

Si₂F₆

Si₂F₆

Bqp 9846-IV 1963

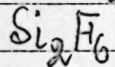
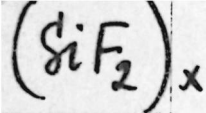
Samworth EA

Robinson DW.

(9i)

Sympos. Molec. Struct. and
Spectroscop. "Columbus"
1963, "Columbus, Ohio, Sa
71.

Infrared spectrum...



gaseous
phase

Kana'an A.S.,
Margrave J.L.

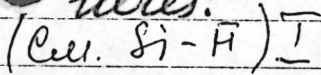
1964

Inorg. Chem.,

3, N7, 1037

Evidence for the stability of complex silicon-fluorine species at high temperatures.

C.A. 1964. 61. 6



Si_2F_4

reac.

cup-ra

Pearson R. G. 1970

J. Chem. Phys.,

1970, 52, 5, 2164

(Cu. C_2H_2)^{IV}

1972

 Si_2F_6 D_{3d} сил. пост.
кон. сила

9 Б236. Колебательный спектр и силовые постоянные гексафтордисилана. Höfler F., Waldhör S., Hengge E. Schwingungsspektrum und Kräftekonstanten von Hexafluordisilan. «Spectrochim. acta», 1972, A28, № 1, 29—32 (нем., рез. англ.)

Измерен ИК-спектр Si_2F_6 в газовой фазе и спектр КР жидкости. Предложено отнесение колебаний в терминах точечной группы симметрии D_{3d} . Проведен анализ нормальных колебаний и вычислены силовые постоянные для модели с тетраэдрич. углами и длинами связи SiF и SiSi 1,54 и 2,32 Å соотв. Силовая постоянная связи Si—Si составляет $2,4 \pm 0,2$ мдин/Å и не отличается от ее значения в Si_2Cl_6 . Силовая постоянная SiF понижена по сравнению с соотв-щей величиной в SiF_4 .

Е. Разумова

РЖХ, 1972, 29

Si₂F₆

1972

- \ 4 Д427. Колебательные спектры и силовые постоянные гексафтордисилана. Höfler F., Waldhör S., Hengge E. Schwingungsspektrum und Kraftkonstanten von Hexafluordisilan. «Spectrochim. acta», 1972, A28, № 1, 29—32 (англ.)

(сил.
посий.)

Получены ИК-спектры и спектры комб. рас. Si₂F₆. Дано отнесение колебаний. Вычислена валентная силовая постоянная SiSi, равная $2,4 \pm 0,2$ мдин/Å. Библ. 12.

р. 1972. 42

1972

 Si_2F_6

65882c Vibrational spectra and force constants of hexafluorodisilane. Hoefler, F.; Waldhoer, S.; Hengge, E. (Inst. Anorg. Chem., Tech. Hochsch., Graz, Austria). *Spectrochim. Acta, Part A* 1972, 28(1), 29-32 (Ger). The ir and Raman spectra of Si_2F_6 were measured and assigned. By using normal coordinate anal., the SiSi stretching force const. was calcd. as 2.4 ± 0.2 mdyne/Å.

(vi)
(cur.
not)

C. A. 1972. 76. 12

Si₂F₆

1973
Craddock Stephen;
et al.

Chem. Soc. Dalton Trans

1973, N22, 2401-04.

[Chem. Si F₃ H; III)

$F_3Si-SiF_3$

45-9704

1975

Структура
мол. мол

1 Б130. Молекулярная структура гексафтордисилана, определенная методом газовой электронографии. Rankin D. W. H., Robertson A. The molecular structure of hexafluorodisilane, determined by gas phase electron diffraction. «J. Mol. Struct.», 1975, 27, № 2, 438—439 (англ.)

Строение молекулы гексафтордисилана, $F_3Si-SiF_3$, исследовано методом газовой электронографии при $t = 298^\circ K$. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_α) и среднеквадратичных амплитуд колебаний $Si-F$ 1,569 (2), 0,047 (2), $Si-Si$ 2,324 (6), 0,068 (7) Å. Угол между двумя группами SiF_3 , если отсчитывать его от затененной конформации, составил $34,6^\circ$. Угол $Si-Si-F$ $110,6(3)^\circ$. В сравнении с молекулой SiH_3-SiH_3 ожидаемого сокращения связи $Si-Si$ не произошло, вследствие близких контактов между атомами фтора разных групп SiF_3 , отталкивание между к-рыми уравновесило понижение орбитальной энергии связи $Si-Si$ при замене атомов H на F. И. Попова

x/1976 N1

Si_2F_6

#13 - 9704

1975

121131r Molecular structure of hexafluorodisilane determined by gas phase electron diffraction. Rankin, D. W. H.; Robertson, A. (Dep. Chem., Univ. Edinburgh, Edinburgh, Scot.). *J. Mol. Struct.* 1975, 27(2), 438-9 (Eng). The mol. structure was detd. of Si_2F_6 by using a Balzers' KD.G2 electron diffraction app. with a nozzle temp. of 298°K and a sample temp. of 209°K . The Si-Si bond length in Si_2F_6 is 232.4 ± 0.6 pm as compared to the value for Si_2H_6 ; 233.1 ± 0.3 pm. Any contraction caused by the F atoms lowering the Si-Si bond length is almost balanced by the repulsion between the F electrons.

mol. struct.

C.A. 1975, 83 N14

SiF₆

43-12787

1976

16 Б93. Электронографическое исследование и расчет по методу ППДП/2 молекулярной структуры и внутреннего вращения гексафтордисилана, Si₂F₆. Oberhammer H. An electron diffraction and CNDO/2 investigation of the molecular structure and internal rotation of hexafluorodisilane, Si₂F₆. «J. Mol. Struct.», 1976, 31, № 2, 237—245 (англ.)

структ.
молекул.

Методом газовой электронографии изучена структура и внутреннее вращение молекулы Si₂F₆. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_a^0 , Å) и углов: Si—Si $2,317 \pm 0,006$, Si—F $1,564 \pm 0,002$, FSiF $108,6 \pm 0,3^\circ$. Барьер внутреннего вращения найден равным $0,51 \pm 0,10$ или $0,73 \pm 0,14$ ккал/моль, в зависимости от различных предположений относительно т-рного перепада, из-за расширения пара при истечении из сопла. По ме-

Х. 1976. № 16.

тоту ППДП/2 рассчитаны также барьеры внутреннего вращения для молекул Si_2X_6 ($\text{X}=\text{H}, \text{F}, \text{Cl}$). При этом оказалось, что когда $3d$ -орбитали кремния включаются в расчет, результаты для Si_2F_6 и Si_2Cl_6 резко отличаются от эксперим. значений. Наоборот, в пренебрежении $3d$ -орбиталями теор. вычисленные и эксперим. значения барьеров хорошо согласуются. В. Спиридонов

Si_2F_6

Si_2Cl_6

Si_2Br_6

Si_2I_6

(ссыл. постр.)

(43) $\boxtimes$

д. 1949, 11

1948
1 B258. Модифицированное силовое поле Юри-Бредли для гексагалодисиланов. Sahini V. E., Grigovici R., Butucelea A. A modified uryey-bradley force field for hexahalodisilanes. «Rev. roum. chim.», 1978, 23, № 5, 643—649 (англ.)

Вычислены силовые постоянные Si_2X_6 ($X=F, Cl, Br, J$), симметрия D_{3d} , в модифицированном силовом поле Юри-Бредли. Первоначально расчет провели в поле Юри-Бредли без модификации с использованием 8 силовых постоянных; в этом приближении не получено удовлетворительного согласия с эксперим. данными (особенно велико расхождение с эксперим. частотами для $X=F$). На след. стадии расчета введены константы взаимодействия двух групп SiX_3 и взаимодействий внутри групп SiX_3 . Вал. силовые постоянные $Si-X$ близки к соотв-щим значениям в SiX_4 , вычисленным ранее. При переходе от F к J наблюдаются те же тенденции, что в замещенных этанах. Вал. силовая постоянная $Si-Si$ в Si_2X_6 выше, чем в Si_2H_6 , т. е. при введении галогена величина K_{SiSi} возрастает, что свидетельствует о возрастании s-характера этой связи. В этанах, напротив, связь C—C ослабляется при введении галогена.

Е. Разумова

29-949-11X

$(SiF_3)_2$

XIV-9846-BP

1978

89: 119856m A modified Urey-Bradley force field for hexahalodisilanes. Sahini, V. E.; Grigorovici, Rodica; Butucelea, A. (Cent. Phys. Chem., Bucharest, Rom.). *Rev. Roum. Chim.* 1978, 23(5), 643-9 (Eng). The Urey-Bradley force field was modified to reproduce the obsd. spectra of the hexahalodisilanes. The estd. force consts. are discussed in terms of the strength and nature of the Si-Si and Si-halogen bonds. The assignment of all vibrational bands is given.

Chem. revm.

C.A. 1978, 89, N14

1979

 Si_2F_6

92:11558p Molecular constants of hexafluorodisilane, Si_2F_6 . Natarajan, A.; Chockalingam, K. (Dep. Phys., Auton. P. G. Cent., Tiruchirappalli, 620020 India). *Acta Cienc. Indica, [Ser.] Phys.* 1979, 5(2), 43-7 (Eng). A normal coordinate anal. was made for the mol. Si_2F_6 , on the basis of general valence force field. With the aid of these const. and the vibrational frequencies, the mean-square amplitudes of vibration, the generalized mean-square amplitudes of vibration, shrinkage const., Coriolis coupling coeffs. and the Centrifugal distortion const. were computed.

Cen. no. 5.

Si

вектор.

распределение



C. A. 1980. 92, 112

Si_2F_6

1985

Mohan S., Subramanian K.

постоян.
центробежн.
растяжнем.

Acta Cienc. Indica,
Phys. 1985, 11 (4),
168-74.

(ссыл. ● $\text{N}_2\text{H}_6^{2+}$; III)

Um. 22 296

1985

$F_3Si-SiF_3$ Stölevik R., Bakken P.,

раск.
структур,
красоч.
гипер,
све. раск.

J. Mol. Struct., 1985,
124, N 1-2, 133-142.

$F_3Si-SiF_3$

1993

Masteyukov V.S., Boggs..., Sam-
dal S.,

структура,
стабильн.,
теор. расчет

THEOCHEM 1993, 102, 199-206

Сил. $H_3C-\bullet$ CH_3 ; III)

Si_2F_6

1994

122: 41285c Vibrational spectroscopy and force field calculations in Si_2F_6 . Tosa, V.; Isomura, S.; Kuga, Y.; Takeuchi, K. (The Institute of Physical and Chemical Research, Wakoshi, Japan 351-01). *Vib. Spectrosc.* 1994, 8(1), 45-52 (Eng). The IR and Raman spectra of gaseous Si_2F_6 have been measured in the spectral range from 150 to 4400 cm^{-1} and from 30 to 2000 cm^{-1} , resp. We have found that the doubly degenerate antisym. vibrations are not only IR but also Raman active. The previously assigned D_{3d} structure of the mol. is therefore questionable and other possible structures are discussed. The torsional frequency has been indirectly measured to be 38 cm^{-1} . Values for the harmonic force field consts. have been obtained with the Wilson's F-G matrix method and compared with a previous calcn. Coriolis coupling consts., vibrational amplitudes and isotopic shifts have also been estd.

CHK, Pi,
Calc. 100 cm⁻¹.

C.A. 1995, 122, N 4

Si_2F_6

1994

122: 225458t Infrared multiple-photon absorption spectra of Si_2F_6 . I. Experimental results. Tosa, Valer; Isomura, Shohei; Takeuchi, Kazuo (RIKEN, Wako, Japan). *Reza Kagaku Kenkyu* 1994, 16, 105-7 (Eng). The multiple-photon absorption (MPA) of CO_2 laser radiation in gaseous Si_2F_6 was measured. The no. of photons absorbed per mol. as a function of laser frequency i.e. the MPA spectra are reported in the CO_2 laser $10\ \mu\text{m}$ R branch for three different laser fluences. The spectral structures obsd., as well as other absorption characteristics are discussed in connection with the isotopically selective multiple-photon dissocn. process.

(UK)

C.A. 1995, 122, N18

SiF₆

1995

123: 68916s The high-resolution ν_7 perpendicular band of jet-cooled SiF₆. Tosa, V.; Urban, R.-D.; Takami, M.; Takeuchi, K. (Inst. Phys. Chem. Res., Wako, Japan 351-01). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 172(1), 254-64 (Eng). The vibration-rotation spectrum of the perpendicular band ν_7 of ^{28,29}SiF₆ has been studied in a supersonic free jet with 0.001 cm⁻¹ resolu. The spectrum covering the KΔK = -17 to 8 subbands shows a local perturbation for KΔK > 2. The whole spectrum has been successfully analyzed by assuming a Fermi interaction from a very close combination state. Also, the Q branch of the ν_7 band of ^{28,29}SiF₆ has been identified.

UK energy,
ν₇

C.A. 1995, 123, N 6

1995

F: Si₂F₆

P: 3

5B1335. Перпендикулярная полоса 'ню'[7] высокого разрешения охлажденного в струе Si₂F₆. The high-resolution 'ню'[7] perpendicular band of jet-cooled Si₂F₆ / Tosa V., Urban R.-D., Takami M., Takeuchi K. // J. Mol. Spectrosc. - 1995. - 172, N 1. - С. 254-264. - Англ.

С использованием охлаждения в сверхзвуковой струе и перестраиваемого диодного лазера с разрешением 0,001 см⁻¹ исследован колебательно-вращат. ИК-спектр поглощения в области полосы колебания моды 'ню'[7] S₂F₆ ЭКВИВ'992 см⁻¹. Идентифицированы подсистемы полос от К'ДЕЛЬТА'К=-17 до К'ДЕЛЬТА'К=8, предложена их интерпретация с учетом возмущения за счет резонанса Ферми.

Р.Ж.Х. NS, 1996

Si₂F₆

1995

122: 276772y The high-resolution ν_3 band of jet-cooled Si₂F₆. Urban, R.-D.; Tosa, V.; Takami, M.; Takeuchi, K. (Inst. Physical Chem. Res., Wako, Japan 351-01). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 170(2), 424-30 (Eng). Vibration-rotation spectra of the parallel ν_3 band of hexafluorodisilane have been measured in a supersonic free jet with 0.001 cm⁻¹ resolu. Three isotopic species, ^{28,28}Si₂F₆, ^{28,29}Si₂F₆, and ^{28,30}Si₂F₆, have been studied. The effect of internal rotation is not obsd., indicating that the splitting is smaller than our spectral resolu. A very weak parallel band obsd. with a slight red shift from the ν_3 fundamental band has been assigned tentatively to the ($\nu_4 + \nu_3$)- ν_4 hot band.

(P5)

C.A. 1995, 122, 1222

Si_2F_6

1997

Cho Soo Gyeong,
Rim Ore Kwon,
et al.

$te, \Delta, Vi, Vo,$
meop.
pacr_{iii}

J. Comput. Chem.
1997, 18 (12), 1523-
1533. ●

(cell. Si_2H_6 ; III)

Si₂F₆

Om 38881

1997

/ 127: 226656w Si₂F₆ vibrational spectroscopy revisited. Tosa, V.; Ashimine, K.; Takeuchi, K. (Inst. Isotopic Molecular Technology, 3400 Cluj-Napoca, Rom.). *J. Mol. Struct.* 1997, 410-411, 411-414 (Eng), Elsevier. The far-IR spectrum for gaseous Si₂F₆ was measured in the spectral range of 10 to 350 cm⁻¹. The main obsd. bands have maxima at 38, 104 and 308 cm⁻¹ and were assigned to ν_4 , ν_9 and ν_8 normal modes, resp. By using recent spectroscopic values measured by one for the 3 most abundant isotopomers of Si₂F₆, the authors obtained a new set of improved harmonic force field consts. for this mol.

(lek creep)

C. A. 1997, 127, N 16