

B-C-F-H-O

V 5128

1943

Laubengayer A.W., Finlay G.R.

J. Am. Chem. Soc., 1943, 65, 884-9

Donor-acceptor bonding. Etherates of boron
trifluoride. $\text{BCl}_2\text{F}_3\text{H}_6\text{O}$

CA., 1943, 3983⁵

Be., M.W.

CH₃COF; BF₃

спектр

Bop-9885-IV | 1957

Susz B.P., Wuhrmann J.
Helv. Chim. Acta, 1957,
40, n 3, 722-730.

V4476

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 слов. пос. тах.)

Goubeau J., Hummel D.

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

Колебательные спектры радикальных борокис-
лородных соединений

РЖХ., 1960, N 18, 72267

$BF_3 \cdot (CH_3)_2O$

Cooper

B

V-5124

1962

20445)

INFRARED AND RAMAN SPECTRA OF THE
BORON TRIFLUORIDE-DIMETHYL ETHER COMPLEX.

G. M. Begun, W. H. Fletcher, and A. A. Palko (Oak Ridge
National Lab., Tenn.). Spectrochim. Acta, 18: 655-65
(May 1962).

The infrared spectra of liquid $B^{10}F_3 \cdot (CH_3)_2O$, $B^{11}F_3 \cdot$
 $(CH_3)_2O$, $B^{10}F_3 \cdot (CD_3)_2O$, and $B^{11}F_3 \cdot (CD_3)_2O$ were observed
in the region 300 to 4000 cm^{-1} . The Raman spectra of
these compounds were also examined. Assignment of the
observed bands was made which is consistent with the
structure of the molecule and the isotopic data. (auth)

NSA-1962-16-16

Bcp-V 5125

1963

Vi, I ($\text{BF} \cdot \text{HCOOCH}_3$)

Cook K. D.

Proc. Ioth Collog. Spectroscopy Internal College Park., Hd., 1962 Washington. D.C., Spartan Books., 1963, 539-47.

The donor characteristics of the carbonel group. III. BF_3 complexes.

PJX., 1964, 12B122
J

Colquhoun Soda

CH_3OBF_2

1963

Autobal
K. K. K.

B-O

Infrared spectrum and structure of the difluoroboric acid methyl ester. J. E. de Moor and G. P. van der Kelen (Univ. Ghent, Belg.). *Ber. Bunsenges. Physik. Chem.* 67, No. 4, 429-34 (1963)(in English). On the basis of the vapor pressure of difluoroboric acid Me ester, which indicated a monomeric structure, a C_s symmetry was assigned and calcs. of the force consts. were made by the use of appropriate Lechner equations applied to the observed frequencies. The rotational vibration contours were used for the definite assignments of all infrared bands, except the δ - and τ -BOC bands, which were uncertain. A band order higher than $1\frac{1}{2}$ for the B-O band was indicated by using the Siebert rule on the calcd. $k_{\text{B-O}}$ force const. Lloyd Kahn

11-5548-11
Bq-8455-11

C. A. 1963. 59. 5

4683 B

ВФ-8455-48

1963

CH₃OB₂F₂

8 Б100. Инфракрасный спектр и структура метилового эфира дифторборной кислоты. Moor J. E. de, Kellen G. P. van der. The infrared spectrum and structure of the difluoroboricoacid methylester. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1963, 67, № 4, 429—434 (англ., рез. нем.)

Исследован ИК-спектр мономерного метилового эфира дифторборной к-ты в газовой фазе. Приведены основные полосы спектра в области 3300—400 см⁻¹. Молекула эфира имеет группу симметрии C_s, в ее спектре присутствуют 9 полос скелетных колебаний (6 симметричных и 3 несимметричных относительно плоскости, проходящей через атомы В, О и С) и 9 полос колебаний метильной группы (5 симметричных и 4 несимметричных). Учет вращательно-колебательной структуры полос позволяет отнести полосу 1420 см⁻¹ к вал. кол. В—О, а полосу 1385 см⁻¹ — к антисимм. вал. кол. В—F. Полоса 813 см⁻¹ относится к симм. вал. кол. группы F₂ВО, 1072 см⁻¹ — к вал. кол. С—О, 714, 480 и 460 см⁻¹ — соответственно к внеплоскостным, симм. и антисимм. плоскостным деф. кол. группы F₂ВО, 450 см⁻¹ — к деф. кол. группы ВОС. Рассчитанные силовые константы связей равны 6,65;

ВФ-7013-V

X. 1964. 8

см. м.р.б.

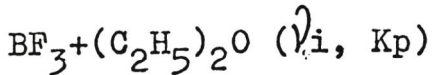
5,20; 0,60 и $0,45 \cdot 10^5$ дн/см соответственно для связей В—О, В—F, F—В—F и F—В—О. Из этих данных следует, что связь В—О имеет порядок выше $1\frac{1}{3}$, т. е. в исследуемом случае преобладающей является мезомерная форма $F_2-B=O-$.

Ю. Киссин



V 5131

1963



Begun G.M., Palko A.A.

J.Chem. Phys., 1963, 38, N 9, 2112-17

Raman and infrared spectra of BF_3 complexes with diethyl ether and tetrahydrofuran and the isotopic exchange of these complexes with BF_3 .

PJX., 1964, 15B96
J



$(CH_3)_2OBF_3$

9745-1

x. 1967 : 7

1965

7 B162. Инфракрасные спектры комплексов трехфтористого бора с некоторыми диалкилоксидами и диалкилсульфидами. Lascombe J., Le Calvé J., Josien M. - L. Spectre infrarouge des complexes du fluorure de bore avec quelques oxydes et sulfures d'alkyle. «Rev. Groupem. avancem. méthodes spectrogr.», 1965, juil.—déc., 123—128 (франц.)

Получены ИК-спектры поглощения жидкого, газообразного и твердого $(CH_3)_2OBF_3$ (I) и жидкого и твердого $(CH_3)_2S \cdot BF_3$ (II). Обсуждены изменения, наблюдаемые в спектрах I и II по сравнению со спектрами исходных компонентов. Предложено отнесение полос

⊗

поглощения. Спектры твердого I значительно отличаются от спектров, полученных для жидкого и газообразного состояния, что указывает на сильное межмол. взаимодействие (МВ) в кристаллич. состоянии. Для изучения влияния МВ на спектры кислородных комплексов типа I измерены спектры р-ров $(C_2H_5)_2O \cdot BF_3$ в 10 орг. р-рителях различной полярности. Б. Кикоть

BF_3 - комплекс

1966

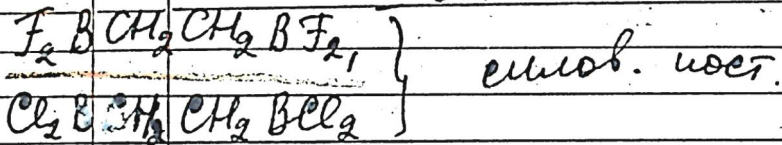
50476t The ir absorption spectrum of the anisole-boron trifluoride addition compound. Eliane Taillandier and Marc Taillandier (Fac. Sci., Paris). *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. C* 263 (21), 1265-8 (1966) (Fr). The ir spectrum of the liquid 1:1 complex was detd. over the range 10,000-500 cm^{-1} with a grating instrument. Three assignments were made for the acceptor as follows: (i) a strong band at 856 cm^{-1} as ν_s (inactive in free BF_3 gas which has symmetry D_{3h}) which is assocd. with the appearance of the pyramidal form, (ii) 2 components at 1245 and 1202 cm^{-1} attributed to removal of the degeneracy of the BF_3 valency vibration (ν_d) at 1454 cm^{-1} in gaseous BF_3 , and (iii) a very strong band at 594 cm^{-1} which is probably δ_s . The frequencies of the complexed BF_3 lay between those of free BF_3 and BF_4^- , whereas

uk complex
 ν_s
C.A. 1967. 66. 12

ν_s and ν_d decreased as the basicity of the donor decreased: Ph-OMe, Me₂O, Et₂O, tetrahydrofuran. A broad band at 635 cm.⁻¹ attributed to the vibration O—B decreased in frequency as the strength of the complex decreased from Et₂O—BF₃ to BrC₆H₄-OMe—BF₃. The presence of this band whose width approached that characteristic of H-bonds implies that anisole behaves with respect to BF₃ as an *n*-donor. The very low soly. of BF₃ in benzene was also confirmed spectroscopically. T. C. Tranter.

V 6716

1968



Shriver D.F., Jakovitz J.F.,
Biallas M.J.,

Spectrochim. Acta, A, 1968, 24, n 9, 1469-

1477

10

CA, 1968, 69, n 18, 72369z

1969

H-C≡CBF₂

3 Б242. Микроволновый спектр, структура и дипольный момент этинилдифторборана H-C≡CBF₂. Laferty Walter J., Ritter J. J. Microwave spectrum, structure, and dipole moment of ethynyldifluoroborane, H-C≡CBF₂. «Chem. Commun», 1969, № 16, 909—910 (англ.)

Исследован МВ-спектр содержащих В¹⁰ и В¹¹ изотопич. разновидностей HC≡CBF₂ (I) в области 18 000—33 000 Мгц. I — неустойчив и быстро разлагался при исследовании, проводившемся при т-ре сухого льда. К вращательным переходам в основном колебательном состоянии отнесены 15 линий В¹¹-разновидности I и 10 линий В¹⁰-разновидности I, кроме того 6 линий В¹¹-разновидности I отнесены к вращательным переходам в первом возбужденном колебательном состоянии. Сверхтонкую квадрупольную структуру в МВ-спектре I

м. н.

селе. н.

X. 1970. 3

разрешить не удалось, хотя большинство вращательных
 линий было уширено. Определены вращательные по-
 стоянные: для B^{10} -разновидности I $A=10507,4 \pm 2,8$,
 $B=3670,56 \pm 0,06$, $C=2715,52 \pm 0,04$ Мгц (основное состоя-
 ние), для B^{11} -разновидности I $A=10509,2 \pm 2,7$, $B=$
 $=3666,65 \pm 0,06$, $C=2713,50 \pm 0,06$ Мгц (основное состоя-
 ние) и $A=10397,4 \pm 5,9$, $B=3684,45 \pm 0,20$, $C=2717,26 \pm$
 $\pm 0,15$ Мгц (возбужденное колебательное состояние).
 Из рассмотрения вращательных постоянных следует,
 что I является плоской молекулой (точечная группа
 симметрии C_{2v}). При использовании данных по родст-
 венным молекулам оценена длина связи $r_{B-C}=1,53$ А и
 угол $\angle FBF=118,2^\circ$. Определен дипольный момент
 $I \mu=1,93 \pm 0,06$ D. Оценена частота низшего нормального
 колебания I (плоское скелетное деф. кол. класса B_1)
 $\nu_{B_1}=150 \pm 80$ см $^{-1}$.

А. Александров

B-C-F-H-O,

1940

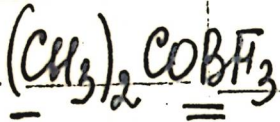
$(CH_3)_2CO \cdot BF_3$

Jochel M.-Th.,
Fouassier M.

ссыл. ност.

J. chim. phys. et phys.
-chim. biol., 1940, 64, n6,
1132.

[ссыл. $(CH_3)_2CO$] III



1970

Vi

3074x Vibrational spectra of [dimethyl ketone-boron tri-fluoride] addition compounds $Me_2CO-^{11}BF_3$, $Me_2CO-^{10}BF_3$, $(CD_3)_2CO-^{11}BF_3$, and $(CD_3)_2CO-^{10}BF_3$. Forel, Marie T.; Fouassier, M.; Tranquille, M. (Lab. Spectrosc., Fac. Sci., Talence, Fr.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1970, 26(8), 1761-75 (Fr). The ir spectra of 4 coordination compds. $Me_2CO-^{11}BF_3$, $Me_2CO-^{10}BF_3$, $(CD_3)_2CO-^{11}BF_3$, and $(CD_3)_2CO-^{10}BF_3$ have been recorded. An assignment is made based upon isotopic shifts and comparison with vibrational spectra of free Me_2CO and acetone- d_6 . A structure is proposed for the complex. The force const. of the coordination is estd. and the normal modes of vibration of XBF_3 groups are discussed. RCSQ

C. A. 1970. 73. 18

$(\text{CH}_3)_2\text{CO}-\text{BF}_3$

$(\text{CD}_3)_2\text{CO}-\text{BF}_3$

ИК-, КР-
спектры;
структура

Х. 1971. 4

1970

4 Б234. Исследование колебательных спектров комплексов $(\text{CH}_3)_2\text{CO}-^{11}\text{BF}_3$, $(\text{CH}_3)_2\text{CO}-^{10}\text{BF}_3$, $(\text{CD}_3)_2\text{CO}-^{11}\text{BF}_3$ и $(\text{CD}_3)_2\text{CO}-^{10}\text{BF}_3$. Forel M.-T., Fouassier M., Tranquille M. Etude des spectres de vibration des composés d'addition $(\text{CH}_3)_2\text{CO}-^{11}\text{BF}_3$, $(\text{CH}_3)_2\text{CO}-^{10}\text{BF}_3$, $(\text{CD}_3)_2\text{CO}-^{11}\text{BF}_3$ et $(\text{CD}_3)_2\text{CO}-^{10}\text{BF}_3$. «Spectrochim. acta», 1970, A26, № 8, 1761—1775 (франц.; рез. англ.)

Исследованы ИК-спектры (4000—200 cm^{-1}) и КР-спектры комплексов $\text{Me}_2\text{CO}-^{11}\text{BF}_3$, $\text{Me}_2\text{CO}-^{10}\text{BF}_3$, $(\text{CD}_3)_2\text{CO}-^{11}\text{BF}_3$ и $(\text{CD}_3)_2\text{CO}-^{10}\text{BF}_3$. Из данных по изотопным сдвигам полос и при сопоставлении со спект-

+1



рами ацетона и ацетона- D_6 проведено отнесение полос в спектрах. Предложена структура комплексов. В соответствии с оценкой авторов силовая постоянная связи В—О равна $2 \cdot 10^5 \text{ дн/см}$. Рассмотрены частоты колебаний группировки OVF_3 . В случае ^{18}O частоты колебаний типа A_1 равны: 858 см^{-1} (преимущественно сим. вал. кол. BF_3), 623 см^{-1} (преимущественно вал. кол. VO) и 493 см^{-1} (преимущественно сим. деф. кол. BF_3).

Ю. В. Киссин



1970



Lappert M. F. и др.

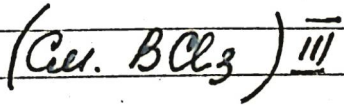
J. Chem. Soc.,

(14)

оценка

A, № 13, 2320.

IX-101-XV
[B99-101-969]





1970

9 Б234. Исследование колебательных спектров комплексов метилового эфира и фторида бора в области 1500—50 cm^{-1} . Le Calvé Jacques. Étude des spectres de vibration des composés d'addition de l'éther méthylique et du fluorure de bore entre 1500 et 50 cm^{-1} . «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1970, 67, № 11—12, 1987—1993 (франц.; рез. англ.)

Исследованы спектры ИК-поглощения и КР шести изотопных производных комплекса $(CH_3)_2O-BF_3$ (I) по водороду и по бору и даны отнесения для частот нормальных колебаний I. Сделан вывод о наличии взаимодействия колебаний остова эфирной группы с симм. кол. группы OBF_3 .

А. Н. Хитров

X. 1971. 9

2(CH₃OH). BF₃

1971

78735g Infrared spectroscopic analysis of the structure of boron trifluoride complexes of methanol, deuterated methanol, and acetic acid. Comparison of hydrogen bonding and donor-acceptor bonding. Taillandier, M.; Tochon, J.; Taillandier, E. (Dep. Rech. Phys., Univ. Paris VI, Paris, Fr.). *J. Mol. Struct.* 1971, 10(3), 471-80 (Fr). Spectral studies showed that the 2:1 complexes formed from 2 mols. of MeOH or HOAc and 1 mol. of BF₃ have an open structure. One MeOH mol. is linked by H bonding to a 2nd mol. which is attached to BF₃. The consequences of the addn. of BF₃ to the OH (OD) vibrators are similar to those of the formation of a H bond: elevation of the wave no. of the in-plane bending vibration and lowering of the wave no. of the stretching vibration compared with the monomer.

MC chemp.

C.A. 1972. 76. 14

BF₃CO

1973

Novick.
Empyrt

Novick, Stewart L., Davies Paul B.
J. Amer. Chem. Soc. 1973, 95(20),
8547(eng).

(see, Arz NO, III)

50704.8443

Ch, Ex-C, TC

номер
(CH₃)₂O-BF₃

1975

4156

Labarbe P., Forel M.T.

Etude de l'influence de la formation
d'une liaison de coordination sur les
champs de force de valance du trifluoru-
re de bore et des bases de Lewis (CH₃)₂ X
(X = O, S, Se). "Spectrochim.acta", 1975,
A 31, N 5-6, 525-540 (франц., рез.англ.)

375 378

3 9 6 0 4 0 4 пивинити

50704.8445

Ch, TC

(перев.)
31603
 $HCOOCH_3 \dots BF_3$

1975

жс-9391

к р. N 50704.8444

Taillandier E., Lakhdar T. Ben.

Etude par spectroscopie infrarouge des
complexes formiate de methyle-trifluorure
de bore. II. Calcul du champ de forces.

"Spectrochim. acta", 1975, A 31, N 5-6, 549-
554 (франц., рез. англ.)

375 378

996

.0404 ПИВИНИТИ

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

1978

11 Д606. Спектры ИК-поглощения и комбинационного рассеяния жидких смешанных соединений BF_3 — CH_3OH и BF_3 — $2\text{CH}_3\text{OH}$. Derouault J., Dziembowska T., Forel M. T. Infrared and Raman investigation of the liquid addition compounds BF_3 — CH_3OH and BF_3 — $2\text{CH}_3\text{OH}$. «J. Mol. Struct.», 1978, 47, 59—63 (англ.)

спектры

И. К. - поляр

Исследованы ИК-спектры (4000 — 100 см^{-1}) и спектры комб. рас. жидких комплексов, образованных между BF_3 (I), $^{10}\text{BF}_3$ и молекулами CH_3OH (II), CD_3OH и CH_3OD при т-ре 300°K , а также твердых комплексов при т-ре 77°K . При сопоставлении колебательных спектров свободного II, перечисленных комплексов и комплексов типа $\text{BF}_3 \cdot (\text{CH}_3)_2\text{O}$ интерпретированы полосы, наблюдаемые в спектре соединения I—II. Предположено, что силовая константа координационной связи в I—II равна $\sim 2,5 \text{ мдин/\AA}$. Зарегистрированное расщепление полосы $\sim 1100 \text{ см}^{-1}$ приписано неэквивалентности связей B—F в I—II. Отмечено эффективное взаимодействие колебаний различных групп OBF_3 в I—II. Сделан вывод, что самоассоциация комплексов

Ф. 1978
N 11

I—II обусловлена процессами диполь-дипольных взаимодействий и образованием водородных связей. И. В. А.

хлор
(Mic

$\text{BF}_3 \cdot \text{CH}_3\text{OH}$

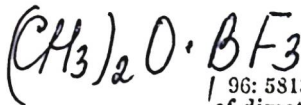
1979

91: 219575d IR and Raman spectroscopic study of molecular complexes of boron trifluoride with methanol. Discussion of ionic dissociation. Derouault, Jean; Dziembowska, Teresa; Forel, Marie Therese (Lab. Spectrosc. Infrarouge, CNRS, 33405 Talence, Fr.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1979, 35A(7), 773-86 (Fr). IR and Raman spectroscopy was used to give a vibrational anal. of the 1:1 and 1:2 mol. complexes, $\text{BF}_3\text{-MeOH}$ and

(2i)

$\text{BF}_3\text{-2MeOH}$, using isotopic substitution and comparison with related complexes. The OBF_3 groups were autoassoc. through a dipole-dipole interaction. The 1:1 complexes were further assoc. by H bonding. In 1:2 complexes, the second mol. of MeOH was bound to the first by a strong H bond. The formation of BF_4^- and MeOH_2^+ was confirmed by Raman spectroscopy in the liq. phase.

C.A. 1979, 91, N26

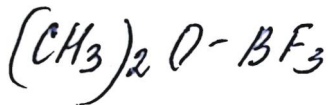


ommuck 13146 1981

| 96: 58130r Temperature effects of the molecular structure of dimethyl ether-boron trifluoride as studied by gas-phase electron diffraction. Iijima, Kinya; Yamada, Tetsuji; Shibata, Shuzo (Dep. Chem., Shizuoka Univ., Shizuoka, Japan 422). *J. Mol. Struct.* 1981, 77(3-4), 271-6 (Eng). The mol. structure of $(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BF}_3$ was studied at 16, 30 and 70° by gas-phase electron diffraction. The mol. exists in a staggered conformation with an O-B distance of 1.75 ± 0.02 Å, an angle between the O-B bond and the COC plane of $40 \pm 8^\circ$ and an FBF angle of $117 \pm 2^\circ$ at each temp. However, the F-B and C-O distances decrease with increasing temp., and appear to converge to the corresponding values of the component mols. The temp. dependence of the B-F and C-O distances is surprisingly large, compared with those in other mols.

Смукк,
 71-групп.

C.A. 1982, 96, N 8



1981

структура,
кв. мех.
расчет

94: 90743n AB initio calculations on the geometry of the dimethyl ether-boron trifluoride complex. Hirota, F.; Koyama, Y.; Shibata, S. (Dep. Chem., Shizuoka Univ., Shizuoka, Japan 422). *J. Mol. Struct.* 1981, 70, 305-7 (Eng). Ab initio calcns. were performed to det. the mol. structure of the $\text{Me}_2\text{O}-\text{BF}_3$ complex. It was assumed that the complex has C_s symmetry and the O atom is on the C_3 axis of BF_3 . The split-valence 4-31G basis set was used. The ab initio results for the structure and heat of disocn. are consistent with the results of electron diffraction expt. (S. Shibata and K. Iijima, 1977).

C.A. 1981 24 1112



1982

Achiba Yotji., et al.

фотозлектр. γ. Phys. Chem,
спектр,
γ 1982, 86, N 5, 681-
- 684.

●
(сер. $(\text{CH}_3)_2\text{O}$; III)

$(CH_3)_2O \cdot BF_3$

Омн.

14572

1982

22 Б130. Исследование с помощью фотоэлектронной спектроскопии He-I комплекса с переносом заряда $(CH_3)_2O \cdot BF_3$ состава 1:1. Frost D. C., Lau W. M., McDowell C. A., Westwood N. P. C. HeI photoelectron spectroscopy of the 1:1 charge-transfer complex $(CH_3)_2O \cdot BF_3$. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 10, 1917—1921 (англ.)

y;

С применением описанной ранее струйной методики (Frost D. C. и др., «J. Electron Spectrosc., Relat. Phenom.», 1977, 10, 293) измерены фотоэлектронные спектры комплекса 1:1- $(CH_3)_2O \cdot BF_3$ (I). Состав смеси, получающейся при смешении $(CH_3)_2O$ (II) и BF_3 (III), контролировался с помощью фотоионизац. масс-спектрометра. Численный анализ спектра позволил отделить ионизац. полосы, отвечающие II и III, и определить орбитальные потенциалы ионизации (ПИ) I. Отнесение ПИ основ-

(+2) ☒

X. 1982, 19, N 22.

валось на расчетах I—III неэмпирич. методом ССП в базисах ОСТ-3ГФ и ОСТ 4—31ГФ и полуэмпирич. методами ССП: МПДП и ЧПДП. Оптимизация геометрии проводилась неэмпирич. методом в базисе ОСТ-3ГФ и полуэмпирич. методами МПДП и ЧПДП. Первые орбитальные ПИ I имеют значения (эВ, рядом приведены их отнесения): 12,4 18a', 14,0 17a', 14,3 11a''. Образование комплекса с переносом заряда приводит к стабилизации занятых МО II на 0,7—2,8 эВ и дестабилизации вакант-

ных МО III на 1,4—3,3 эВ. Перенос заряда с II на III, составляет в I по данным расчета в базисе ОСТ 4—31ГФ 0,09 e. Сопоставление геометрий I, оптимизированных разными методами, позволило сделать выбор между существенно различающимися результатами двух структурных электронографич. исследований, I. В. Фаустов

$(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BF}_3$ Отмиск 14572 1982

1 12 Д766. HeI фотоэлектронное исследование комплекса с переносом заряда $(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BF}_3$ (1:1). HeI photoelectron spectroscopy of the 1:1 charge-transfer complex $(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BF}_3$. Frost D. C., Lau W. M., McDowell C. A., Westwood N. P. C. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 10, 1917—1921 (англ.)

Методами HeI-фотоэлектронной спектроскопии и масс-спектрометрии исследовано образование комплексов $(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BF}_3$ при пропускании через сопло газовой смеси 1:1 BF_3 и $(\text{CH}_3)_2\text{O}$. Интерпретация фотоэлектронного спектра проведена на основе ab initio и полуэмпирич. расчетов геометрии и электронной структуры комплекса. Установлено, что комплексообразование сопровождается переносом 0,09 электронного заряда от диметилового эфира на свободную рл-орбиталь BF_3 ; при этом происходит стабилизация МО эфира на 0,7—2,8 эВ, а МО BF_3 дестабилизируются на 1,4—3,3 эВ. Библи. 27. А. В. Н.

геометрия,
структура,
vi,

90. 1982, 18, ~12

$H_2CO_3 \cdot BF_3$ (om. 32062) 1988

Le Page T. F., Wiberg K. B.,

(V_o)

J. Amer. Chem. Soc.,

1988, 110, N 20, 6642-6650.

$\text{BF}_3(\text{CH}_3)_2\text{O}$

OM. 38590

1996

конспект
чекм,
ab initio
расчет

| 126: 178314p The vibrational spectra of the boron halides and their molecular complexes. Part 4. Ab initio predictions of the structures and vibrational spectra of the complexes of boron trifluoride with dimethyl ether and dimethyl sulfide. Nxumalo, L. M.; Ford, T. A. (Dep. Chem., Vista University Soweto Campus, Bertsham, 2013 S. Afr.). *THEOCHEM* 1996, 369, 115-126 (Eng), Elsevier. The optimized structures and vibrational spectra and vibrational spectra of the 1:1 complexes of B trifluoride with di-Me ether and di-Me sulfide were detd. by ab initio calcns. using the Gaussian-90 computer program at the Hartree-Fock level with the 6-31G** basis set. The results were rationalized from the interactions of the Lewis acid (BF_3) with a hard (Me_2O) and a soft (Me_2S) base. The magnitudes of the wavenumber shifts, both for the acid and the base fragments, are far larger for the complex with the hard than with the soft base. The computed results were used as aids in the interpretation of the IR spectra of BF_3 condensed with Me_2O and with Me_2S in cryogenic matrixes, to be reported in a forthcoming publication.

C. A. 1997, 126, N 13