rolane, and dimethyltrioxadiborolane.  
"Acta chem.scand.", 1973, 27, N 8, 3079-3084  
(англ.)

033 034

011 ВИНИТИ

1974

 $(C_6H_5)_2(OH)_2$ 

Лыкин В.И., Смошков В.В.

Журн. физ. химии, 1974, 48,  
" №4, 1003-1005

расчет

Анализ спектра поверхност-

заселенности

ных гидроксильных групп

свечи

кременезема методом молеку-  
лярных орбиталей

X1974

N15

 $(\text{sil}(\text{CH}_3)_3 \text{SiOH}; \text{III})$ 

Заг. 24



40522.1944

TE, Ch

$B_2H_4(CO)_2$

свойства, спектры  
40534 02

1974

XЧ 5019

Rathke Jerome, Schaeffer Riley. Bis(carbonyl)diborane(4).

"Inorg. Chem.", 1974, 13, N 3, 760-761  
(англ.)

0110 БИЗ

092 095

ВИНИТИ



1976

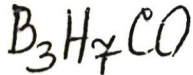
$B_2H_4(CO)_2$

$B_3H_7CO$

pl. were.  
packed  
crystals.  
Super

84: 185248n The electronic structures of bis(carbonyl)diborane(4), triborane(7) carbonyl and their parent boranes diborane(4) and triborane(7). Armstrong, D. R. (Dep. Pure Appl. Chem., Univ. Strathclyde, Glasgow, Scot.). *Inorg. Chim. Acta* 1976, 18(1), 13-18 (Eng). The electronic structures of bis(carbonyl)diborane(4),  $B_2H_4(CO)_2$ , triborane(7) carbonyl,  $B_3H_7CO$ , and their parent boranes were calcd. with a nonempirical LCAO-MO-SCF method. The carbonyl groups are weakly bound to the borane portion. The staggered form of  $B_2H_4(CO)_2$  is more stable than the eclipsed configuration by 74 kJ/mole. The structure of  $B_2H_4$  was calcd. to be 2  $BH_2$  groups in a staggered conformation joined by a B-B bond. The optimized bond lengths, B-B = 1.683 Å, B-H = 1.202 Å, and bond angle H-B-H = 116.2° were obtained. The energy of rotation about the B-B bond in  $B_2H_4$  is 57.2 kJ/mole; optimization of the geometry of the eclipsed configuration, reduced this energy barrier by 6.3 kJ/mole. The electron ds. within the  $B_3$  rings of  $B_3H_7CO$  and  $B_3H_7$  are discussed. The presence of the carbonyl group only marginally alters the bonding within the BBB triangle, which consists of a distorted 3-center bond. The bridging H atom, which lies almost in the same plane as the 3 B atoms, interacts with the inplane orbitals of 2 of the B atoms, and hence deforms the electron configuration within the ring. The at. charge ds. and overlap populations are also given for  $BH_3CO$ ,  $BH_3$ , and CO.

C.A. 1976  
84, 126



16 Б25. Электронное строение бис(карбонил)диборана(4), триборан(7)карбонила и родственных им боранов: диборана(4) и триборана(7). Armstrong D. R. The electronic structures of bis(carbonyl)diborane(4), triborane(7)carbonyl and their parent boranes: diborane(4) and triborane(7). «Inorg. Chim. Acta», 1976, 18, № 1, 13—18 (англ.)

1976

(м, н)

Неэмпирическим методом ЛКАО ССП выполнены расчеты электронных структур ряда карбонил боранов [бис(карбонил)диборана(4), триборан(7)карбонила,  $BH_3CO$ ] и их родственных боранов [диборана(4) и триборана(7)]. Использован двухэкспонентный базис сгруппированных гауссовых функций. Найдено, что карбонильная группа довольно слабо связана с борановой частью молекулы. Связь В—С донорно-акцепторного типа (СО выступает как  $\sigma$ -донор и  $\pi$ -акцептор). Из данных по заселенностям перекрывания В—С сделан вывод, что связь В—С наименее прочна в молекуле  $B_3H_7CO$ , это находится в соответствии с эксперим. данными о том, что  $B_3H_7CO$  при разложе-

перекр  
ите

X. 1976 N 16

72 17

нии переходит в  $\text{B}_2\text{H}_4(\text{CO})_2$ . Найдено, что шахматная конформация  $\text{B}_2\text{H}_4(\text{CO})_2$  более выгодна, чем затменная на  $\sim 74$  кдж/моль. Для  $\text{B}_2\text{H}_4$  найдено, что наиболее выгодна шахматная конформация двух групп  $\text{BH}_2$ , соединенных связью  $\text{B}-\text{B}$ , без трехцентровых связей  $\text{H}-\text{B}-\text{H}$ , оптимизация геометрии привела к длинам связей  $\text{B}-\text{B}$ : 1,683 А,  $\text{B}-\text{H}$ : 1,202А и валентному углу  $\text{HBN}$  116,2°. Энергия вращения вокруг связи  $\text{B}-\text{B}$  в  $\text{B}_2\text{H}_4$  составляет 57,2 кдж/моль при неизменной геометрии, однако оптимизация геометрии затменной формы  $\text{B}_2\text{H}_4$  понижает барьер вращения до 6,5 кдж/моль. Обсуждено электронное строение кольца  $\text{B}_3$  в  $\text{B}_3\text{H}_7\text{CO}$  и  $\text{B}_3\text{H}_7$ . Найдено, что присоединение карбонильной группы влияет на электронные характеристики связи в треугольнике  $\text{B}_3$  главным образом с того края  $\text{B}_3$ , куда присоединяется группа  $\text{CO}$ , и это приводит к некоторому искажению трехцентральной связи  $\text{B}-\text{B}-\text{B}$ . Мостиковые атомы  $\text{H}$ , которые лежат почти в той же плоскости, что и три атома  $\text{B}$ , взаимодействуют с лежащими вне плоскости орбиталями двух атомов  $\text{B}$  и следовательно деформируют распределение электронной плотности внутри кольца.

Н. М. Клименко



\*y - 14721; XV-3188-1976

эмпири-  
наслед.

85: 102683x Molecular structure of gaseous methyl borate,  $\text{B}(\text{OCH}_3)_3$ . Gundersen, Grete (Dep. Chem., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *J. Mol. Struct.* 1976, 33(1), 79-89 (Eng). The mol. structure of methyl borate was studied by electron diffraction in gaseous phase. The data are consistent with a  $\text{B}(\text{O})_3$  skeleton of  $\text{C}_{3h}$  symmetry. The principal mol. parameters are:  $r_n(\text{B}-\text{O}) = 1.367(4) \text{ \AA}$ ;  $r_n(\text{O}-\text{C}) = 1.424(5) \text{ \AA}$ ,  $\angle\text{BOC} = 121.4(0.5)^\circ$ ,  $\varphi$  (the HCBO-dihedral angle relative to  $0^\circ$  for the *syn* form) =  $23.6(5.6)^\circ$ ,  $l(\text{B}-\text{O}) = 0.046(4) \text{ \AA}$ , and  $l(\text{O}-\text{C}) = 0.044(4) \text{ \AA}$  ( $l$  = the root-mean square amplitude of vibration), as detd. from geometrically consistent  $r_\alpha$ -refinements. The  $l$  values calcd. from spectroscopic data are also given.

C. A. 1976 85 N14

$B(OCH_3)_3$

№ 4-14721

1976

1) 2 Б86. Молекулярная структура газообразного метилбората,  $B(OCH_3)_3$ . Gundersen Grete. Molecular structure of gaseous methyl borate,  $B(OCH_3)_3$ . «J. Mol. Struct.», 1976, 33, № 1, 79—89 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы метилбората,  $B(OCH_3)_3$ . Полученные данные согласуются с симметрией  $C_{3h}$  скелета  $B(OC)_3$ . Найдены след. значения межъядерных расстояний ( $r_a$ , А) и углов:  $B-O$  1,367(4),  $O-C$  1,424(5)  $BOC$  121,4(0,5),  $\Phi$  (двугранный угол  $HCBO$ , равный  $0^\circ$ , для син-формы) 23,6(5,6). Определены также значения среднеквадратичных амплитуд колебаний:  $l(B-O) = 0,046(4)$  и  $l(O-C) = 0,44(4)$  А.

В. Спиридонов

молекулярная структура

8848-111

X 1977 №2

$(\text{CH}_3)_2\text{BOB}(\text{CH}_3)_2$

№ 14794

1976

2 Б87. Молекулярная структура газообразного диметилборного ангидрида,  $(\text{CH}_3)_2\text{BOB}(\text{CH}_3)_2$ . Gundersen Grete, Vahrenkamp Heinrich. Molecular structure of gaseous dimethylboric anhydride.  $(\text{CH}_3)_2\text{BOB}(\text{CH}_3)_2$ . «J. Mol. Struct.», 1976, 33, № 1, 97—105 (англ.)

молекула,  
структ

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы диметилборного ангидрида,  $(\text{CH}_3)_2\text{BOB}(\text{CH}_3)_2$ . Полученные данные согласуются с симметрией  $C_2$  скелета  $C_2\text{BOBC}_2$ . В предположении о свободном вращении метильных групп и плоскостности фрагментов  $C_2\text{BO}$  найдены след. значения межъядерных расстояний ( $r_a$ , А) и углов: В—О 1,359(4), В—С 1,573(4),  $\text{OB}_1\text{C}_1$  117,1(1,3)°,  $\text{OB}_1\text{C}_2$  120,4(1,4)°,  $\text{B}_1\text{OB}_2$  144,4(2,7)°,  $\Phi$  (двугранный угол  $\text{C}_1\text{B}_1\text{OB}_2$ ) 38,2 (3,6)°. В. Спиридонов

XV-3876

X 1977 N 2

B-S-H-O (молек. структ.) 1976

16 Б90. Молекулярная структура газообразного бис-(метилтио)метилборана. Lindöy S., Seip H. M., Seip R. Molecular structure of gaseous bis(methylthio)methylborane. «Acta chem. scand.», 1976, A30, № 1, 54—58 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы бис(метилтио)метилборана (I). Найдено, что в парах I в условиях эксперимента присутствует в основном син-анти форма, скелет которой почти плоско-

ский. Найдены след. значения межъядерных расстояний ( $r_a$ , Å) и углов: C—H 1,086 (5), C—B 1,567 (10), S—B 1,796 (7), S—C 1,818 (6),  $\angle S_2BC$  116,4 (4)°,  $\angle S_4BC$  124,4 (4)°,  $\angle BS_2C$  104,5 (10)°,  $\angle BS_4C$  106,2 (14)°,  $\angle SCH$  112,0 (5)°,  $\angle BCH$  112,5°, двугранные углы  $\Phi(CBS_2C)$  196,7 (55)°,  $\Phi(CBS_4C)$  —17,3 (66)°,  $\Phi(BS_2CH_7)$  200,0°,  $\Phi(BS_4CH_{10})$  190,0°,  $\Phi(S_2BCH_{12})$  75,0°.

В. Спиридонов

X. 1976 №16



$B(OCH_3)_3$

XV-3305

1976

#4-16284

и.к. энерг  
евд. пост.  
Ji

86: 36041d Vibrational spectra, normal coordinate analysis and mean amplitudes of methyl borate,  $B(OCH_3)_3$ . Rogstad, A.; Cyvin, B. N.; Cyvin, S. J.; Brunvoll, J. (Dep. Chem., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *J. Mol. Struct.* 1976, 35(1), 121-32 (Eng). The IR spectra for  $B(OMe)_3$  were recorded in the gas phase and solns. Raman spectra were recorded for the same compd. in the liq. and solid states. The data were interpreted on the basis of a  $C_{3v}$  mol. model. A normal coordinate anal. for the complete model is included. The developed force consts. were used to calc. the mean amplitudes of vibration which were compared with recent results from electron diffraction.

C. A. 1977. 86.6





XV-3305

1976

9 Б191. Колебательные спектры, расчет частот и форм нормальных колебаний, среднеквадратичные амплитуды колебаний метилбората  $B(OCH_3)_3$ . Rogstad A., Cyvin B. N., Cyvin S. J., Brunvoll J. Vibrational spectra, normal coordinate analysis and mean amplitudes of methyl borate,  $B(OCH_3)_3$ . «J. Mol. Struct.», 1976, 35, № 1, 121—132 (англ.).

Исследованы колебательные спектры  $B(OCH_3)_3$  в различных агрегатных состояниях (ИК-спектры 30—4000  $cm^{-1}$ , газ,  $p=5-90$  мм и р-р в  $CCl_4$ ; КР-спектры,  $Ag^+$ -лазер, жидк., тв.). Спектры интерпретировали в предположении  $C_{3h}$  о симметрии остова  $B(OC)_3$  и симм. ориентации  $CH_3$ -групп. При отнесении учитывали контуры полос и их поляризация. Определены значения всех частот нормальных колебаний, вычислены силовые постоянные метилбората [в частности  $f(B-O) = 4,75$  мди/А,  $f(O-C) = 5,78$  мди/А] и распределение потенциальной энергии по нормальным колебаниям. Полученное силовое поле использовано для расчета среднеквадратичных амплитуд колебаний ( $T=0$  и  $298^\circ K$ ).

В. М. Ковба

Диссерт.  
1 лист.

2.1977 IV 9

4-16284

CH<sub>3</sub>·BOB(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

5 Д377. Колебательные спектры и структура газообразного и твердого диметилборного ангидрида. Dugig J. R., Flanagan M. J., Stampf E. J., Odom J. D. Vibrational spectra and structure of gaseous and solid dimethylboric anhydride «J. Mol. Struct.», 1977, 42, 13—25 (англ.)

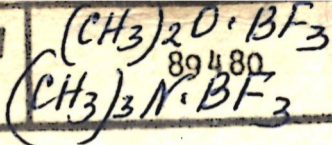
Исследованы спектры комб. рас. в области 10—3500 см<sup>-1</sup> диметилборного ангидрида (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·BOB(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

Di; стp. 22

(I), в газообразном, жидком и твердом состоянии. Получены также спектры ИК-поглощения I в области 30—4000 см<sup>-1</sup>. Спектры молекул I интерпретированы в предположении молекулярной симметрии C<sub>2</sub>. Отсюда следует, что связь В—О—В изогнута, а группы В (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> развернуты относительно друг друга. Это предположение согласуется с данными о высоком потенциальном барьере внутреннего вращения вокруг связей В—О. Исследование спектров кристаллов показывает, что при кристаллизации структура молекул I меняется и связи В—О—В выпрямляются. Спектр внутренних колебаний молекул I в кристаллах интерпретирован в предположении молекулярной симметрии D<sub>2h</sub>. Библ. 22.

Ф. 1978, № 5

70407.7754  
TC, Ch



1977  
\*4-17763

Shibata Shuzo, Iijima Kinya.  
Molecular structures of donor-acceptor  
complexes of boron trifluoride with tri-  
methylamine and dimethylether.

"Chem. Lett.", 1977, N 1, 29-32  
(англ.)

0848 РИЖ

ВИНИТИ

810 810

$(\text{CH}_3)_2\text{BOB}(\text{CH}_3)_2$

1978

и др

C-B соедин.

Диссертация  
исследов.

ссылка

89: 83257a Molecular structure of some compounds of trivalent boron, determined by gas-phase electron diffraction. Gundersen, Grete (Dep. Chem., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *Kem. Kozl.* 1978, 49(3-4), 261-73 (Hung). Final and preliminary mol. structural results from electron diffraction studies of trivalent compds. of  $(\text{CH}_3)_2\text{BXB}(\text{CH}_3)_2$  and  $(\text{CH}_3)_{3-n}\text{B}=(\text{XCH}_3)_n$ ,  $n = 1, 2, 3$ , are presented for  $\text{X} = \text{NH}, \text{O},$  and  $\text{S}$  in addn. to preliminary results for  $(\text{CH}_3)_2\text{NBClBClN}(\text{CH}_3)_2$ . The bond lengths were compared to Schomaker-Stevenson ests. and the magnitude and variation of the bonds to the trivalent boron were related to dative  $\pi$ -bonding. Comparisons were made with some analogous Si compds.

M. I. Ban

С.А., 1978, СД, N10

$\text{BH}_3\text{CN}^-$  - Lammer 9607 | 1979

$\text{BH}_3\text{NC}^-$  - Datta M.K., et al.

$\text{BH}_3\text{OCH}_3^-$  - Indian J. Chem.,

2000, 17, 325-28.  
conf.

● (see  $\text{BH}_3\text{CN}^-$ ; III)

$(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{BH}_3$

XV-3630

1980

Кв. мех.  
расчет

21 Б77. Изучение методом молекулярных орбиталей донорно-акцепторного комплекса  $(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{BH}_3$ . Umeяama H. A molecular orbital study on the  $(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{BH}_3$  donor-acceptor complex. «Chem. and Pharm. Bull.», 1980, 28, № 5, 1633—1636 (англ.)

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП изучено электронное и геометрич. строение донорно-акцепторного комплекса  $(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{BH}_3$ . В расчетах использован базис 4-31ГФ. Для оптим. структуры комплекса найдены значения:  $r(\text{O}-\text{B}) = 1,654 \text{ \AA}$ ,  $\varphi(\text{BOC}) = 152,8^\circ$ , а остальные геометрич. параметры соответствуют лит. данным. Эти значения находятся в хорошем соответствии с полученными недавно эксперим. данными методом ди-

X. 1980 N 21

фракции электронов. Расчет отдельных вкладов в энергию показал, что максим. вклад, ведущий к образованию комплекса, дает энергия электростатич. взаимодействия, к-рая вдвое превышает вклады др. связывающих взаимодействий (поляризац. энергия, перенос заряда, энергия связи) и равна (с обр. знаком) обменной энергии. Эти данные сопоставлены с аналогичными данными для др. родственных систем —  $(\text{CH}_3)_2\text{N}-\text{BH}_3$  и  $\text{NH}_3\cdot\text{BH}_3$ . Отмечено, что основные отличия обусловлены полюс электростатич. взаимодействия. С. Долин

$(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BH}_3$

XV-3630

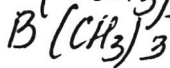
1980

молекула  
сложна

93: 80648a A molecular orbital study on the dimethyl ether-boron trihydride  $((\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BH}_3)$  donor-acceptor complex. Umeyama, Hideaki (Sch. Pharm. Sci., Kitasato Univ., Tokyo, Japan 108). *Chem. Pharm. Bull.* 1980, 28(5), 1633-6 (Eng). A MO study was made of the donor-acceptor complex  $(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BH}_3$ , in comparison with the  $(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{BH}_3$  complex. The driving force for  $(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BH}_3$  complex formation is the electrostatic interaction energy. The interaction energy between  $(\text{CH}_3)_2\text{O}$  and  $\text{BH}_3$  is smaller than that between  $\text{NH}_3$  and  $\text{BH}_3$  by 10.5 kcal/mol due to a difference between the electrostatic terms. In the optimized structure of  $(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BH}_3$ , the distance  $r(\text{OB})$  is 1.65412 Å. The angle  $\angle\text{BOY}$ , where Y is a point on the  $\text{C}_{2v}$  axis of  $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ , is 152.8°. The results agree with the electron-diffraction analyses of  $(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BF}_3$  reported by S. Shibata and K. Iijima (1977).

CA 1980 93 18





B-c (соедин.)

[номер 9241]

1980

Максић З. В.  
etal.

(Ei)

кв. век.  
факт

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

$(\text{CH}_3)_2\text{BOCH}_3$

Оттиск ~~12036~~ 12036) 1981

4 Б147. Структуры молекул (метокси)диметилборана,  $(\text{CH}_3)_2\text{BOCH}_3$ , и бис(метокси)метилборана,  $\text{CH}_3\text{B}(\text{OCH}_3)_2$ , по данным газовой электронографии. Gundersen Grete, Jonvik Torgeir, Seip Ragnhild. Molecular structures of gaseous (methoxy)dimethylborane,  $(\text{CH}_3)_2\text{BOCH}_3$ , and bis(methoxy)methylborane,  $\text{CH}_3\text{B}(\text{OCH}_3)_2$ , studied by electron diffraction. «Acta chem. scand.», 1981, A35, № 5, 325—340 (англ.)

геометрия,  
структура

Методом газовой электронографии изучены структуры молекул  $(\text{CH}_3)_2\text{BOCH}_3$  (I) и  $\text{CH}_3\text{B}(\text{OCH}_3)_2$  (II), а также уточнена структура исследованной ранее молекулы  $\text{B}(\text{OCH}_3)_3$  (III). На основании известных из лит-ры ИК-спектров для молекул I—III получено упрощенное силовое поле, использованное для вычисления амплитуд колебаний и поправок на эффект сокращения. Получены след. параметры  $r_a$  для молекул I, II и III соотв., В—О 1,361(2), 1,375(4); 1,368(2), В—С 1,575(2); 1,571(6); —, О—С 1,421(2); 1,417(3); 1,424(2), С—Н 1,103(2); 1,106(2); 1,106(3) А. Значит. отступления от



(+1)

Х. 1982, 19, № 4

идеальной тригон. координации вокруг атомов бора  
отмечены в I и II, что связано с сильными стерич.  
взаимодействиями заместителей. Молекулы имеют пло-  
ский или близкий к плоскому скелет из тяжелых атомов.  
Проведено сравнение с соотв-щими тиопроизводными.  
В. Матрюкову

$\text{CH}_3\text{B}(\text{OCH}_3)_2$  | Ommuck 12036 | 1981  
Gundersen G., et al.

волокнистая,  
сверхчуждая. Acta chem. scand.,  
1981, A35, N5, 325-340.

(см.  $\text{CH}_3\text{B}(\text{OCH}_3)_2$ ; III)

$(\text{CH}_3)_2\text{BOCH}_3$  (2) ommuch 12036 1981.

$(\text{CH}_3)\text{B}(\text{OCH}_3)_2$  (2) Gundersen B.,  
etal.

молекула,  
структура

Acta chem. scand.,  
1981, A 35, 325-340.

$\text{BH}_3\text{CO}$

1982

8 Д139. Сравнительное теоретическое изучение процессов диссоциации изоэлектронных молекул  $\text{BH}_3\text{CO}$ ,  $\text{CH}_2\text{CO}$ ,  $\text{HNCO}$ ,  $\text{CO}_2$  и  $\text{BH}_3\text{N}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{N}_2$ ,  $\text{HN}_3$ ,  $\text{N}_2\text{O}$ . Comparative theoretical study of the dissociation process of the isoelectronic molecules  $\text{BH}_3\text{CO}$ ,  $\text{CH}_2\text{CO}$ ,  $\text{HNCO}$ ,  $\text{CO}_2$  and  $\text{BH}_3\text{N}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{N}_2$ ,  $\text{HN}_3$ ,  $\text{N}_2\text{O}$ . Breulet Jacques, Lievin Jacques. «Theor. chim. acta», 1982, 61, № 1, 59—72 (англ.)

Основные электронные состояния ряда 22-электронных молекул рассчитаны неэмпирич. методом ССП. Расчеты проводились в базисе гауссовых орбиталей 6—31 ГФ. При помощи оптимизации всех геометрич. параметров определены равновесные ядерные конфигурации. Найдены отвечающие миним. энергиям координаты реакций диссоциации молекул на 16-электронные ( $\text{CO}$  или  $\text{N}_2$  в основном состоянии) и 8-электронные фрагменты ( $\text{CH}_2$ ,  $\text{NH}$ ,  $\text{O}$  в первом возбужденном или  $\text{BH}_3$  в основном состояниях). Отмечено, что характер диссоциации молекул с разными 8-электронными фраг-

расчет  
М.П.

17

ср. 1982, 18, № 8.

ментами существенно различается. Оценены энергии указанных реакций, а также энергии диссоциации по закрытому каналу (с образованием 8-электронного фрагмента в триплетном состоянии). При расчетах этих величин частично учитывалась кулоновская корреляция электронов в молекулах.

А. В. Зайцевский

$BH_3CO$

1982

16 Б77. Сравнительное теоретическое исследование процессов диссоциации изоэлектронных молекул  $BH_3CO$ ,  $CH_2CO$ ,  $HNCO$ ,  $CO_2$  и  $BH_3N_2$ ,  $CH_2N_2$ ,  $NH_3$ ,  $N_2O$ . Breulet Jacques, Lievin Jacques. Comparative theoretical study of the dissociation process of the isoelectronic molecules  $BH_3CO$ ,  $CH_2CO$ ,  $HNCO$ ,  $CO_2$  and  $BH_3N_2$ ,  $CH_2N_2$ ,  $NH_3$ ,  $N_2O$ . «Theor. chim. acta», 1982, 61, № 1, 59—72 (англ.)

геометрия,  
структура

713

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах ОСТ-3ГФ, 6—31ГФ и 6—31ГФ\*\*, с полной оптимизацией геометрич. параметров проведены расчеты ряда 22 электронных молекул:  $BH_3CO$ ,  $CH_2CO$ ,  $HNCO$ ,  $CO_2$ ,  $BH_3N_2$ ,  $CH_2N_2$ ,  $NH_3$ ,  $N_2O$ , продуктов их диссоциации:  $N_2$ ,  $CO$ ,  $O$ ,  $NH$ ,  $CH_2$ ,  $BH_3$ , а также путей их диссоциации. Вклад энергии корреляции учитывался в рамках невариационной процедуры, предложенной ранее (Lievin J., Breulet J., Verhaegen G., «Theoret Chim. Acta»,

X. 1982, 19, N 16.  $CH_2CO$ ,  $HNCO$ ,  $CO_2$ ,  $BH_3N_2$ ;  $CH_2N_2$ ,  $NH_3$ ,  $N_2O$ ,  $N_2$ ;  $CO$ .



1981, 60, 339). Проведен анализ изменения геометрич. параметров и перераспределения электронной плотности по пути р-ции. Результаты расчетов сравниваются с известными структурными и термохим. данными и находятся с ними в удовлетворительном согласии.

И. Абронин

D, NH, CH<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>



BH<sub>3</sub>CO

1982

97:12022z Comparative theoretical study of the dissociation process of the isoelectronic molecules boron carbonyl (BH<sub>3</sub>CO), ethenone (CH<sub>2</sub>CO), isocyanic acid (HNCO), carbon dioxide and diazoborane (BH<sub>3</sub>N<sub>2</sub>), diazomethane (CH<sub>2</sub>N<sub>2</sub>), hydrazoic acid and nitrous oxide. Breulet, Jacques; Lievin, Jacques (Fac. Sci., Univ. Libre de Bruxelles, B-1050 Brussels, Belg.). *Theor. Chim. Acta* 1982, 61(1), 59-72 (Eng). An ab initio study of the electronic structure of several 22-electron mols. is presented. The equil. geometries of their ground state are calcd. at the SCF level using the 6-31G basis set and are in good agreement with the exptl. geometries. The dissocn. process of these mols. leading to the isoelectronic products CO or N<sub>2</sub> on the one hand and BH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, NH and O on the other hand is studied. The least-energy dissocn. paths of the ground states detd. at the SCF level are compared on the basis of electron d. interactions. The dissocn. energies corresponding to the two lowest dissocn. channels are calcd. In these calcs., the correlation energy is taken into account using a non-variational method. The calcd. values of dissocn. energies are in good agreement with the existing exptl. values. The results permit to predict values for HNCO, BH<sub>3</sub>CO and CH<sub>2</sub>N<sub>2</sub> and to confirm the instability of BH<sub>3</sub>N<sub>2</sub>.

meo pem.  
na pem

(+3) ~~4~~

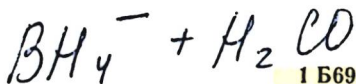
C.A. 1982,  
97 N2.

MR: 00012678

$\text{CH}_2\text{CO}$

$\text{HNCO}$

$\text{CH}_2\text{N}_2$



1982

1 Б69. Теоретическое исследование присоединения боргидрида к формальдегиду. Одноступенчатое, несинхронное переходное состояние. Theoretical study of borohydride addition to formaldehyde. A one-step, nonsynchronous transition state. Eisenstein O., Schlegel H. B., Kayser M. M. «J. Org. Chem.», 1982, 47, № 15, 2886—2891 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах 3—21ГФ и 6—3ГФ\* проведены расчеты возможных путей присоединения  $\text{BH}_4^-$  к  $\text{H}_2\text{CO}$ . Показано, что с энергетич. точки зрения наиболее вероятным является протекание процесса по одноступенчатому несинхронному механизму через четырехцентровое переходное состояние с геометрич. параметрами, близкими к конечным продуктам. Р-ция должна быть экзотермической, однако, рассчитанный энергетич. барьер его сравнительно велик (32,1 ккал/моль) для того, чтобы она могла реализоваться с заметной скоростью в газовой фазе. Аналогичные расчеты с координированной по атому О кар-

теорет.  
расчет

X. 1983, 19, N 1

бонильной группы молекулой  $\text{H}_2\text{O}$  приводят к понижению энергетич. барьера на 20 ккал/моль. Полученные результаты проанализированы в рамках эмпирич. постулата Хэммонда. По мнению авторов, кажущаяся противоречивость полученных результатов может быть объяснена тем, что исследованная р-ция фактически может быть представлена в виде суперпозиции двух процессов: а) гидридного переноса от  $\text{BH}_4^-$  к  $\text{H}_2\text{CO}$  и б) сдвига  $\text{BH}_3$  от Н к карбонильному атому О. Обсуждена роль р-рителя и противоиона в исследованной реакции.

И. Абронин

BH<sub>3</sub>CO

1982

Ohwada Ken.

pacrim J. Chem. Phys., 1982,  
eur. noeu. 77, N1, 424-428.  
u E.

(eur. BeB; III)

$BH_3CO(lz)$

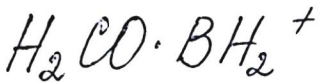
(DM. 2100)

1984

Beach D.B., Jolly W.L.,

J. Phys. Chem., 1984,

88, N20, 4647-4649.



1984

Raber Douglas J.,  
Raber Nancy K., et al.

срукт.,  
мереуе  
св.334

Inorg. Chem. 1984, 23  
(24), 4076-80.

(ср. ●  $\text{H}_2\text{CO} \cdot \text{Li}^+$ ; III)



H<sub>2</sub>BCHO

1985

Lug K.

реценз.  
отпукт. Tetrahedron Lett.,  
1985, 26, N 11, 1437 -  
- 1440.

(сер. ● H<sub>2</sub>NCH<sub>3</sub>; III)

CH<sub>3</sub>OBH<sub>3</sub>

Om. 23681

1986

104: 176830a Microwave spectrum, structure, dipole moment, quadrupole coupling constants, and barrier to internal rotation of methoxyborane, CH<sub>3</sub>OBH<sub>2</sub>. Kawashima, Yoshiyuki; Takeo, Harutoshi; Matsumura, Chi (Ikutoku Tech. Univ., Atsugi, Japan 243-02). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 116(1), 23-32 (Eng). A short-lived B compd., MeOBH<sub>2</sub>, was identified by microwave spectroscopy as an intermediate in the reaction of B<sub>2</sub>H<sub>6</sub> with MeOH or HCHO. The spectrum shows large splittings due to the internal rotation of the Me top. An anal. of the spectrum by use of the principal axis method leads to the following parameters for the normal species:  $A = 50684.2(13)$  MHz,  $B = 10284.41(11)$  MHz,  $C = 9024.80(11)$  MHz,  $\theta = 26.06(18)^\circ$ ,  $s = 15.983(5)$ ,  $I_a = 3.226(11)$   $\mu\text{A}^2$ , and  $V_3 = 740(5)$  cal/mol. The hyperfine structure due to the <sup>10</sup>B nuclear quadrupole moment was also analyzed, and  $\chi_{aa} = -1.90(24)$  MHz,  $\chi_{bb} = -1.91(24)$  MHz, and  $\chi_c = 3.81(22)$  MHz were obtained. The total elec. dipole moment detd. for the normal species is  $\mu = 1.61(10)$  D. The mol. structure was detd. from the rotational constns. of <sup>10</sup>B, <sup>13</sup>C, MeOBD<sub>2</sub>, CD<sub>2</sub>OBH<sub>2</sub>, and CHD<sub>2</sub>OBH<sub>2</sub> species with the aid of an ab initio MO calcul.

у в спектр,  
структур.  
парам.,  
франц. ред

с.А. 1986, 104, N 20

$\text{CH}_3\text{OBH}_2$

1986

8 Л155. Микроволновый спектр, структура, дипольный момент, постоянные квадрупольной связи и барьер внутреннего вращения метоксиборана  $\text{CH}_3\text{OBH}_2$ . Microwave spectrum, structure, dipole moment, quadrupole coupling constants, and barrier to internal rotation of methoxyborane,  $\text{CH}_3\text{OBH}_2$ . Kawashima Yoshiyuki, Takeo Harutoshi, Matsumura Chi. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 116, № 1, 23—32 (англ.)

В диапазоне 18—50 ГГц исследованы МВ-спектры 5 изотопич. разновидностей неустойчивой молекулы  $\text{CH}_3\text{OBH}_2$ , полученной как промежуточный продукт реакций диборана с метанолом или формальдегидом. Идентифицированы линии вращательных переходов с

чв спектр,  
структура,  
М, М.А.

ср. 1986, 18, № 8

$J \leq 6$  основного колебательного состояния,  $A-E$ -расщепление линий за счет туннелирования метильной группы и квадрупольная СТС линий. Анализ спектров выполнен по модели главных осей. Определены значения вращательных постоянных, барьера внутреннего вращения метильной группы ( $V_3 = 735 \div 765$  кал/моль), дипольного момента  $\mu_a = 1,433$ ,  $\mu_b = 0,74$ ,  $\mu_{\text{общ}} = 1,61$  ед. Дебая) и постоянных квадрупольной связи ядра  $^{10}\text{B}$  ( $\chi_{aa} = -1,90$ ,  $\chi_{bb} = -1,91$ ,  $\chi_{cc} = 3,81$  МГц). Вычислены структурные параметры молекулы  $\text{CH}_3\text{O}-\text{BH}_2$ :  $\text{B}-\text{H}_4 = \text{B}-\text{H}_5 = 1,196$ ,  $\text{B}-\text{O} = 1,352$ ,  $\text{C}-\text{O} = 1,425$ ,  $\text{C}-\text{H}_1 = \text{CH}_2 = 1,091$  Å,  $\text{H}_4\text{BO} = 120,3^\circ$ ,  $\text{H}_5\text{BO} = 115,0^\circ$ ,  $\text{BOC} = 121,5^\circ$ ,  $\text{OCH} = 109,2^\circ$ . М. Р. Алиев

$BH_2CHO$

1987

Kaeymann Elmar,  
Raguel' Schleger Paul von,  
et al.

с.п.,  
во всемп.,  
смыркн.  
раскрт.

J. Amer. Chem. Soc.,  
1987, 109, 49, 2553-

● -2559.  
(с.п. LiCHO; III)

$\text{H}_2\text{C}-\text{BO}$

от 28730

1987

4 Д90. Неэмпирические и полуэмпирические исследования  $\text{H}_3\text{C}-\text{B}=\text{O}$  и  $\text{H}-\text{B}=\text{O}$ . Их структура и колебательные спектры. *Ab initio* and semiempirical studies on  $\text{H}_3\text{C}-\text{B}=\text{O}$  and  $\text{H}-\text{B}=\text{O}$ . Their structure and vibrational spectra. Raabe Gerhard, Schleker Wolfgang, Straßburger Wolfgang, Heyne Eberhard, Fleischhauer Jörg, Bachler Vinzenz. «Z. Naturforsch.», 1987, A42, № 9, 1027—1036 (англ.)

Электронное строение молекул  $\text{H}_3\text{C}-\text{BO}$  и  $\text{H}-\text{BO}$  рассчитано неэмпирич. методом в базисах OCT-3 ГФ и 4-31 ГФ и полуэмпирич. методом МПДП. Колебательные спектры обеих молекул рассчитаны с учетом различных изотопич. сдвигов в базисе 4-31 ГФ. Исследовано влияние метильного замещения на колебательные частоты, силовую постоянную растяжения  $\text{BO}$ , заряды по Малликену и потенциал вертикальной ионизации. Полученные результаты сопоставлены с данными для пар молекул, изоэлектронных исследуемым:  $\text{H}-\text{CN}/\text{H}_3\text{C}-\text{CN}$  и  $\text{HC}-\text{NC}/\text{H}_3\text{C}-\text{NC}$ . Н. В. В.

М.П.

41

ф. 1988, 18, 24

$H_3CBO$

DM 28730

1987

11 Б1106. Неэмпирические и полуэмпирические исследования молекул  $H_3C-B=O$  и  $H-B=O$ . Их структура и колебательные спектры. Ab initio and semiempirical studies on  $H_3C-B=O$  and  $H-B=O$ . Their structure and vibrational spectra. Raabe G., Schleker W., Straßburger W., Heyne E., Fleischhauer J., Bachler V. «Z. Naturforsch.», 1987, A42, № 9, 1027—1036 (англ.)

Методом ССП выполнены неэмпирич. (в базисах ОСТ—3 ГФ и 4—31 ГФ) и полуэмпирич. (в приближении МПДП) расчеты геометрич. и электронного строения молекул  $H_3CBO$  (I) и  $HBO$  (II). В базисе 4—31 ГФ вычислены частоты колебаний I, II и их изотопомеров. Молекулы I и II сопоставлены с изоэлектронными парами соединений  $H-CN/H_3C-CN$  и  $H-NC/H_3C-NC$ . В. Г. Соломоник

М.А.

(4)  $HBO$  ●

Х. 1988, 19, N 11

$\text{BN}_3\text{CO}$

1988

2 Д91. Молекулярная динамика молекул карбонил-борана. Molecular dynamics of borine carbonyl molecules / Mohan S., Vasuki G. // Proc. Indian Nat. Sci. acad. A. 1988.— 54, № 6.— С. 958—966.— Англ.

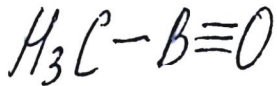
Выполнен полный колебательный анализ молекул  $^{19}\text{BN}_3\text{CO}$ ,  $^{11}\text{BN}_3\text{CO}$ ,  $^{10}\text{BD}_3\text{CO}$  и  $^{11}\text{BD}_3\text{CO}$ . Использовался метод  $F$ -,  $G$ -матриц Вильсона, модифицированный с учетом кинетич. констант (элементов  $K$ -матрицы), позволяющих делать заключения о динамике молекулярных колебаний. В таблицах приведены кинетические и силовые постоянные, постоянные кориолисовой связи и средние амплитуды колебаний валентно-связанных и несвязанных атомов. Отмечается, что рассчитанные значения молекулярных постоянных хорошо согласуются с эксперим. данными, что подтверждает ценность примененного метода расчета.

В. А. Морозов

М.Л.

ф. 1990, № 2





1989

17 Б1140. Метилбороксид  $\text{H}_3\text{C}-\text{B}\equiv\text{O}$ . Methylboroxid  $\text{H}_3\text{C}-\text{B}\equiv\text{O}$  / Bock H., Cederbaum L. S., von Niesen W., Paetzold P., Rosmus P., Solouki B. // Angew. Chem.— 1989.— 101, № 1.— С. 77—78.— Нем.

Изучены фотоэлектронные спектры (ФЭС) продуктов пиролиза при 1100 К 2-метил-1,3,2-диоксабороландиона-4,5. С помощью описанной ранее (Bock H. и др. // J. Molec. Struct.— 1988.— 173.— С. 31—49) методики измерения ФЭС и цифрового вычитания ФЭС  $\text{CO}$  и  $\text{CO}_2$  получен ФЭС «чистого»  $\text{MeB}\equiv\text{O}$  (I). Строение I подтверждено сравнением ФЭС I и соединений типа  $\text{ClB}\equiv\text{S}$ ,  $\text{MeC}\equiv\text{CH}$ ,  $\text{MeC}\equiv\text{N}$ ,  $\text{H}_3\text{SiC}\equiv\text{CH}$ . Для I вычислены распределение заряда ( $\text{H}_3\text{C}^{+0,19}-\text{B}^{-0,06}\equiv\text{O}^{-0,13}$ ) и энтальпия образования (около  $-90$  ккал/моль).

А. А. Кирюшкин

М.А.

X. 1989, № 17

$B(OC_2H_5)_3$

1989

111: 30499x Infrared spectra of trimethoxyborane, chlorodimethoxyborane and dichloromethoxyborane species, isolated carbon-hydrogen stretching frequencies and bond strengths. McKean, D. C.; Coats, A. M. (Dep. Chem., Univ. Aberdeen, Aberdeen, UK AB9 2UE). *Spectrochim. Acta, Part A* 1989, 45A(4), 409-19 (Eng). IR spectra in the gas phase are reported at 500-3100  $cm^{-1}$  for  $B(OMe)_3$ ,  $ClB(OMe)_2$ , and  $Cl_2BOMe$ , with Me,  $CD_3$ , and  $CHD_2$  substitution. An anal. of  $\nu_{CH}$  and  $\nu_{CD}$  data in all 3 species of  $Cl_2BOMe$  yielded strong evidence for the presence of 3 kinds of CH bond, 2 of them weak and 1 of them strong. The Me group is then twisted, probably through 10-20°, out of the eclipsed or staggered conformation. The  $CHD_2$  spectra of  $ClB(OMe)_2$  and  $B(OMe)_3$  are less susceptible to anal., but suggest the presence of 2 weak and strong bonds, the former increasing in weakness as the no. of OMe groups increases. This is as expected from the increased competition between the lone pair electrons for the empty B orbital. The spectra of the  $CD_3$  species permit assignment of  $\nu_{BO}$ ,  $\delta_s Me$ ,  $\delta_s CD_3$ , and  $\delta_{as} CD_3$  modes. In  $ClB(OMe)_2$ ,  $\nu_s BO$  lies at 1278  $cm^{-1}$ .

(UK)

(H) 

c.A. 1989, 111, NY

$\left\{ \begin{array}{l} ClB(OC_2H_5)_2 \\ Cl_2B(OC_2H_5) \end{array} \right.$

$\text{BH}_3 \cdot \text{CO}$

OM. 32071

1989

Pradeep T., Sreeranth C.S.,  
et al.,

электрон.  
струк-  
тура

J. Mol. Struct., 1989, 194,  
163-170.

A study of the electronic  
structures of  $\bullet$  n-v Addition  
compound of  $\text{BH}_3$  by a

combined use of UPS and  
EELS.

$(\text{CH}_3)_2 \cdot \text{BOCH}_3$

1990

10 Б1118. Диметилметоксиборан: отнесение частот, конформационная стабильность, неэмпирические расчеты и барьеры внутреннего вращения. Dimethylmethoxyborane: Vibrational assignment, conformational stability, ab initio calculations and barriers to internal rotation / Stampf E. J., Odom J. D., Saari S. V., Kim Young H., Bergana M. Mamula, Durig J. R. // J. Mol. Struct.— 1990.— 239.— С. 113—137.— Англ.

Изучены ИК- и КР-спектры в области  $4000\text{—}50\text{ см}^{-1}$  и  $3500\text{—}10\text{ см}^{-1}$  соотв. для газовой и тв. фазы  $(\text{CH}_3)_2\text{BOCH}_3$  (I), а также КР-спектр жидк. фазы I, для которого получены величины параметров деполяризации. На основе эксперим. данных для всех трех фаз выделен один общий конформер симметрии  $C_s$ . Барьер вращения относит. В—О связи равен  $8,9\text{ ккал/моль}$  по данным температурно-зависимого ЯМР  $^{13}\text{C}$ . Неэмпирич. методом в базисах 3-21 ГФ и 6-31 ГФ\* с градиентной оптимизацией проведен расчет структуры I и сравне-

М.А.

Х. 1991, №10

ние с данными электронно-дифракц. анализа (Gundersen G., Jonvik T., Seip R. // Acta Chem. Scand.— 1981,— A35.— С. 325). Оба базиса завышают величину связи С—В (0,1580—0,1595 нм) по сравнению с эксперим. величиной 0,1575 нм, валентные углы воспроизводятся с точностью до 1,5°. Расчет в обоих базисах предсказывает плоский каркас I при угле CBOC 0° (эксперим. величина —14,1°), в теор. расчете различные конформеры, получаемые вращением метильных и метоксигруппы, различаются не более чем на 242 см<sup>-1</sup>.  
Библ. 48. В. А. Болотин



$\text{BH}_3\text{CO}$

1990

20 Б4519. Динамика фотодиссоциации  $\text{BH}_3\text{CO}$  при 193 нм. Photodissociation dynamics of  $\text{BH}_3\text{CO}$  at 193 nm  
Weiner Brad R., Pasternack L., Nelson H. H., Prather K. A., Rosenfeld R. N. // J. Phys. Chem.— 1990.— 94, № 10.— С. 4138—4142.— Англ.

Методами кинетич. ИКС с использованием перестраиваемых диодных лазеров и эмиссионной спектроскопии в видимой и УФ областях изучены распределения по энергиям продуктов фотодиссоциации (ФД)  $\text{BH}_3\text{CO} + h\nu \rightarrow \text{BH}_3 + \text{CO}$  под действием излучения 193 нм импульсного эксимерного лазера на  $\text{ArF}$ . В процессе ФД  $\text{BH}_3\text{CO}$  выделяется энергия 127 ккал/моль. Образование  $\text{BH}_3$  происходит с высоким квантовым выходом ( $\geq 0,7_{-0,2}^{+0,3}$ ). Поскольку он не диссоциирует на  $\text{BH} + \text{H}_2$ , его внутр. энергия должна быть меньше 82 ккал/моль. Измерения заселенностей колебат. уровней  $\text{CO}$  ( $v'' = 0-4$ ) показывают, что колебат. т-ра  $\text{CO}$   $T(\text{кол.}) = 2760 \pm 160$  К. Это соответствует колебат. энергии  $\text{CO} \sim 5,9$  ккал/моль, а вращат. энергия  $\text{CO}$ , по лит. данным,

Фотодиссо -  
циация

X. 1990, № 20

равна 0,6 ккал/моль. По доплеровскому профилю двух абсорбц. линий СО найдено, что поступат. энергия СО не ниже 5 ккал/моль, так что полная поступат. энергия продуктов ФД не меньше 15 ккал/моль. Фактич. поступат. энергия м. б. значительно больше ( $>39$  ккал/моль). На основе сравнения полученных результатов с различными моделями ФД сделан вывод о нестатистич. доле внутр. энергии в фотофрагменте  $\text{NH}_3$ .  
Библ. 30. В. Е. Скурат





$[H_2C=B=O]^-$

1991

Kálová Olga

sb. VŠCHT Praha, P. - 1991. - 12. -  
C. 27-34.

M.N.

[all.  $H_2C=B=CH_2$ ]



$[OB(CH_2)_2]^-$

1991

Há'woda' Olga

sb. VŠCHT Praze. P. - 1991. - 12. -

u.n. C.27-84.

[all.  $H_2C=$  ●  $B=CH_2$ ]<sup>-</sup>

$BH_2(CO)^+$

1991

Schneider William F.,

Narula Chaitanya K.,  
et al.

емрук-  
мура,  
пацрем

Inorg. Chem. 1991. 30,  
N 20. C: 3919-3927.

(сир. ●  $BH_2^+$ ; III)

$C_2H_5BO$

Dom. 36921

1992

Ibrahim M.R., Büchel M.,  
et al.,

непереходность  
номерус-  
фигурна,  
ab initio  
расчет

J. Comput. Chem. 1992,  
13, N4, 423-428

CH<sub>3</sub>BO  
CH<sub>3</sub>OB

1992

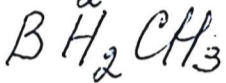
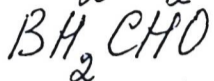
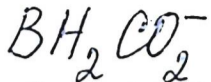
Nguyen M.T., Swarke P.J.,  
et al.;

un.

Mol. Phys. 1992, 75, N5,  
1105-1128.

● (see HBO; III)

1992



Spoliti M., Ramondo  
F., et al.

Folia Chem. Theor.

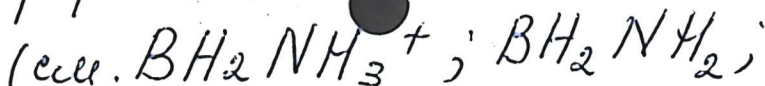
Lat. 1992, 20 (4),  
201-21.

сод.

супрект.,

Vi, сѳабилсн.,

теор. расчѳт



$BH_2NO_2$ ; (iii)

B(OCH)<sub>3</sub>

1993

120: 119654c Raman, infrared, and NMR spectra, conformational stability and ab initio calculations of trimethoxyborane. Stampf, E. J.; Kim, Young H.; Durig, J. R. (Chem. Dep., Lander Univ., Greenwood, SC 29649 USA). *J. Raman Spectrosc.* 1993, 24(11), 725-35 (Eng). The Raman spectra (3500-20 cm<sup>-1</sup>) of gaseous, liq. and solid and the IR spectra (4000-50 cm<sup>-1</sup>) of gaseous and solid trimethoxyborane, B(OCH)<sub>3</sub>, were recorded. Qual. depolarization values were obtained from the Raman spectrum of the liq. All normal modes, except the torsions, were assigned based on IR band contours, depolarization values, group frequencies and normal coordinate calcns. From a comparison of the spectra in the fluid states with that from the solid, it is concluded that the mol. exists predominantly in a single conformation in all phys. states. Frequencies and potential energy distributions for the normal modes were calcd. with the force consts. obtained from ab initio calcns. with the 3-21G basis set. A comparison of these calcd. frequencies with the obsd. spectra is consistent with the predominant form having a 'planar' heavy atom skeleton with C<sub>3v</sub> symmetry. It was not possible to det. an exptl. barrier to rotation about the B-O bond. No change was obsd. in the <sup>13</sup>C NMR spectrum over the temp. range of 22 to -90°C. Structural parameters, conformational stability and barriers to internal rotation were obtained from ab initio Hartree-Fock gradient calcns. employing both the 3-21G and 6-31G\* basis sets. The results are compared with the corresponding data for some similar organoboranes.

САР u UK)

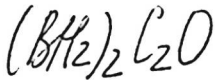
Vi, компьютер  
напомин

Vo, меоп. pdetit

C.A. 1994,

120, N10





OM 37 712

1994

12 Б184. Замещенные оксирены ( $X_2C_2O$ ,  $X=BH_2, CH_3, NH_2, OH, F$ ): могут ли они быть синтезированы? Substituted oxirenes ( $X_2C_2O$ ,  $X=BH_2, CH_3, NH_2, OH, F$ ): Can they be made? / Fowler Joseph E., Galbraith John Morrison, Vacek George, Schaefer Henry F. (III) // J. Amer. Chem. Soc. — 1994 — 116, № 20 — С. 9311—9319 — Англ.

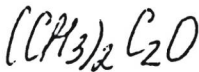
Проведены неэмпирич. расчеты высокого уровня для молекул состава  $X_2C_2O$ ,  $X=BH_2, CH_3, NH_2, OH, F$ . В рамках метода связанных кластеров с учетом вплоть до трехкратных возбуждений с использованием двухэкспонентного базиса, дополненного поляризац. ф-циями, показано, что в дополнение к незамещ. оксирану только диметилзамещ. производное отвечает локальному минимуму на гиперповерхности потенциальной энергии, а все другие исследованные соединения соответствуют переходным состояниям. Обсуждена природа хим. связи в исследованных структурах. Библ. 53. И. Н. Сенченя

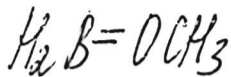
М.П.

(4)



X. 1995, N 12





DM. 37749

1994

Jemmis E.D., Subramanian B.

морщин.  
Гарнер. J. Phys. Chem., 1994, 98, N36,  
8937 - 8939. (только temp!)

Torsional barriers in  $\text{H}_2\text{B}=\text{XCH}_3$   
(X = NH, O, PH, and S)

OC-BH<sub>3</sub>

1994

121: 187898f Comparative Theoretical Study of Lewis Acid-Base Complexes of BH<sub>3</sub>, BF<sub>3</sub>, BCl<sub>3</sub>, AlCl<sub>3</sub>, and SO<sub>2</sub>. Jonas, Volker; Frenking, Gernot; Reetz, Manfred T. (Fachbereich Chemie, Universitaet Marburg, D-35032 Marburg, Germany). *J. Am. Chem. Soc.* 1994, 116(19), 8741-53 (Eng). Quantum-mech. calcns. at the MP2/TZ2P level of theory predicted geometries and bond energies of donor-acceptor complexes of the Lewis acids BH<sub>3</sub>, BF<sub>3</sub>, BCl<sub>3</sub>, AlCl<sub>3</sub>, and SO<sub>2</sub>, which were in very good agreement with the available exptl. gas-phase values. Strong donor-acceptor bonds were calcd. for the boron complexes OC-BH<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 25.1$  kcal/mol), H<sub>3</sub>N-BH<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 30.7$  kcal/mol), Me<sub>3</sub>N-BH<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 41.1$  kcal/mol), H<sub>3</sub>N-BF<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 22.0$  kcal/mol), Me<sub>3</sub>N-BF<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 32.9$  kcal/mol), H<sub>3</sub>N-BCl<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 29.7$  kcal/mol), and Me<sub>3</sub>N-BCl<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 40.5$  kcal/mol). Weakly bound van der Waals complexes were predicted for OC-BF<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 4.7$  kcal/mol), HCN-BF<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 7.2$  kcal/mol), MeCN-BF<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 9.1$  kcal/mol), OC-BCl<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 4.0$  kcal/mol), and MeCN-BCl<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 6.4$  kcal/mol). Intermediate dissocn. energies were calcd. for the BF<sub>3</sub> complexes with Me<sub>2</sub>O ( $D_0(298) = 17.3$  kcal/mol), benzaldehyde ( $D_0(298) = 13.0$  kcal/mol), and 2-methylacrolein ( $D_0(298) = 12.8$  kcal/mol). The strongest donor-acceptor bond was calcd. for Me<sub>3</sub>N-AlCl<sub>3</sub> ( $D_0(298) = 49.3$  kcal/mol). A strong bond was also predicted for EtCClO-AlCl<sub>3</sub>

D<sub>0</sub>(298)
 44

C.A. 1994, 121, N16

( $D_0(298) = 24.8$  kcal/mol), while the complex  $\text{Me}_3\text{N-SO}_2$  is more weakly bound ( $D_0(298) = 15.5$  kcal/mol). The bond lengths of the Lewis acids are longer in the complexes than in the isolated mols. A good correlation was found between the calcd. bond strengths of the  $\text{BF}_3$  complexes and the lengthening of the B-F bond. The natural-bond-orbital (NBO) partitioning scheme suggested that there is no correlation between the charge transfer and the bond strength. A topol. anal. of the electron-d. distribution showed that the donor-acceptor bonds of the strongly bound boron complexes have significant covalent contributions, while the weakly bound boron complexes are characterized by electrostatic interactions between the Lewis acid and base. However, the nature of the strongly bound  $\text{AlCl}_3$  complexes is different from that of the strongly bound boron complexes. The strongest donor-acceptor bond calcd. for  $\text{Me}_3\text{N-AlCl}_3$  is characterized by electrostatic interactions and very little covalent contributions. The bond shortening of the donor-acceptor bonds between the gas phase and the solid state was calcd. to be mainly due to short-range dipole-dipole interactions. The geometry-optimized dimer and tetramer of  $\text{H}_3\text{N-BH}_3$  and the dimer of  $\text{H}_3\text{N-BF}_3$  have significantly shorter B-N bonds than the monomer.

