

B-codgitt.

B-соединен. Вар V - 8010

1966

структура

Pawley G.S.,

Acta Cryst., 1966, 20,
631-638.

1969

- Coefficients B (all).

Guest H.F., Pedley J.B., Korn J.

J. Chem. Thermodyn, 1969, 1,
4, 345-352 (anal).

W30p:

1976

B - Top coeguresus

86:78750q Boron - an extraordinary element. Hoffmann, Karl Friedrich (Inst. Anorg. Chem., Freie Univ. Berlin, Berlin, Ger.). Umsch. Wiss. Tech. 1976, 76(24), 767-74 (Ger). A review with 5 refs. includes discussion of properties of B compds.

(cb-la)

C. A. 1977. 86 w12

Сов. Кумпуга
бора.

1987

Bartlett N.,
Okino F., et al.

Synth. Met., 1987, 19,
N 1-3, 981.

(Сов. Кумпуга; I)

Соединения Бора

1977

4 Д137. Молекулы в основном состоянии. 41. Расчеты борсодержащих молекул, методом МПДП. Dewar Michael J. S., McKee Michael L. Ground states of molecules. 41. MNDO results for molecules containing boron. «J. Amer. Chem. Soc.», 1977, 99, № 16, 5231—5241 (англ.)

расчеты
дН

Отмечено, что метод МЧПДП/3 даже при использовании оптимальной параметризации не привел к успеху при расчетах борсодержащих соединений. Сделан вывод, что причиной являются некоторые упрощения, присущие приближению ЧПДП, в частности, пренебрежение одноцентровым перекрыванием. Высказано предположение, что успех может быть достигнут в рамках метода МПДП, являющегося полуэмпирич. вариантом приближения ПДП. Разработана параметризация метода по наилучшему воспроизведению 49 свойств 10 отобранных молекул, в число этих свойств входили 10 теплот образования, 22 длины связи, 10 валентных углов, 3 потенциала ионизации и 4 дипольных момента. Отобраны соединения, представлявшие по ряду причин наибольшие трудности для количеств. вос-

ф. № 4. 1978

произведения их свойств в квантовохимич. расчете (неклассич. структуры и т. п.). Проведены сравнительные расчеты по методу МЧПДП/3 и сделан определенный вывод в пользу метода МПДП. Теплоты образования передаются в целом почти на уровне, достигнутом ранее для соединений, содержащих Н, С, N и О; исключение составляет несколько соединений, напр., $\text{H}_2\text{B}_2\text{O}_3$, $\text{B}_3\text{O}_3(\text{OH})_3$ и т. п., где отклонения составляют 60—40 ккал/моль; причина состоит в том, что метод МПДП переоценивает стерич. отталкивание в плотноупакованных структурах. Геометрия в целом передается удовлетворительно, хотя для связи ВН и желательно вводить систематич. (+0,031 Å) поправку; результаты несколько ухудшаются для соединений

с «ненормально высокой конц-ией многоцентровых связей» либо в тех случаях, когда присутствуют 4-центровые циклич. структуры. Значения потенциалов ионизации систематически занижаются в среднем на 0,92 эв, однако общая корреляция с экспериментом вполне удовлетворительна. Средняя ошибка в величинах дипольных моментов 0,51 ед. Дебая. Анализ расчетов позволил сделать вывод, что можно ожидать общего улучшения результатов расчетов при некотором уменьшении α_{ss} и α_{rr} параметров для В. Отмечено, что результаты расчетов по методу МПДП близки к эмпирич. расчетам в базисе 4—31 ГФ.

Г. М. Жидомиров

B-coequilibrium

1980

92: 100372r Empirical prediction of heats of formation and of redistribution of boron compounds using nonbonded interaction energy terms from redistribution equilibria. Elkaim, Jean Claude; Pace, Simonne; Riess, Jean G. (Lab. Chim. Miner., CNRS, 06034 Nice, Fr.). *J. Phys. Chem.* 1980, 84(4), 354-60 (Eng). A bond-energy decompn. scheme including second-order additive terms assigned to each pair of substituents of the central atom is applied to redistribution free energies of B compds. It allows the writing of linear relationships among these free energies, and leads, for example, to expressing the 16 equil. linking the 10 mol. species which result from the exchange of 3 distinct substituents of B as a function of 3 of them only. In this way numerous redistribution equil. data can be predicted from a limited no. of exptl. measurements. The use of bond-energy terms and the evaluation of the second-order interaction terms makes possible the prediction of enthalpies of formation of a no. of tri- and tetraat. B combinations. Their comparison with the available exptl. data shows a good agreement.

46f

C.A. 1980, 92, N12

В-соединения

1982

Kp

Медведеву
показать.

18 Б783. Равновесное состояние в системах В—Cl—H и В—Cl—H—O при повышенных температурах. Gleichgewichtszustände in Systemen В—Cl—H und В—Cl—H—O bei höheren Temperaturen. Wagner Wolfgang, Bochmann Gerd. «Wiss. Z. Techn. Hochsch. Karl-Marx-Stadt», 1982, 24, № 6, 672—681 (нем.)

С использованием вычислительной программы EHMSYS на ЭВМ ЕС-1040 рассчитаны равновесные составы реакц. систем H_2-BCl_3 и $H_2-BCl_3-H_2O$ при содержании в исходной смеси 1, 2, 5, 10, 25 и 50 об% BCl_3 , а также исходных объемных долей газ. воды, равных 0; 0,02; 0,05; 0,10; 0,25 и 0,50 об.% при t -рах 800, 1000, 1200 и 1400 К. Исходные термодинамич. данные взяты из таблиц JANAF. Отмечается, что результаты расчетов, приведенные в таблицах, подтверждают большую сложность равновесных составов исследован-

X. 1983, 19, N 18

ных систем. Подчеркивается, что присутствие кислорода в системе способствует наряду с образованием бороксина ($B_3H_3O_3$) и трихлорбороксина ($B_3Cl_3O_3$) полному подавлению или по крайней мере сильному уменьшению выделения тв. бора при одновременном сильном увеличении равновесных конц-ий газ. галогенборанов — BCl_3 , $BHCl_2$ и BH_2Cl .

В. Ф. Байбуз

B - соединен.

1983

100: 220477j Boron, aluminum, gallium, indium, thallium.
Welch, A. J. (Dep. Chem., Univ. Edinburgh, Edinburgh, UK EH9
3JJ). *Annu. Rep. Prog. Chem., Sect. A: Inorg. Chem.* 1983,
79(1982), 19-89 (Eng). A review with 395 refs. for 1982 of Group
IIIA metal compds.

обзор свойств

(74) 

Al, Ga, In, Tl

с. А. 1984, 100, N 26

B

1984

(соединение)

12 Б2002. 3. Бор. 3 Boron. Greatrex R. «Annu. Repts Progr. Chem.», 1984, 81, Ser. A, 29—74 (англ.)

Обзор структурных исследований борсодержащих соединений (публикации 1984 года). Рассмотрены след. классы соединений: бориды и их аналоги, бораны и их пр-ные, металлобораны и их пр-ные, карбабораны и металлокарбабораны, соединения, содержащие азот и фосфор. Библ. 157. А. И. Гусев

(обзор)

X. 1986, 19, N 12

В-соединение

1984

4 Б2001. Конструирование и синтез новых полиэдрических металлоборанов. The design and synthesis of novel polyhedral metalloboranes. Greenwood Norman N. «Chem. Future. Proc. 29th IUPAC Congr., Cologne, 5—10 June, 1983». Oxford e. a., 1984, 131—134 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Тезисы доклада на 29-ом конгрессе IUPAC «Химия будущего» в Кельне (5—10 июня 1983 г.). Указывается, что в настоящее время синтезировано 70 типов металлоборановых каркасов, половина из к-рых не имеют аналогов среди боранов и борановых анионов. Большое разнообразие металлоборанов, среди к-рых ныне имеются производные почти всех металлов Периодич. системы (за исключением наиболее электроположительных металлов I, II и III групп), связано с различным числом орбиталей и электронов, к-рые могут быть внесены в полиэдр атоме металла. Приводятся схематич. изображения всех известных типов металлоборановых полиэдров. А. И. Яновский

(обзор)

Х. 1985, 19, 44

В-соединения

1984

Семенов, Юрий Владимирович.

Термодинамический анализ условий образования боросиликатов и боратов кальция и магния в эндогенных процессах : Автореф. дис. на соиск. учен. степ. канд. хим. наук. (04.00.02). — М., 1984. — 25 с., черт.

В надзаг.: АН СССР, Ин-т геохимии и аналит. химии им. В. И. Вернадского. Библиогр.: с. 24—25 (8 назв.).

№ 8492

А 9 № 427 [84-3969a]

ВКП 28.05—1.06.84

В-соединения

1990

11 В1. Аммиакаты боргидридов металлов / Кравченко О. В., Кравченко С. Е., Семенов К. Н. // Ж. общ. химии.— 1990.— 60, № 12.— С. 2641—2660.— Рус.

В обзоре обобщаются сведения о синтезе и св-вах аммиакатов боргидридов металлов, а также ИК-спектроскопич., термхим. и структурные данные. Библ. 84.

Автореферат

(обзор)

Х. 1991, № 11

В-соедин. Jana Michel, 1992
Leroy Georges et al,

$\Delta H_f, \Delta G$ Organometallics-1992.
11. N2. C. 781-787.

(см. ● Li-соединения; I)

B - coenzyme {Am. 39638, a11
Hill

1999

Peter Politzer, et al.,

металлохим. ж. Phys - Chem. 1999,
заг. соед. A103, 1419-25