

Sifty

SiF₄

L.O. Brockway, F.T. Wall,

1934

7ACS, 56, 2373

Incipient p. UACG.



SiF₄

Pauling L., Brockway L.O. 1935

25.-f

JACS, 57, 2684,

Thermodynamic study.

SiF₄

Brockway L.O.

11936

Rec'd. 11/19/36

Rev. Mod. Phys. 8, 231

SiF₄

Бускен А., Бердхам А.,

11936

Z. phys. Chem. B31, 361.

Расчет силовых и зарядных

1024

1936

ω (CF_4 , SiF_4)

Yost D.M., Lassettre N., Gross S.T.
J.Chem.Physics 1936, 4, 325

"Raman spectra of carbon and
...

C.A., 1936, 4092⁸

to

SiF_4

40715

510

Лосев, В. В. и Кабанов, Б. Н.

Электрохимическое поведение железа в горячих концентрированных растворах щелочи. [Сообщ.] 1 и 2.

Журнал физ. химии, т. 28, вып. 5, 1954, с. 824-836, 914-925.

Библиогр: с. 836, 925

№ 25140

V № 1144

Всесоюз. кн. палата 30 VI 54

15-3

Sif

Anandhakrishnan R.

1937

Proc. Indian Acad. Sci SA, 447

Резюме сообщений по физике

SiF₄

2SiF

bp - 70.29 - IV

Braune H., Pinnow P.,

11937

Z. phys. Chem., B38, 239

Isopropylal. u. u. u.

IV-992-BF 1938
 CF_4 , SiF_4 (mentionné par erreur)

Bailey C.R., Hale J.B., Thompson J.W.
Proc. Roy. Soc. (London) 1938, A167,
556-67

"The molecular structure of ...

CA., 1939, 4128⁶

SiF_4

SiRy

D. M. Jost

1938

Proc. Indian Acad. Sci. 8A, 333

через.

Содержащая ~~но~~ о присутствии

2¹/₂ минута при 268 см⁻¹ и 463 см⁻¹

которые были найдены в
неосуданкованной пробе

Besta и Трампс

SiF₄

Герцбер 2. Нерувер
Многочисленный

1945

из книги Коаврауно 1988.

$$V_1 = 800 \text{ см}^{-1} \quad V_3 = 1022 \text{ см}^{-1}$$

$$V_2 = 260 \quad V_4 = 420$$

Рассчитано по полю центральных сил:

$$K_1 = 0,47 \cdot 10^5 \text{ дин см}^{-1}$$

$$K_2 = 5,29 \cdot 10^5 \text{ дин см}^{-1}$$

$$K' = -0,288 \cdot 10^5 \text{ дин см}^{-1}$$

SiF₄

Dibeler V. H., Mohler F. L. ¹⁹⁴⁸

J. Res. NBS 40, 25-29

Диссоц. SF₆, CF₄ и SiF₄
электронные углероды

CA 42, 32 51g.

Cl₄
SiCl₄
SiCl₄
и др.

Simonov: T.

1949

J. Ch. Ph. 17, 848.

Корм. колебания многоатом-
ных молекул, расщепленные
по методу Уэй-Брадли.

II. Таблица свойств соединений
(сравнение разл. и надп. - 1949)

Велич IV, 41; II, 165.

5738

1957

SiF_4 ()

Jones E.A., Kirby-Smith J.S., Woltz P.
Nielsen A.H.

J.Chem.Phys., 1951, 19, 242-5

Infrared and Raman...

J

1011
 $\text{CF}_4, \text{SiF}_4$ (carbon tetrafluoride) 1951

Linnett J.W., Heath D.F.

J.Chem.Phys., 1951, 19, 801-2

Force fields of carbon and ...

SiF_4

C.A., 1951, 7834g

F. Volz, A. Meiser, F. Cleveland

1951.

S.F.
 ~~наблюдения~~

J. Chem. Phys.

19, 1084.5

Смещение изотопных и изотопных
св-в S.F.

теория, св-ва, энергия, изотопы и изотопы
для идеальн. газа при $p = 1 \text{ ат}$. расчеты
для II изотопов в обл. 100 - 1000 K.
в прил. ²¹ изотоп. рождение и зарисовка



$$v_1 = 800 \text{ cm}^{-1}$$

1

$$v_2 = 268$$

2

$$v_3 = 1031$$

3

$$v_4 = 331$$

3

$$\text{Si-F} = 1.54 \text{ \AA}$$

$$J_1 = J_2 = J_3 = 147 \text{ auw } \text{\AA}^2$$

$$\frac{2 \times 147 \times 0.75}{1.54 \times 1.54}$$

SiF₄

Voeltz, Meisner, Cleveland 1952

J. Ch. Ph. 20, 1498 Erratum.

Синтез и пары
фтористого кремния.

Bull. II, 159.

CF_4
 SiF_4
 SF_6

D.F. Hornig, Schatz P.

1953.

J. Ch. Ph. 21 1516.

Bond Moments and Derivatives
in $\text{CF}_4, \text{SiF}_4, \text{SF}_6$. from U.K. inst.

~~Рассуждения~~ Углеродные цепь измерения
при 5-м параметр дается в измерениях
суде. Углеродные в работе измерения
милан в сфере: Hornig и др. —
JOSA 40, 493, 1950.

A Thallium bromide-iodide crystal used for
the 3rd order. The 103rd order
was observed, a real salt crystal.
 $\lambda(\text{SEP}) = 1.54 \text{ \AA}$ Brockway Revs. Modern Phys. 8, 231, 1936

Hooftengelenk Zarteb Jones, Kirby

u sp. $v_1 = 800 (\text{m})$
 $v_2 = 268 (\text{m})$

$v_3 = 1031$

$v_4 = 381$

CF₄

SiF₄
SF₆.

1953

Schatz, P.V., and Hornig, D.T.

J. Chem. Phys. 1953, 21, 1576

Bond moments and derivatives in CF₄, SiF₄ and SF₆ from infrared intensities

C.A. 48

1743c

SiF ₄	Hoji M. Hipscomb W.D. Acta Cryst 1954
Курсан)	7,597
Средства	Курсануеауа ерхуеуа SiF ₄
	$d_{Si-F} = 1.56 \pm 0.01 \text{ \AA}$
CA 48	
03332e	

SiF_3H

Burrows C. A., Gordy W.

J. Chem. Phys., 1957 26, 391.

Спектры некоторых молекул
типа симметричного вращения
в 1 и 4 мм области длин волн.

 CH_3CCH OPF_3 CF_3H $\text{Si}^{32}\text{F}_3\text{H}$ CF_3CN

GeT₄ | Тоднев И.Н. и др. | 1957

(S.F₄) | Дигина и Смирн., 2, 16, 204-5.

Равенств. окисл. и восстанов.
группы GeT₄

1:171, 60, 276 и 85 см.

Пример с S.F₄. (Совместно с Смирн.)

P.A. 61
W723 1289

SiF₄

Pistorius C. W. F. T.

J. Ch. Ph., 1958, 28, N3, 514.Chem. nocin. XY, ~~uniparagon~~ uniparagon. uniparagon - u.

fdd fd fdd-fdd' fd-fdd' fdd-fdd'

SiF₄ 0,497 5,794 2,536 2,923 1,328

-0,106 0,519 0,125

SiCl₄ 0,399 2,575 1,216 1,653 0,748

-0,029 0,296 0,070

1) J. Ch. Ph., 1957, 27, 965.

$$fd - fdd' = 0,296$$

$$fdd - fdd' = 0,070$$

$$fd - fdd = 0,226$$

1960

SiF₄

4Б192. Примесные полосы поглощения в инфракрасных спектрах неорганических фторидов. Heslop W. R., Ketelaar J. A. A., Büchler A. Contaminant absorption bands in the infrared spectra of inorganic fluorides. «Spectrochim», acta, 1960, 16, № 4, 513 (англ.).—В ИК-спектрах поглощения неорганич. галогенидов часто наблюдаются полосы Na₂SiF₆ при 13,75 м и SiF₄ при 9,7 и 8,2 м. Эти полосы обнаружены в ИК-спектрах AlF₃, BeCl₂, BeF₂, ZnF₂, SbF₃ и NH₄BF₄ (SiF₄ может появляться, напр., в результате р-ции F₂ со стеклом при проведении экспериментов, а Na₂SiF₆ в результате р-ции SiF₄ с окошком из NaCl).

А. Штейнберг

2.1961-44

1960

ЗБ144. Теория интенсивностей инфракрасных спектров молекул. VI. BF_3 , NF_3 , SiF_4 и SF_6 . Свердлов Л. М. «Оптика и спектроскопия», 1960, 8, № 2, 183—190.—В первом приближении валентно-оптич. схемы произведен расчет электрооптич. параметров молекул BF_3 , NF_3 , SiF_4 и SF_6 на основе использования абс. интегральных интенсивностей ИК-полос указанных молекул. Установлено закономерное возрастание дипольного момента связи $\text{X}-\text{F}$ при увеличении разности электроотрицательностей атомов X и F . Предыдущее сообщение см. РЖХим, 1960, № 21, 83708.

Резюме автора

ж. 1961.3

SiF₄

Box A-14

1961

Fantz R. J.; et al.

Konradson.

energ,

empowerment

Silanes: Vibrat Assign

ment ...

Oct. 1961, 34 N10, 1485-

1962

Godner I. N., Aleksandrovskaya,
and Sverdlin A. S.
(Chem. Technol. Inst. / Ivanovo).

Correspondence of the force constants of the molecules XY_4 and XY_3 in which elements X are of Group IVB and elements Y are halogens

C.A. 1963. 59.1
419h

1962

SiF₄
 OsO₄
 RuO₄
 CH₄
 CD₄
 CT₄

2 Д89. Средние амплитуды колебаний некоторых тетраэдрических молекул типа XY₄. Ч. I. Nagata-jan G. Mean amplitudes of vibration of some tetrahedral XY₄ type molecules. Part I. «Bull. Soc. chim. belg.», 1962, 71, № 5—6, 347—360 (англ.)

Составлены координаты симметрии для колебаний тетраэдрич. молекулы XY₄. Средние значения квадратов и парных произведений этих координат образуют матрицу Σ . Средние значения квадратов и парных произведений естественных колебательных координат и изменений расстояний любой пары атомов образуют матрицы σ . Элементы матриц σ являются линейными комбинациями элементов матрицы Σ . Эти элементы определяются из уравнения $|\Sigma G^{-1} - E\Delta| = 0$ или $|F\Sigma - E\epsilon| = 0$, в которых G^{-1} — матрица кинетич. энергии, E — единичная матрица, F — матрица силовых постоянных, $\Delta_k = (h/8\pi^2\nu_k) \text{ cth}(h\nu_k/2kT)$, $\epsilon = 4\pi^2\nu_k^2\Delta$. Расстояние между двумя любыми атомами проектируется на направление равновесного расстояния между ними и на два других направления, перпендикулярных к этому направлению и друг к другу. Средние значения изменений квадратов этих проекций и парных произведений изменений самих проекций также

4 фарт.
 7. 1963. 20

см
 1405

выражаются через элементы матрицы Σ . Все эти величины вычислены для молекул SiF_4 , OsO_4 , RuO_4 , CH_4 , CD_4 , ST_4 при $T=0^\circ\text{K}$ и $T=298^\circ\text{K}$. Вычислены также средние амплитуды колебаний межатомных расстояний при тех же T -рах. Приводятся системы фундаментальных частот всех шести молекул.

М. Ковнер

1962

BP- 8692 - IV

SiH_4 , SiF_4 , SiCl_4 , SiB_4 , SiI_4 ,

$\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ (sil.post.)

Radhakrishnan M.

Z. Phys.Chem. (BRD), 1962, 35, N 4-6,
247-252

Potential sonstants of some...

5742

1962

SiF₄ ()

Sankaranarayanan S.

The ultraviolet band spectrum of
silicon difluoride

Proc.Nat.Inst.Sci.India, 1962,

A28, N 2, 311-316

J

Bop-5655-I

1962

SiF₄

Venkateswarlu K.

Thanala Kshmi R.

Chem. Ind.

Vi

J. Sci. Industr. Res.

(² ~~FF~~)

1962, 21 B, 461-63

SiF_4

1963

Смесь и.к.
в равновесии

Абрамовиц С., Баенман
R. P.

J. Chem. Phys., 1963, 39 (10), 2757.

Измерение констант и.к.
полос в равновесии (SiF_4)

SiF₄

(P)

| ВД-М658-IV | 1963

Цириков В.В.,
Смирнов З.Г., ...

М. физ. химии,
1963, 36, 237-41

1963

SiF_4

Long D.A., Thomas E.L.

11-1105-5011-11
B93-5011-5011-11

Tr. Faraday Soc., 59, 1026 - 32

ИНТЕНСИВНОСТЬ РАМАНОВСКИХ ЛИНИЙ.

Часть 9. Интенсивность колебаний в
сферических симметричных мол-лах

CH_4 , CD_4 , CF_4 , SiF_4 , SF_6 , SeF_6 ,
 TeF_6

LiF_4 Pace E.L., Messer J.S.

$\gamma < 194^\circ\text{K}$ J. Chem. Phys., 1963, 39, 154 (11)

ρ T_g изог. с-ва рентгеновского излучения

$\Delta H_v, \Delta S_v$ кристалл в 15°K со ср. точки. Энтропия

T_m нит из молекул и энергии. Рентген.

$$S_{186,35}(\text{LiF}_4, \text{cr}) = 59,85 \pm 0,20 \text{ (калория)}$$

$$S_{186,35}(\text{LiF}_4, \text{cr}) = 60,037 \text{ (энергия)}$$

SiF₄ книга Шимановски 1963
серб у Гурбурга

Шимановски Т.

суд. ност Pure Appl. Chem.
1963, 4 (1), 131-45

Si F_y

Shimanouchi T.

1963

Chem. Abstr. Pure Appl. Chem., 7(1), 131-45.

Force constants of small molecules.

(see. CCl₄)

C.A. 1963.59.12

13447 et

1963

 SiF_4

сил. пог.

6 Б227. Силовое поле Юри — Бредли. Молекула SiF_4 .
 Venkateswarlu K., Thanalakshmi R. Urey —
 Bradley force field: SF_4 molecule. «Proc. Indian Acad.
 Sci.», 1963, A57, № 3, 181—185 (англ.)

С помощью эксперим. значений частот колебаний мо-
 лекулы SiF_4 вычислены силовые постоянные Юри —
 Бредли. Е. М.

ж. 1965. 6

SiF₄

Cyrin P. F., Brunnvoll 7. 1964
и др.

Bull. Soc. chim. belg., 73, n° 1-
-2, 5-22.

А-622

Среднеквадратичные амплитуды колебаний и ряд количественных характеристик спектров инфракрасных молекул типа X_2Y (см. СМЧ)

Si Fy

Чаркин О.П.,
Деткина М.Е.

1964

пол.
сп-ра

[A-385]

ж. сберукт. химии,
1964, 5, ~6, 924.

● (См. СЧ-ан. пер.)
См. РВЛЧ сбр. III
стер

SiF₄

Вар - М 838 - IV

1964

5 Д292. ИК-спектр SiF₄. Heicklen Julian, Knight Vester. The infrared spectrum of SiF₄. «Spectrochim. acta», 1964, 20, № 3, 295—298 (англ.)

ИК -
спектр

Получен ИК-спектр Si²⁸F₄ (а также Si²⁹F₄ и Si³⁰F₄) при высоком разрешении в вакууме (300—2100 см⁻¹, Perkin-Elmer 13 U). Впервые обнаруженная полоса при 1803,0 см⁻¹ отнесена к $\nu_3 + 2\nu_4$. Уточнены отнесения полос при 777,8 и 1063,1 см⁻¹ $2\nu_4$ и $\nu_1 + \nu_2$, соответственно. Константа силового поля Юри — Бредли плохо совпала с литературными данными.

Л. Гудкин

ф. 1966. 52

Si F₄

Bop - 4838 - IV

1964

U. K.

V_i

Calc. 4000.

The infrared spectrum of SiF₄. Julian Heicklen and Vester Knight (Aerospace Corp., El Segundo, Calif.). *Spectrochim. Acta* 20(3), 295-8(1964)(in English). The infrared spectra of normal (²⁸Si) and isotopically enriched (²⁹Si and ³⁰Si) SiF₄ were observed from 300 to 2100 cm.⁻¹ on a grating instrument operating in a vacuum. A band not previously reported for ²⁸SiF₄ was found at 1803.0 cm.⁻¹ and assigned as $\nu_2 + 2\nu_4$. The assignments of the ²⁸SiF₄ band at 777.8 and 1063.1 cm.⁻¹ were cor. from $\nu_2 - \nu_2$ and $\nu_2 + 2\nu_4$ to $2\nu_4$ and $\nu_1 + \nu_2$, resp. The anharmonicities assocd. with the vibrations are small; the quadratic potential consts. were calcd. easily, and are listed in the report. The Urey-Bradley force consts. also were computed and were theoretically unsuitable.

RCSQ

C.A. 1964. 60. 8

8785h - 8786a

SiF₄

Москва Р.

1964

монок.
расшир

Ж. Сили. Рус., 1964, 40, 2164.

Оксидирование бариевого ма-
бор ССП МО. I. HF, CH₄ и SiH₄

(с см. HF)

1964

SiH₄
SiO₄
SiF₄
" "
SiH₄

16 B129. Средние амплитуды колебаний некоторых тетраэдрических молекул типа XY₄. Часть VIII. Тетрагалогениды кремния. Nagarajan G. Mean amplitudes of vibration of some tetrahedral XY₄ type molecules. Part VIII. Silicon tetrahalides. «Bull. Soc. chim. belg.», 1964, 73, № 9-10, 768—781 (англ.)

Приводятся численные значения частот колебаний 4 молекул тетрагалогенидов кремния и межатомных расстояний в этих молекулах. По этим данным вычислены элементы матриц средних квадратов амплитуд колебаний в координатах симметрии, средние квадраты амплитуд колебаний межатомных расстояний, средние квадра-

(χ_i, χ_j),
(+B_{ij})

2.1966.16



ты параллельных и перпендикулярных амплитуд колебаний связей и средние амплитуды колебаний межатомных расстояний. Все эти величины получены для всех 4 молекул и значений t -ры 0 и 298°K . Исследован эффект сокращения Бастиансена — Морино. Вычислены термодинамич. функции SiCl_4 , SiBr_4 , SiJ_4 в интервале t -р 50 — 2000°K . Приводятся значения главных моментов инерции этих молекул. Часть VII см. реф. 16Б128.
М. Ковнер

SiF_4

Shimanouchi ~~Takashi~~ Takehito, 1966

Nakagawa Ichiro.

J. Molec. Spectrosc., 19, N^o. 78-107.

Аморе' возбудивший CF_4 ; SiH_4
 BF_3 ; CH_4 ; SiH_4 ; NH_3 и PH_3 .

Лин. амор. волн.

SiF₄

1966

4 Б96. Силовые поля для тетрафторидов IV группы и трифторидов V группы. Levin Ira W., Abramowitz Stanley. Force fields for group IV tetrafluorides and group V trifluorides. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 7, 2562—2567 (англ.)

Измерены контуры ИК-полос SiF₄, GeF₄, NF₃, PF₃ и AsF₃. Разности частот Р- и R-ветвей использованы для вычисления постоянных Корнолиса ζ , для к-рых проверено соблюдение правил сумм. Эти постоянные применены к вычислению силовых постоянных. Для такого вычисления построены кривые зависимости постоянных ζ и диагональных силовых постоянных в координатах симметрии от недиагональных силовых постоянных. В случае XF₃ в расчет введены также постоянные центробежного искажения. Приводятся численные значения силовых постоянных всех 5 молекул. М. Ковнер

x. 1967. 4

✕

1966

SiF₄
GeF₄NF₃PF₃AsF₃H.K. Karp.
L.M. Karp.

+ Shuf

Ha morey (b)

Force fields for Group IV tetrafluorides and Group V trifluorides. Ira W. Levin (Natl. Inst. of Arthritis & Metab. Diseases, Natl. Insts. of Health, Bethesda, Md.) and Stanley Abramowitz. *J. Chem. Phys.* 44(17), 2562-7(1966)(Eng). The Coriolis & consts. of the degenerate modes of SiF₄, GeF₄, NF₃, PF₃, and AsF₃ were obtained from ir-band contour measurements. These Coriolis coupling data provided the necessary constraints for detg. unique force fields for the F_2 and E symmetry species of the XF_4 and XF_3 mols., resp. In an attempt to limit the force field for the A_1 species of the XF_3 mols., the rotational distortion consts., which are functions of both the A_1 and E species force consts., were calcd. for a range of values of the F_{12} interaction force const. For the purpose of this calcn., the E species force consts. that were detd. from Coriolis coupling data were held fixed. For NF_3 , a satisfactory value of F_{12} was obtained by using the rotational distortion data. However, the rotational distortion data were not useful in fixing the A_1 species force fields for PF_3 and AsF_3 . RCJQ

C.A. 1966. 64. 11

14987 fg

B

Si F₄

McKean D.C.

1966

M 1523 - IV

curr.
no. cur.

Spectrochim. Acta, 22(2),

269 - 79.

Accurate force constants
from heavy isotopic sub-
stitution.

(curr. BF₃)

Филы 490



SiF₄

Shimanouchi T. et al. 1966

J. Mol. Spectry. 19 (1), 78-107

acc.
not.
11-12
629-1629
629-1629

Force constants of CF₄,
SiF₄, BF₃, CH₄, SiH₄,
NH₃ and PH₃.



(acc. CF₄)

SiF_4

Müller A.,
Fadini A.

1967

Z. Chem., 7, N 3, 115-116.

Сравнение расчетов си-
ловых постоянных BF_4^- ,
 CF_4 , SiF_4 и SiCl_4 .

(см. BF_4^-)

SiF_4

Ruoff A.

1967

Spectrochim. acta, A23, N8,
2421

Смесь жидких
соединений CF_4 , SiF_4 ,
 GeF_4 и SO_2

(см. CF_4) III

SiF_4

1967

Yeranos W. A., Graham
J. D.

ссылка.
поискать.

Spectrochim. acta,
1967, A23, N 3,
● 732-734.

SiF₄

Bp - 52.5 - XII 1968
Brown R.A., Peel J.B.

Austral. J. Chem., 21, n 10,
2361.

см. ност.

(см. SiF₂) III

SiF₄

Bcp - 892 - XIV

1968

Cur. no. 6
✓
6

13053u Force field for silicon tetrafluoride. Levin, Ira W.; Abramowitz, Stanley (Inst. for Basic Stand., Nat. Bur. of Stand., Washington, D.C.). *J. Res. Nat. Bur. Stand., A* 1968, 72(3), 247-9 (Eng). The force field of SiF₄ was detd. by using both Coriolis coupling consts. obtained from an investigation of the band contour of ν_3 at 195°K. and isotopic shifts. The force fields are equally well detd. by using both methods and agree.
RCZM

C.A. 1968. 69.4

SiFy

Medina A.,
Morcillo Y.

1968

Vi

Ar. fis. real soc. esp.
fis. y quim. 1968, 64,
nº 8, 251-261.

(Cv. Cfy) III

SiF₄

(V-12230)

1968

(U8657n) Appearance potentials, ionization potentials, and heats of formation for perfluorosilanes and perfluoroborosilanes. J. D. McDonald, C. H. Williams, J. C. Thompson, and J. L. Margrave (Rice Univ., Houston, Tex.). *Advan. Chem. Ser.* No. 77, 261-6(1968)(Eng). A Bendix time-of-flight mass spectrometer was used to measure appearance potentials and ionization potentials of species contg. Si, B, and fluorine. A mutually consistent set of av. bond energies and thermodynamic properties was derived.

RCBJ

J, ΔH_f

+1

C.A. 1968. 68. 24



Si F₄

Bassett P. F.,
Lloyd A. R.

Chem. Phys. Letters, 3, N1,
22.

(all. CF₄) III

фотосенсор.
сенсор

SiF₄

Pfeiffer M.

1969

J. Molec. Spectrosc.,
31, N2, 181

cell. no. 11.

(Cell. H₂O) III

SiF₄

красн.
(уагу?)

XIV-1119

1970.

Vi

72752f. Infrared and Raman spectra of liquid and crystalline silicon tetrafluoride. Bessette, F.; Cabana, A.; Fournier, R. P.; Savoie, R. (Dep. Chim., Univ. Sherbrooke, Sherbrooke, Que.). *Can. J. Chem.* 1970, 48(3), 410-16 (Eng). The Raman and ir spectra of liq. and cryst. SiF₄ have been recorded. The assignment of some of the Raman bands of the crystal to longitudinal modes has been confirmed by the ir reflection spectrum. These indicate that the crystal structure is not centrosymmetric. In other respects the spectra are also more complicated than is expected on the basis of the previously reported T_d² structure. Possible explanations are discussed. RCCM

C.A. 1970.

72. 14



SiF₄

Brell W. &

1980

et al.

Quarz. Chem., 9 (11),
2474

ортожелез
селез

(W. CF₄) III

SiF₄

ор-ил.
нотену.
эсерни

Freeman D. E.

1970

Z. Naturforsch.

1970, A25, 2, 217.

(ser. CH₄)III

SiF₄

Green J.C. et al.

1970

(7)

Phil. Trans. Roy. Soc. London,
A268 (1984), 111.



(see CCl₄) III

SiF₄

1970

20 Б30. Электронное строение тетраэдрических и октаэдрических фторидов непереходных элементов. Розенберг Е. Л., Дяткина М. Е. «Ж. структурн. химии», 1970, 11, № 2, 323—330

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП в валентном приближении, с пренебрежением только двухатомным дифференциальным перекрыванием, исследовано электронное строение ряда тетраэдрич. и октаэдрич. фторидов непереходных элементов III-го периода: SiF₄, PF₄⁺, SiF₆²⁻, PF₆⁻ и SF₆. Обсуждены последовательность и состав МО и участие различных АО, в частности, 3d — АО непереходных элементов III-го периода в образовании хим. связи.

Е. Л. Розенберг

Эл. строение

(+4)

X. 1970. 20

15

SiF_4

Pullen B.P. 1970.

U.S. At. Energy Comm.,
TDA-25381, 117 pp.

фототэч.
спектр

(сч. CO) III

SiF₄

Wendling E.

1970

Mahmoudi S.

cur. n.

C. r. Acad. Sci., Ser. C

1970, 241(1), 5-8



(cur. CF₄) III

SiF₄

Bassett P. J.
Lloyd A. R.

1971

y

J. Chem. Soc. 1948, A,
in 4, 641-5

(C₆H₆ CCl₄)_{IV}

SiF₄

Clark R.Y.
Rippon D.M.

1941

Vi

Chem. Commun.,
1941, ~ 20, 1295.



(C₆H₅)III

1971

SiFyl

XIV

Dele-Dubois M. L.,
Wallart F.

Vi

C. R. Acad Sci, Ser. B.,

1971, 242, 18, 1059.

Bp-950

(Cer. Si-Kal) III
cccccc.

Si-Hal (chem.)

SiF₄

1974

SiF₄

(105322n) Raman spectra of the chlorofluorosilanes in the gaseous, liquid, and solid state; anomalous chlorine-35, chlorine-37 isotope intensity effects in the splitting of the totally symmetrical silicon-chlorine stretching mode in trichlorofluorosilane and dichlorodifluorosilane. Hamada, K.; Ozin, Geoffrey A.; Robinson, Edward Arthur (Lash Miller Chem. Lab., Univ. Toronto, Toronto, Ont.) *Can. J. Chem.* 1971, 49(3), 477-80 (Eng). The Raman spectra of the chlorofluorosilanes are reported in their various phases together with vibrational assignments of the normal modes. The ³⁵Cl-³⁷Cl isotope lines of the totally sym. SiCl stretching modes in SiCl₃F and SiCl₂F₂ were partially resolved in the solid and liq. phases and their intensities were approx. normal in the liq. state but may show deviations in the solid state. Possible reasons for this behavior are discussed and the results are compared with similar effects observed for CCl₃F and CHCl₃.

RCCM

(see TAKONE)

Si-Hal review

C. A. 1974. 44.20.

III

SiF₄

Hayes W., et al. 1971

cryst
nonconv.

Phys. Rev. Lett., 1971,
24, ~ 12, 794.

● (Ccr. SiH₄)IV

SiF₄

1971

17 Б71. Силовые коэффициенты тетрагалогенидов кремния и колебательные расчеты хлорбромсиланов $\text{SiCl}_n\text{Br}_{4-n}$. Höfler Friedrich. Kraftkonstanten der Siliciumtetrahalogenide und Schwingungsberechnungen an Chlorbromsilanen $\text{SiCl}_n\text{Br}_{4-n}$. «Z. Naturforsch.», 1971, 26 a, № 3, 547—550 (нем.)

Приведены силовые коэф. тетраэдрич. (T_d) молекул SiF_4 , SiCl_4 (I), SiBr_4 (II), SiI_4 , вычисленные в различных вариантах (с использованием частот изотопозамещенных молекул, кориолисовых постоянных, критериев о распределении потенциальной энергии, соотношений между силовыми коэф.). С использованием силовых коэф. I и II вычислены частоты нормальных колебаний молекул хлорбромсиланов SiCl_2Br_2 (III) и SiClBr_3 (IV), SiCl_3Br (V), удовлетворительно воспроизводящие эксперим. частоты нормальных колебаний III—V. Вычислено распределение потенциальной энергии III—V. Линия 161 см^{-1} в спектре КР IV в согласии с расчетом отнесена колебанию ν_6 .
А. П. Александров

Di m.n.

+6

X. 1971. 17

см. также SiCl_4

+4

X

SiF₄

1974

12880y Force constants of silicon tetrahalides and vibrational calculations on chlorobromosilanes $\text{SiCl}_n\text{Br}_{4-n}$. Hoessler, Friedrich (Inst. Anorg. Chem., Tech. Hochsch. Graz, Graz, Austria). *Z. Naturforsch. A* 1971, 26(3), 547-50 (Ger). The force consts. of SiX_4 ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{and I}$) were calcd. by various methods and the fundamentals of SiCl_3Br , SiCl_2Br_2 , and SiClBr_3 derived from the force consts. of SiCl_4 and SiBr_4 . The Raman spectra (He-Ne laser excitation) of SiCl_2Br_2 and SiClBr_3 were examd.

сис.
ноч.



C.A. 1974. 75:2.

SiF₄

Lloyd D.R.
Bassett P.Y.

1971

Y

J. Chem. Soc.,

гоном.
центр

1971, 4, 641.

(Cu. CF₄)III

Si Fy

Wendling Ed.,
Mahmoudi S.

1941

мил.
ност.

Bull. Soc. chim. France,
1941, n 1, 3-12



(Сер. CFy) III

Сер. 142 об.

	Cov. Acc. (m/dyn / A°)				Acc. Cor. (cm - 1)				Sept
	1	2	3	4	v1	v2	v3	v4	
Hy	(60)				800	268	1038	389	
<u>I</u> A	6,353	0,3562			753,4	309,0	1068,0	842,6	7300
<u>II</u> A	6,787	0,1213 0,448			778,6	207,4	1047,7	419,5	5310
<u>III</u> A	5,658	0,4512		-0,1950	816,5	240,3	1020,9	400,3	1290
<u>IV</u> A	5,825	0,1894	0,3774		809,5	297,1	1026,0	361,4	1730
<u>V</u> A	5,839	0,2035	0,1841		808,2	300,0	1026,8	359,1	2010
<u>VII</u>	5,816	0,1099	0,3370	-0,1372					
<u>VI</u> A	5,862	0,5403	0,1616	499,5	499,5	281,7	1032,5	378,4	299
<u>VIII</u>	5,828	0,3823	0,1676	0,0866					

30510.6038

Ch, Ph, TE, MGU

SiF₄

41125

1972

Clark R.J.H. Rippon D.M.

The vapor-phase Raman spectra, Raman band contour analyses, Coriolis constants, and force constants of spherical-top molecules MX₄ (M - group IV element, X = F, Cl, Br, or I). см. прод.

857

859

001

0868

ВИНИТИ

30510.6038

Ch, Ph, TE, MGU

41125

прод .

"J.Mol.Spectrosc.", 1972, 44, N3, 479-503

(англ.)

0868 БИК

857 859

001

ВИНИТИ

1972

SiF₄

Clark, R.G.H., et al;

Adv. Raman Spectr.,

1972, I, 493-6

Дж

Копирование

Норм



(see CF₄; III)

SiF_4

1972

Chemistry
(J)

Hayes William, Brown Theodore G.
"Phys. Nov. A: Gen. Phys"
1972, 6. III, 21-30.

(cat. SiH_4 ; III)

SiF_4 .

Mohan N., 4 gp.

1972

(c.n.)

"J. Mol. Struct.", 1972, 13,
N2, 155-162.

(cm. CH_4 , III)

SiF₄

Ra^o. S.N. et.al. 1972

(c.n.) " Indian J. Pure and Appl. Phys. "
1972, 10, N8, 590-593.

(cm. CCl₄; III)

Si F₄

(Dy, Dy⁺)
u.n.

Ranganathan V. 1972

J. Annamalai Univ part B
1972, 30, 239-46 (eng)

(all CH₄; 10)

SiF₄

оттиски 1531

1973

7 Б87. Новые электронографические данные о длине связи Si—F в SiF₄. Beagley B., Brown D. P., Freeman J. M. The Si—F length in SiF₄. A new electron diffraction study. «J. Mol. Struct.», 1973, 18, № 2, 337—338 (англ.)

геометр.
структ.

Принятое значение длины связи Si—F в SiF₄ равно 1,54—1,55 Å (Tables of Interatomic Distances, Chem. Soc. Spectral. Publ., 1958, 11; 1965, 18). Уточнение этой структуры привело к след. значениям: $r_g(0)$ (Si—F) = $1,555 \pm 0,002$ Å, амплитуда колебания связи Si—F $0,029 \pm 0,007$ Å, параметр ангармоничности колебания $a_{\text{Si—F}} = 21 \pm 33 \text{ Å}^{-1}$; $r(\text{F} \cdots \text{F}) = 2,534 \pm 0,003$ Å (на $0,006 \pm 0,004$ Å

$$r_g(0) = 1,556 \pm 0,002 \text{ Å}$$

2. 1974 N 7



(+1)

SiH_nF_{4-n}

5(10)

(+1)

Евс. Г.

меньше, чем должно быть в тетраэдрич. структуре с указанной длиной связи Si—F), амплитуда колебания связи $F...F=0,071\pm0,003$, параметр ангармоничности $4\pm\pm4$ A^{-1} . Уточненное значение длины связи Si—F дает возможность сопоставить изменение длин связей Si—F в ряду молекул $\text{SiH}_n\text{F}_{4-n}$ ($n=0-3$): $r_0=1,556\pm0,002$ А в SiF_4 , $r_0=1,565\pm0,005$ А в SiHF_3 , $r_0=1,577\pm0,001$ А в SiH_2F_2 и $r_0=1,593\pm0,003$ А в SiH_3F . Такой ход изменений соответствует общей тенденции, наблюдаемой во многих системах, что длина связи А—Х уменьшается по мере присоединения к атому А доп. атомов галогена Х; этот эффект выражен особенно сильно, если галогеном является фтор.

Е. Розенберг

SiF₄ (vaz)

ortuck 1531

1973

Σ Si-F

Σ F-F

Quentron

7997r Silicon-fluorine length in silicon tetrafluoride. New electron diffraction study. Beagley, B.; Brown, D. P.; Freeman, J. M. (Dep. Chem., Univ. Manchester Inst. Sci. Technol., Manchester, Engl.). *J. Mol. Struct.* 1973, 18(2), 337-8 (Eng). The interat. distances measured at 25° are 1.555 ± 0.002 and 2.534 ± 0.003 Å for Si-F and F...F, resp. The vibrational amplitudes (in Å) and the anharmonicity parameters [in (Å)⁻¹], resp., are: Si-F, 0.029 ± 0.007 , 21 ± 33 ; F...F, 0.071 ± 0.003 , 4 ± 4 .

C.A. 1974. 80. N2

Si F₄

Gauprès R,

1973

Sportouch S,

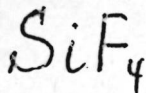
"Adv. Raman Spectrosc. Vol.
1. Proc 3rd Int. Conf., Reims,
1972 + London e.a. 1973, 473-
492 (pp. pub. a.u.u.)

(u.n.)
Vi

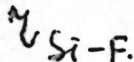
(cu C'S₂; III)

BP-XIV-5140

1973



+ 19346d Interatomic distances and rms (root-mean square) amplitudes of vibration of gaseous silicon tetrafluoride from electron diffraction. Hagen, Kolbjorn; Hedberg, Kenneth (Dep. Chem., Oregon State Univ., Corvallis, Oreg.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(3), 1549-50 (Eng). In gaseous SiF_4 , the interat. distance and the assocd. rms vibrational amplitude (both in Å), resp., are: 1.552, 0.043 for Si-F; 2.534, 0.074 for F...F.



C.A. 1973, 79 v20

SiF₄

[BP-5170-XIV]

1973

4 Б84. Межатомные расстояния и среднеквадратичные амплитуды колебаний газообразного SiF₄ из электронографических данных. Hagen Kolbjørn, Hedenberg Kenneth. Interatomic distances and rms amplitudes of vibration of gaseous SiF₄ from electron diffraction. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 3, 1549—1550 (англ.)

Методом газовой электронографии выполнено повторное исследование структуры молекулы SiF₄. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r , Å) и среднеквадратичных амплитуд колебаний (l , Å): $r(\text{Si}-\text{F}) = 1,552(0,002)$, $l(\text{Si}-\text{F}) = 0,043_4(0,001_8)$, $r(\text{F} \cdots \text{F}) = 2,534(0,003)$, $l(\text{F} \cdots \text{F}) = 0,074_3(0,003_3)$. Отношение

$r(\text{F} \cdots \text{F})/r(\text{Si}-\text{F}) = 1,633$ хорошо согласуется с теор. значением для правильного тетраэдра. В. Спиридонов

молетр.

X1974N4

BP-5170-XIV

SiF₄

1973

32175d Vibrational relaxation of carbon dioxide laser-excited silicon tetrafluoride gas in binary mixtures Hallsworth, R. S.; Isenor, N. R. (Dep. Phys., Univ. Waterloo, Waterloo, Ont.). *Chem. Phys. Lett.* 1973, 22(2), 283-6 (Eng). Vibrational relaxation rates for SiF₄ in binary mixts. with CO₂, CH₄, O₂, N₂, He and Ar were detd. by using CO₂ laser-induced visible fluorescence. A model for the process is discussed.

Kaes.
peane.

C.A. 1974.80 N 6

SiF_4

Ramaswamy, Krichnamae - 1973
hari, et. al.

„Z. Phys. Chem.“ 1973, 253 (3-4)

228-33 (Eng)

(u.n)
naerum

Green's function analysis of the
vibration of some tetrahedral
 XV_4 -type molecules.

(all CH_4 ; III)

C.A. 1974. 80. N2.

40225.1815

Ch, Ph, TE, SIS

SiF_4

41125
Даче ест

1973

1866

Wang J. Ling-Pai Krishnan C.N., Marg-
rave J.L. Emission spectrum of SiF_3 .
"J. Mol. Spectrosc.", 1973, 48, N 2,
346-353

(англ.)

0052 ДМК

036 038

095

ВИНИТИ

ommueu 3905

SiF_4^-

1973

Wang, J. Ling-Fai;
et al.

nonres.
nober xii.

"J. Chem. Phys"

A. P.

1973, 58 (12),

5417-21.

(see. CF_4^- ; III)

40510.1387

38106 02

1974

Ch, MGU, TE

SiF₄ u. k. analizy - 4814

Chaney, C. L., Chin J. The determination
of HF, HCl, SiF₄, and HCF₃ in WF₆ gas.

"Appl. Spectrosc.", 1974, 28, N 2, 139-142

(англ.)

0108

086 089

0100

ВИНИТИ

1974

SiF₄

равнов. геом.
сил. пост
дл. связей

1 Д143. Расчеты полуэмпирическим методом МО соединений Si с F и продуктов их гидролиза. Kleboth K., Rode B. M. Semiempirische MO-Berechnungen an Silicium-Fluor-Verbindungen und ihren Hydrolyseprodukten. «Monatsh. Chem.», 1974, 105, № 4, 815—821 (нем.; рез. англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ППДП/2 исследовано электронное строение SiF₄ (I), SrF₅⁻ (II), SiF₆²⁻ (III), SiF₅OH²⁻ (IV), SiF₅OH₂⁻ (V), OH⁻ (VI). Рассчитаны равновесная геометрия (V оказался нестабильным по отношению к распаду на II и CH₂O), распределения электронной плотности, силовые постоянные валентных колебаний Si—F и Si—O (хорошее качественное, но плохое количеств. согласие с опытом), теплоты реакций: I и II с F⁻ с образованием II и III, II+VI=IV, димеризации II и III+6OH⁻=Si(OH)₆²⁻+6F⁻, на основании чего обсужден механизм реакции гидролиза фторидов кремния. В. Л. Л.

ф. 1975
N1

2 (46) см. на обложке.

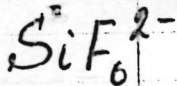
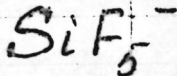
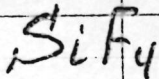
2.1. чертот SiF_5^- ; SiF_6^{2-}
 $\text{SiF}_5\text{OH}^{2-}$ $\text{SiF}_5\text{OH}_2^-$, OH^-

(ΔH) SiF_5^- , SiF_6^{2-} , $\text{SiF}_5\text{OH}^{2-}$

ΔH гини $\downarrow \uparrow$ SiF_5^- , $(\text{SiF}_6^{2-} + 6\text{OH}^- \rightarrow \text{Si}(\text{OH})_6^{2-} + 6\text{F}^-)$

ypa

1974



M.H.J.

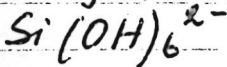
Cud. noc.

Kb. mex. paerf

(+2) ☒

C.A. 1974. 81 w 22

141149q Semiempirical MO calculations on fluorosilicon compounds and their hydrolysis products. Kleboth, K.; Rode, B. M. (Inst. Anorg. Anal. Chem., Univ. Innsbruck, Innsbruck, Austria). *Monatsh. Chem.* 1974, 105(4), 815-21 (Ger). The mol. energies and valence-vibration force consts. for the mols. SiF_4 , SiF_5^- , SiF_6^{2-} , SiF_5OH^2- , and $\text{Si}(\text{OH})_6^{2-}$ were calcd. by using the CNDO/2 method. The mol. energies were used to discuss qual. the energies for reactions such as $\text{SiF}_5^- + \text{F}^- \rightarrow \text{SiF}_6^{2-}$, $\text{SiF}_6^{2-} + 6\text{OH}^- \rightarrow \text{Si}(\text{OH})_6^{2-} + 6\text{F}^-$, and $2\text{SiF}_5^- \rightarrow \text{Si}_2\text{F}_{10}^{2-}$. Some predictions on vibrational frequencies were made for hydrolysis products not yet studied extl. C. S. Brooks



SiF_4

1974

Kuznosof P.M.

memam.
pacem.

Cienc Cult (Sao Paulo)
1974, 26, (9) 875-6

(see H_3CF ; III)

1974

Sif₄

океан
сблн

Maijs L.,
Latv. PSR Minat. Akad. Vestis,
Kin. Ser., 1974, (I), 53-55.

(civ. Nall; III)

SiF₃F

1974

Provitali S. L., Milano I. L.

2, 20, 21

Dev. Internaz. (Milano, 1974,
502), 61-6.

(cur. CH₃F, III)

41127.6770

96601

02

1974

TC, AR, Ch, Ph

SiF₄

* 4-7381

Perry Winfield B., Jolly William L.
Valence electron binding energies of
some silicon compounds from X-ray
photoelectron spectroscopy. "J. Electron
Spectrosc. and Relat. Phenom.", 1974, 4,
N 3, 219-232

(англ.) 024.5 лнк

223 225 - 2 37

ВИНИТИ

50603.1267

Ph, Ch, TC

34457

(сч. 4)
SiF₄

1974

*4-9190

Sanyal Nitish K., Ganguli A.K., Dixit L.
Orbital valency force field constants
and ionicity of M-X bond of tetrahalides
of IV group elements.

"Indian J. Phys.", 1974, 48, N7, 647-650
(англ.)

(сч. CF₄; III)

0378 экз

352

352

370

ВИНИТИ

SiF₄

номер 3187 1975
Baran Enriqe J.

Среднее
суммарн. м.
Колесан.

"Monatsh Chem" 1975
106, N 1, 121-126
(хим. рез. анал.)

(all CH₄; $\overline{nr}$)

SiF₄

annex 3412

1975

Isotani S

"J. Mol. Struct"

1975, 28, N1, 61-76

(over)

annex

51118.6616

96601

1975

Ch, Ph, TC

SiF₄

X 4-10553

Lloyd D. Robert, Roberts Peter J.Photoelectron spectra of halides. VII.

Variable temperature He(I) and He(II)

studies of CF₄, SiF₄ and GeF₄.

"J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.", 1975, 7, N 4, 325-330

(англ.)

(ед. CF₄; III)

464 470

9 5

0503

ГЛАС

ВИНИТИ

SiF₄

Диссертація
пракесу і емігр
В. Матрієв

1975

(Емігр)

C. H. Krishnan.

N.R. and ESR Studies
of reactions involving
matrix isolated species
Houston, Texas, April 1975

50917.3350
Ex-C, Ch, TC

4 0892

1973

3303

Sif₄

Muenter Annabel A., Dyke T.R., Falconer
W.E., Klemperer W.
Molecular beam electric deflection of the
tetrahalides CF_4 , CCl_4 , SiF_4 , SiCl_4 , GeCl_4 ,
 TiF_4 , TiCl_4 , VF_4 , and VCl_4 .

"J.Chem.Phys.", 1975, 63, N 0451-1231-1236
(англ.)

422 424

4 4 2

ВИНИТИ

51202.224

30526

1975

TC, MGU, Ph, Ch

SiF_4^-

X 25-10837

Morton J. R., Preston K. F. Etude R. P. E.
des anions paramagnétiques SnH_4^- et SiF_4^-
"Mol. Phys.", 1975, 30, N 4, 1213-1215
(франц., рез. англ.)

483 486

509 0517 ПК ВИНТИ

50926.9312

Ch, Ph, TC, MGU

(min) 23025 {см. л.
SiF₄ пост}

1975

ХУ-9748

Ramaswamy K., Chandrasekaran V. Force
field studies by parametric representa-
tion method of some XY₄ tetrahedral type
molecules. "Acta phys. pol.", 1975,
A48, N 1, 105-125 (англ.)

(см. СН₄, III)

0457 пик

Bp-6549-XIV

420 431

ВИНИТИ

50210.6623

Ch, Ph, TC, Ex-C

SiF₄

reception 02

1975

**4-8065*

Richardson Jeffery H., Stephenson L.M.,
Brauman John I. Photodetachment of ele-
ctrons from triethylfluorosilyl ions; the
electron affinities of $CF_3^\bullet$ and $SiF_3^\bullet$.
"Chem. Phys. Lett.", 1975, 30, N 1, 17-
20 (англ.)

0298

276 276

0290

ВИНИТИ

50310.1233
Pch. Ch, TC, MGO

92493

SiF_4 (vi)

1975

X4-8264

Shinoda Takako. Intermolecular
potential for silicon tetrafluoride.
"J. Phys. Soc. Jap.", 1975, 38, N1, 224-230
(англ.)

0313 гин

299 299 305

ВИНИТИ

50220.9040

Ex-Ch/XHB-z

SiF₄ 58819 GR 02

Ch, TC

Vi

1975

45-8088

Padma D.K., Vasudeva Murthy A.R.

Thermal decomposition of sulphur hexa-
fluoride. "J. Fluor. Chem.", 1975,

5, N 2, 181-184 (англ.)

0300 пик

285 288 0 2 9 2

ВИНИТИ

Si Fy

1976

(cum. noem.
Si)

Armstrong Robert S.

J. Chem. Soc Faraday
Trans 2, 1976, 72(1)
11-21 (eng)

(cu CH₄; III)

Si F4

1976

Bokli'g Heinz

(circ. 100%)

Z. Chem. 1976, 16, N11,
430-5



(all: M_2O ; III)

SiF_4

1976

4 Б235. Спектр комбинационного рассеяния света SiF_4 . Молекулярные вращения, кориолисово взаимодействие, диполь-дипольное взаимодействие в жидкости. Gilbert M., Nectoux P., Drifford M. The Raman spectrum of SiF_4 : molecular rotations, coriolis coupling, transition dipole-transition dipole interaction in the liquid. «Proc. 5th Int. Conf. Raman Spectrosc., Freiburg, 1976». Freiburg — Breisgau, 1976, 363 (англ.)

Измерены изменения спектра КР жидкого SiF_4 в т-рном интервале 183—240° К. При повышении т-ры наблюдается уменьшение ширины линии от 3,2 до 2,3 см^{-1} . Ширина симметричной по профилю линии ν_2 меняется от 16,4 см^{-1} при 197° К до 28 см^{-1} при 240° К. Асим-

спектр
к.р.

Х. 1977, N4

метричный профиль линий ν_3 и ν_4 сохраняется и при переходе к тв. кубич. фазе. Асимметрию профиля объясняют сильным диполь-дипольным взаимодействием, связанным с необычно высокой ИК-активностью этих линий. Разность между продольной и поперечной оптич. частотами, вычисленная на основе данных по интегральной ИК-интенсивности линий для газовой фазы SiF_4 , находится в хорошем согласии с асимметрией линий, наблюдающейся в спектрах КР для жидкой фазы. Наблюдающиеся профили линий ν_3 и ν_4 обсуждаются также на основе модели молек. вращений и беспорядка в жидкости.

С. Н. Мурзин

61123.3604

96201

1976

Ch, Ph, Ex-C, TC

SiF₄

* 4-15654

Lazzarotti P., Zanasi R. Calculations of vertical ionization potentials of CF₄ and SiF₄ by the Green-function method. "Chem. Phys. Lett.", 1976, 42, N 3, 411-414 (англ.)

(см. CF₄; III) 0758 ннк

714 716 750

ВИНИТИ

SiF₄

ВФ - XIV - 7401

1976

Лодиков. Е.А. и др.

Опытка и спектроскопия,
1976, 40, №4, 758-60.

(разреш
колеб.-вр,
спектров)

(all CH₄) IV

60401.7530
Ex-AR/KP-z,
TC, MGU

40825
SiF₄

1976
3978.

Lyman John L., Rockwood Stephen D.
Enrichment of boron, carbon, and silicon
isotopes by multiple-photon absorption of
10.6- μ m laser radiation. "J. Appl. Phys."
1976, 47, N. 2, 595-601 (англ.)

0584 жжж

568 568

576

ВИНИТИ

70317.1538

34469

1976

Pn, TC

SiF₄

* 15-17394

Pandey A.N., Sharma D.K., Verma U.P.,
Arora L.D., Gupta S.L., Singh B.P.
Study of molecular force fields by a new
approximation method. "Indian J. Pure
and Appl. Phys.", 1976, 14, N 10, 815-818
(англ.)

0832 пнк

793 793

823

ВИНИТИ

SiF₄

1976

Pandey A. N., Sharma
D. K., Kumar V.

Chem.
Notes.

Indian J. Phys., 1976,
50, N10, 871-75.

(see ● CF₄; III)

70211.7225
Ch, Ph, TC, Ex-

C

SiF₄ 40892

1976

X 4-16664

Ozier I., Lee S.S., Ramsey N.F.

Rotational magnetic moment spectra
of a series of tetrahedral molecules.

"J.Chem.Phys.", 1976, 65, N 10, 3985-3993

(англ.)

с.ч. G.Hy' III

761 770 8 03 0811 фек ВИННИТИ

61101.4320

Ch, TC

29848

1976

(сер) SiF₄ x 8-14855

к р. N 61101.4319

Symons Martyn C.R. Unstable inter-
mediates. Part 167. Electron spin reso-
nance studies of trifluorosilyl and re-
lated radicals. "J.Chem.Soc.Dalton
Trans.", 1976, N 16, 1568-1574
(англ.)

713 716 7 25

0733 пнк ВИНИТИ

1974

SiF_4

Александров С. С., изв.

лазер-
-возб.
спектр.

Кисельов В. В. Эксперим.

и теор. раз., 1974, 25(12)
582-5

(см. SF_6 ; III)

SiF_4

4-18897

1977

Girijavallabhan C.P. et al.

J. Mol. Spectrosc., 1977,

65, 11, 142-146.

Chem. Rev.

(Chem. B $\bar{F}_2$; III)

SiF₄

Lonum 53151

1977

Fontal B., et al.

(Раман-спектр
полюризаци.)

Spectrochim. Acta, 1977,
33A, 507-15.

SiT4

[* 18-18897]

1977

*18-18872

Girijavallabhan C.P., Ed.

(anal. nov.)

J. Mol. Spectrosc. 1977,
65, 142-6

SiF₄

49-18027

1977

9 Д222. Ширины линий в колебательно-вращательном спектре двухатомных молекул, возмущенных тетраэдрическими молекулами. Ishard P., Boulet C., Robert D., Galatry L. Line-widths in the vibration rotation spectra of diatomic molecules perturbed by tetrahedral molecules. «Mol. Phys.», 1977, 33, № 1, 259—280 (англ.)

Колеб.-
- вращат.
спектр

В рамках теории Андерсона и др. развита методика расчета уширения спектральных линий двухатомных молекул при соударениях с тетраэдрич. молекулами в том случае, когда вращательная постоянная последнего много меньше вращательной постоянной двухатомной молекулы. Используется классич. описание вращательного движения возмущающей молекулы. Сравнение рассчитанных таким образом ширины линий с экспериментальными данными для вращательной структуры поло-

зклад:

Ф 1977 № 9

сы 0—1 молекулы HCl в смеси с CF₄ и полос 0—1, 0—2 HCl в смеси с SiF₄ показывает хорошее согласие для тех значений вращательных квантовых чисел, при которых справедлива процедура обрезания интегрирования по прицельному параметру в теории Андерсона. Для уширения молекулами SiF₄ наименьшие расхождения соответствуют значению октупольного момента SiF₄, равному $(3 \pm 0,3) \cdot 10^{-47}$ кг·м³. Показано также, что расчет в приближении, когда тетраэдрич. молекула рассматривается как ассиметрированный атом, даст заниженные примерно на 30% ширины линий. Отмечается существенное значение мультипольных эффектов в рассмотренном случае, а также частичное подавление зависимости уширения от колебательных квантовых чисел вследствие ориентационной зависимости мультипольных взаимодействий в отличие от случая уширения однократным газом. Библ. 29. Р. Мухтаров

SiF_4

номер 5474

1977

промоутир. карт

87:143788v The valence electron spectrum of silicon fluoride. Jadrny, R.; Karlsson, L.; Mattsson, L.; Siegbahn, K. (Inst. Phys., Uppsala Univ., Uppsala, Swed.). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 49(2), 203-6 (Eng). The He I induced valence electron spectrum of SiF_4 is presented and the energies of the bands are reported. The spectrum reveals vibrational structure in 3 of the 4 accessible electron bands. Only the band at 19.5 eV has been reported previously to exhibit vibrational progressions.

C. A. 1977, 87 N18

SiF₄

GeF₄

SiCl₄

SiBr₄

GeBr₄

SnBr₄

(Mun)

#45-18835

1977

86: 163085w The use of isotopic substitution and matrix isolation techniques in determining molecular constants for group IV A tetrahalides. Koeniger, F.; Mueller, A. Orville-Thomas, W. J. (Inst. Chem., Dortmund Univ., Dortmund Ger.). *J. Mol. Struct.* 1977, 37(2), 199-227 (Eng). Improved values of mol. consts. of Group IVA tetrahalides are reported. Accurate frequencies, including those of different isotopically substituted species, were detd. by using matrix isolation spectroscopy in conjunction with isotope techniques (for SiF₄, GeF₄, SiCl₄, Si³⁵Cl₄, SiBr₄, GeBr₄, ^{70/76}GeBr₄, SnBr₄, ¹¹⁶SnBr₄ and GeBr₄, ⁷⁴GeBr₄, SnBr₄, ¹¹⁶SnBr₄, and ¹²⁴SnBr₄). Band contour analyses, often rendered difficult by isotopic effects and hot-band progressions, were simplified by measuring the spectra of isotopically pure compds. (e.g. ⁷⁴GeF₄, ¹¹⁶Sn³⁵Cl₄) and by measurements at lower temps. (SiF₄). The isotopic shifts, Coriolis coupling and force const. values detd. in this study are more accurate than those previously reported for some of the mols. In addn. to the presentation of new data, the known spectral information concerning the other tetrahalides of Si, Ge, and Sn are reviewed.

C.A. 1977, 86 N22 (45) 18

SiF₄

mmuck 5455

1977

GeF₄

RuO₄

MIN.

87:13779g Molecular constants of silicon tetrafluoride, germanium tetrafluoride, and ruthenium tetroxide. An improvement of the analysis of the IR-band contours of $\nu_3(F_2)$ by low temperature measurements and by using isotopically pure compounds. Koeniger, F.; Mueller, A. (Inst. Chem., Univ. Dortmund, Dortmund, Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1977, 65(3), 339-44 (Eng). The IR-band contour of $\nu_3(F_2)$ of gaseous SiF₄, GeF₄, and RuO₄ were analyzed by making use of isotope substitution techniques, low temp. measurements, and matrix isolation spectroscopy. In the case of RuO₄, values for the hot band progression $\nu_3 + n\nu_4 - n\nu_4$ ($X_{34} = -1.1 \pm 0.1$ cm⁻¹ for ⁹⁹RuO₄ and ¹⁰⁴RuO₄) were obtained and F_2 block force consts. were calcd. by using isotope shifts $\Delta\omega_3$ and ζ_3 consts. as addnl. data.

(42) X

C. A. 1977 87 n2

SiF₄

GeF₄

RuO₄

(и.п.)

1977

24 Б226. Молекулярные постоянные ~~SiF₄~~, GeF₄ и RuO₄. Улучшение анализа контуров ИК-полос $\nu_3(\text{F}_2)$ с помощью низкотемпературных измерений и в результате использования изотопически чистых соединений Königer F., Müller A. Molecular constants of SiF₄, GeF₄, and RuO₄. An improvement of the analysis of the IR-band contours of $\nu_3(\text{F}_2)$ by low temperature measurements and by using isotopically pure compounds «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 65, № 3, 339—344 (англ.)

Исследованы контуры полос колебаний $\nu_3(\text{F}_2)$ газообразных SiF₄, GeF₄ и RuO₄. Проведение исследований при различных т-рах (SiF₄), получение спектров при матричной изоляции (RuO₄) и изучение спектров изотопически чистых соединений (Ru¹⁰⁴O₄, Ru⁹⁹O₄ и Ge⁷⁴F₄) позволило получить более достоверные значения постоянных кориолисова взаимодействия ξ . В случае

№ 1977 N 24

(+2) 18

RuO_4 , на основе анализа прогрессии «горячих» полос $\nu_3 + n\nu_4 - n\nu_4$ определены значения силовых постоянных блока F_2 матрицы силовых постоянных. При этом учитывались изотопич. сдвиги полос и кориолисовы постоянные.

А. В. Бобров

SiF_4

1978

1 Д338. Спектр валентных электронов SiF_4 . Ladri-
ny R., Karlsson L., Mattsson L., Siegbahn K.
The valence electron spectrum of SiF_4 . «Chem. Phys.
Lett.», 1977, 49, № 2, 203—206 (англ.)

Получен HeI-фотоэлектронный спектр молекулы SiF_4 .
Три из наблюдавшихся четырех электронных полос
спектра показывают колебательную структуру: Ранее
колебательная структура наблюдалась лишь в одной
(19,5 эв) полосе. Все полосы спектра за исключением
этой полосы колебательной структуры в области 19,5 эв

сдвинуты на 50 мэв по отношению к их положению
в ранее полученных спектрах.

В. С. Иванов

фотоэлектронный
спектр

4. 1978 N 1

SiF₄

1974

1 Б116. Спектр валентных электронов SiF₄.
Ladruny, R., Karlsson L., Mattsson L., Steg-
bahn K. The valence electron spectrum of SiF₄. «Chem.
Phys. Lett.», 1977, 49, № 2, 203—206 (англ.)

Исследован фотоэлектронный спектр SiF₄, возбужда-
емый источником He-I. В спектре наблюдались полосы
16,40, 17,53, ~18,0 и 19,5 эв, связанные с ионизацией
соотв. $1t_1$, $3t_2$, $1e$ и $2t_2$ орбиталей. В случае полос $1e$
и $2t_2$ наблюдалась развитая колебательная структура
[полоса $1e$ — прогрессия $n\nu_1$, $n=0-4$, $\Delta\nu \simeq 85$ мэв, по-
лоса $2t_2$ — прогрессии $n\nu_1$, $n=0-5$ и $n\nu_1 + \nu_4$, $n=0-5$,
 $\Delta\nu = 87$ мэв — $\nu_1(a_1)$ и $\Delta\nu = 46$ мэв — $\nu_4(t_2)$]. Плечо при
16,6 эв в полосе $1t_1$ объясняется эффектом Яна—Телле-
ра, а слабая колебательная структура с интервалом
 $\Delta\nu = 30$ мэв предположительно связана с колебанием
 $\nu_2(e)$.

В. М. Ковба

(ν_1)

ж. 1978 № 1

1977

SiF₄

Mishra K.C. et al.

Indian J. Pure Appl.
Phys. 1977, 15(10), 400-4.

coll.
nos. 11.

coll. CH₄ - III

70422.7520
MGU, TC, Ph, Ch

30526GR

SiF₄

1977

X-4-18026

Piollet-Mariel E., Boulet C., Levy A.

Broadening and shifting of HCl vibration-rotation lines by silicon tetrafluoride.

"Mol. Phys.", 1977, 33, N 1, 255-258

(англ.)

0859 ББК

813 816 850

ВИНИТИ

Si F₄

U* - 18902

1977

Вамосову К et al.

средне-кв.
амплит.
колебан.

Acta phys. pol. 1977,
A51, N5, 777-781 (англ).

(см. ст. 4 ; II)

SiF_4

1974

Santhakumari B., et al

Chem. Notes. "Acta phys. polon.",
1974, 1751, N3, 447-49.



(see - CF_4 ; IV)

SiF₄

1977

Thirugnanasambandam P.
et al.

номы. и
сст. ност.

Indian J. Phys.,
1977, 1351(5) 342-56



(сст. CF₄ и др.)

SiF_4

Commun 7381 [1978]

de Alti G., et al.

(7)

kb. corr.
factor

Chem. Phys., 1978,

35, 283-92

E

SiF₄

Comm. 8416

1 1978

обзор,

хим.

Расселл
Кенни

Asundi R.K., et al.

Indian J. Pure and Appl.

Phys., 1978, 16, p.142-150.

SiF_4

Falconer W. E.

1978

Isr. J. Chem., 1978, 14 (1-2), 31-6.

модель.

структ.



(см. XeF_4) 1.1

Si F₄

1978

Gimarc, B.M. et al.

J. Am. Chem. Soc., 1978, 100(8),
2340-5.

расчет
дел. структуры

см. ClF₄⁺ - III

SiF₄

оттиск 6503

1978

22 Б62. Молекулярные постоянные некоторых молекул тетрагалогенидов элементов группы IV A. Sagar P. C., Singh G. C., Choudhury Km. S. Roy. Molecular constants of some tetrahalide molecules of Group IV A. «Acta phys. pol.», 1978, A53, № 6, 895—904 (англ.)

Рассчитаны значения валентных силовых постоянных, среднеквадратичных амплитуд колебаний и кориолисовых постоянных для молекул CF₄, SiF₄, CCl₄, SiCl₄, GeCl₄, SnCl₄, SiBr₄, GeBr₄, SnBr₄, SiI₄, GeI₄, SnI₄. Вычисления проведены методом кинетич. постоянных с использованием эксперим. частот колебаний. Результаты сопоставлены с традиц. расчетами. методами орбитального валентно-силового поля и силового поля Юри—Бредли. Отмечено удовлетворительное согласие между результатами расчетов всеми тремя способами. Анализ рассчитанных величин позволяет сформулировать след. выводы. Для систем с одинаковыми центральными атомами кинетич. постоянные и среднеквадратичные амплитуды возрастают при увеличении массы атомов-лигандов, в то время как валентные силовые постоянные изменяются в противоположном направлении. Зависи-

и. и.

С. С. М. И. С.

6556-111-951

(+10) ☒

2198, 122

мость кориолисовых постоянных от отношения масс центрального атома и лиганда описывается монотонно убывающей функцией. Выписаны соотношения, связывающие кинетич. постоянные, валентные силовые постоянные и среднеквадратичные амплитуды колебаний для разных типов взаимодействий. А. В. Немухин

SiF₄

Оттиски 6503

1978

12 Д227. Молекулярные константы некоторых молекул тетрагалонидов группы IVA. Sarkar P. C., Singh G. C., Choudhury Km. S. Roy. Molecular constants of some tetrahalide molecules of Group IVA. «Acta phys. pol.», 1978, A53, № 6, 895—904 (англ.)

Вычислены гармонич. силовые постоянные и постоянные Кориолиса колебаний типа F_2 и проведено сравнение с соответствующими результатами моделей валентно-силового поля и потенциала Юри — Бредли для молекул (CF₄), SiF₄, CCl₄, SiCl₄, GeCl₄, SnCl₄, SiBr₄, GeBr₄, SnBr₄, SiI₄, GeI₄ и SnI₄. Вычислены также среднеквадратичные амплитуды колебаний для этих молекул.
Р. Мухтаров

М. П.

7596-111-068
ВР-ХИ-9554

(410) X

ор. 1978, N12

Si F₄

[summary 8912] 1949

Arnold J. H., et al.

J. Mol. Spectrosc.

1949, 792, 267-76.

св. лоси.
Si
кв. св. лоси.
последи.

св. SO₂ - III

SiF_4

1979
Гузиков А.Ф., и др.

электр.
отражение

Жока. АН УССР,
1979, 5 (6), 432-33.

(см. SiH_4 ; III)

SiF₄

1979

5 Д61. Таблицы унитарной группы с нарушенной симметрией, странствующие ядерные спины и спонтанное нарушение молекулярной симметрии. Broken unitary tableaux, itinerant nuclear spins, and spontaneous molecular symmetry collapse. Harter William G., Patterson Chris W. «Lect. Notes Chem.», 1981, 22: Unitary Group Eval. Electron. Energy Matrix Elem.: Unitary Group Workshop, 1979, 306—331 (англ.)

В рамках формализма унитарной и симметрич. групп рассмотрена кластерная структура колебательно-вращательных спектров молекул типа XY_n и влияние на нее тонких и сверхтонких взаимодействий. Обсуждена взаимосвязь между уровнями жесткой и нежесткой молекул XY_n, в которых допускается свободное вращение n ядер, обладающих спином 1/2. Полученные результаты представляют интерес для интерпретации спектров высокого разрешения молекул SiF₄, CF₄, OsO₄ и SF₆. В качестве примера рассмотрено расщепление уровня $J=88$ для молекулы SF₆.

А. И. Дементьев

Кластерн.
структ.

43

ор. 1983, 18, 45

Si Fy

1949

Hartmann E.

Ec, m.n.

Chem. Phys. Lett. 1949,
6 2, N 1, 145-48.

coll. Si Hy - III

SiF₄

*спектр
насыщен.*

1049
24 6255. Некоторые детали спектра насыщенного поглощения излучения CO₂-лазера молекулой SiF₄. Иванов Э. И., Крылов И. Р. «Оптика и спектроскопия», 1979, 46, № 6, 1214—1215

Повторно измерен спектр насыщ. поглощения тетрафторида кремния в области полосы генерации 9,4 мкм CO₂-лазера. На линиях P(30), P(32), P(34), P(36) зарегистрирован ряд узких резонансов, нек-рые из к-рых наблюдались впервые. Результаты измерений межрезонансных интервалов хорошо согласуются с лит. данными, но положение резонансов относительно центров линий генерации CO₂-лазера отличается. Провести идентификацию линий путем сопоставления эксперим. и рассчитанного ранее спектров насыщ. поглощения не удалось ввиду того, что исследуемые участки спектра малы по ширине. В. М. Ковба

2-1579/24

Si F₄

1979

Онофко Д.Е., et al.

кб. мех.
разреш.

Терр. Эксп. Хим. 1979,
15(5), 559-63.

coll. CF₄ - III

SiF₄

ommuch 8837

1979

Tossell J. A.

facere
gn. ev. yu

Chem. Phys. Lett.,
1979, 64(2,3), 359-64

Si F₄

1980

Akulov V. M., et al.

Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1980,
79(6), 2104-18.

высокие
качества.
уровня



сир. S Fe -15

SiF_4

Commuch 11229 | 1980.

El - Issa B.D., et al.

кв. мех.
факт,
д.л. струн.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. II, 1980, 76
1375-80.

$(\text{Cu CF}_4)_{\text{III}}$

SiF_4

1980

6 Д326. Перекрывающиеся переходы из остова в валентные и ридберговские состояния и резонансы в рентгеновских и УФ-спектрах SiF_4 . Overlapping core to valence and core to Rydberg transitions and resonances in the XUV spectra of SiF_4 . Friedrich H., Pittel B., Rabe P., Schwarz W. H. E., Sonntag B. «J. Phys.», 1980, B13, № 1, 25—30 (англ.)

В области 100—170 эв исследованы спектры поглощения газообразного и твердого SiF_4 . Результаты сравнены с данными, полученными при теоретич. и эксперим. исследованиях аналогичных молекул SF_6 , PF_4^+ , ClF_6^+ и с расчетами энергетич. спектра SiF_4 , выполненными методом самосогласованного поля. Исследованные спектры связаны с переходами с $2p$ -уровней Si. Дана идентификация конечных состояний, во многом отличающаяся от развивавшейся в литературе. Отмечено перекрывание переходов, связанных с молекулярными орбиталями и с ридберговскими состояниями. Библ. 20.
В. Х.

спектр
поглощения

Ф 1980 № 6

1980

 SiF_4

12 В125. Перекрывающиеся переходы из остова в валентные и ридберговы состояния и резонансы в рентгеновском УФ-спектре SiF_4 . Friedrich H., Pittel B., Rabe P., Schwarz W. H. E., Sonntag B. Overlapping core to valence and core to Rydberg transitions and resonances in the XUV spectra of SiF_4 . «J. Phys.», 1980, В13, № 1, 25—30. (англ.)

С использованием синхротронного источника возбуждения проведены измерения рентгеновского $\text{Si } 2p$ -спектра поглощения в молек. и тв. SiF_4 . Структуры спектров интерпретированы в рамках модели « $Z+1$ ». Эта модель опробована на примере молекулы SF_6 , спектр поглощения к-рой интерпретирован на основе расчета энергетич. спектра иона ClF_6^+ методом ССП МО ЛКАО с использованием базиса сгруппированных гауссовых sp -орбиталей. Для отнесения структур $2p$ -спектра поглощения в SiF_4 в рамках той же модели в том же

спектр
поглощ.

ж. 1980, № 12

базисе с добавлением поляризац. d -АО Р рассчитан спектр МО иона PF_4^+ . Относит. энергии виртуальных МО PF_4^+ хорошо согласуются с положениями эксперим. пиков в спектре SiF_4 . Сопоставление теор. и эксперим. спектров указывает на сильное перекрывание переходов из $2p$ -орбитали Si в валентное и ридберговы состояния, что свидетельствует об условности прежней интерпретации $2p$ -спектра поглощения в SiF_4 . Пики выше порога L-ионизации в SiF_4 отнесены к переходам из Si $2p$ -состояния в резонансные состояния непрерывного спектра симметрии e и t_2 . И. А. Тополь

SiF_4

[ommuch 11184] 1980.

Ohwada K.

cul. nos.

J. Chem. Phys., 1980,

73, 5459-63

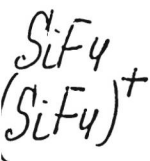


(cu CH₄)III.

SiF₄ [common 10034] 1980

Tripathy M, et al.

(curr. not.) Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1980,
18, 305-306



[Omonuck 12784]

1981

Gliderwell C., et al.

J. Mol. Struct. 1981,

85, 87-98.

молек.
геометрия

SiF_4

Отмисек 11950

1981

3 Д425. Совпадения линий генерации CO_2 -лазера и полосы ν_3 молекул SiF_4 в области 9,7 мк. CO_2 laser coincidences with ν_3 of SiF_4 near 9.7 μm . McDowell Robin S., Patterson Chris W., Nereson Norris G., Petersen F. R., Wells J. S. «Opt. Lett.», 1981, 6, № 9, 422—424 (англ.)

Получены ИК-спектры ($1038\text{—}1023\text{ см}^{-1}$) газообразных молекул $^{28}\text{SiF}_4$ (I) на фоне излучения перестраиваемого по частоте $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ -лазера при T -ре 170—200 К. Идентифицированы 126 компонент вращательной структуры колебания ν_3 I, соответствующие переходам P (13—59), Q (20—53) и R (5—56) I. Предположено, что полосы «горячих» переходов в спектре I отсутствуют. Определены спектроскопич.-постоянные компонент полосы ν_3 I, совпадающей по частоте с линиями излучения CO_2 -лазера на изотопически обогащенном (^{13}C ,

спектр,
м.п.

Ф. 1982, 18, №3

^{18}O) газе с точностью ± 200 МГц. Показано, что наименьший частотный интервал наблюдается для компоненты R (53) молекул I и линии излучения $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ P (30), равный 1,391 МГц. Детально обсуждены перспективы лазерного разделения изотопов в молекулах I .
Библ. 17. И. В. А.



SiF₄

опр. спектр 12473

1981

Witschel W., et al.

копропр. J. Quant. Spectrosc.
но пр. Radiat. Transfer
(парей). 1981, 25, 463.-470.

SiF₄

Commuc 12487 | 1981

Varav G., et al.

nomeriz.

krutid

chemiz

stomizid.

Chem. Phys. Lett.,

1982, 83 (3), 493-97.



SiF₄

[Cummuck 14954]

1982

cu. noem.
paerem.

Bartell L. S. B.,

Z. Mol. Struct., 1982,
84, N1-2, 117-128.

SiFy.

1982

Beiri Gerhard, Asbrink
Leif, et al.

M. N., J. Electron Spectrosc.
and Relat. Phenom.
1982, 27,  N2, 129-178.
(cur. H2 S; III)

SiF_4

Dmmuck 14974

1982

Алктрон.

гиперак-

ция, асиммет-

туды коле-

баний.

Goates S.R., Bartell

L.S.,

J. Chem. Phys., 1982,

77, N4, 1866-1873.

SiF_4

Ummuck 14975

1982

Электрон.
гиперрак-
ция воз-
м. вол-д;
структура

Goates S.R., Bartell
L.S.,
J. Chem. Phys., 1982,
77, N4, 1874-1877.

SiF₄

1982

Hanschmann G.

м.п.,

Isotopenpraxis, 1982,

см. пост.

18, N 6, 203-204.

( см. SiH₄ ; III)

Si Fy

1982

Hohenstein Helmut.

Diss. Doktorgrad, Natur-
Wiss. Fak. Friedrich-Alex-
ander-Universität Erlan-
gen-Nürnberg, 1982, 105 S.,
ill.

u. h.

(ver. C Fy ; III)

SiF₄

1982

Ismail Zakya Kafafi,
Fredin Leif, et al.

Vi, chem.
носив.

J. Chem. Phys.; 1982,
77, N4, 1626-1631.

(chem. HSiF; II)

SiF₄

QCC. 15834

1982

7 B294. Инфракрасный спектр и постоянные потенциальной энергии тетрафторида кремния. Infrared spectrum and potential constants of silicon tetrafluoride. McDowell Robin S., Reisfeld Martin J., Patterson Chris W., Krohn Burton J., Vasquez Mariena C., Laguna Glenn A. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 9, 4337—4343 (англ.)

$\nu_i, M.N;$

С субдอปлеровским разрешением с использованием перестраиваемого диодного лазера измерен спектр молекулы ²⁸SiF₄ в области основной полосы ν_4 . Проведен анализ вращательной структуры полосы и рассчитаны спектроскопич. параметры выражений для P-, Q- и R-ветвей в полосе ν_4 для сферич. волчка SiF₄ (см⁻¹): $m=388,44482(14)$, $n=288677(6)$, $p=1,5136(24)$, $v=2,023(3)$, $q=-2,40(5)$, $q=-1,997(8) \times 10^{-5}$, $h=-7,1(3) \times 10^{-8}$, $k=4,5(7) \times 10^{-10}$. Определены след. молек. постоянные для состояния ν_4 (см⁻¹): $B'-B_0=1,6829(22) \times 10^{-4}$, $B'=0,13693(3)$, $Z_s=0,510(3) \times 10^{-4}$, $B\zeta=-0,00751(2)$, $\zeta=-0,0549(6)$. Полученное значение постоянной кориолисова взаимодействия ζ_4 в сочетании

X. 1983, 19, № 7

со значением ζ_3 хорошо удовлетворяет (в пределах 4,5%) правилу сумм ζ . С помощью фурье-спектрометра с разрешением $0,04 \text{ см}^{-1}$ измерены ИК-спектры SiF_4 и определены начала 12 обертоновых и составных полос. Из полученных данных рассчитаны постоянные ангармоничности и гармонич. частоты SiF_4 , а также изотопич. сдвиги по кремнию с учетом ангармоничности. По значениям постоянных кориолисова взаимодействия и изотопич. сдвигам в полосе ν_3 рассчитано силовое поле в SiF_4 (мдн/А): $F_{11}=7,292 (22)$, $F_{22}=0,266 (6)$, $F_{33}=6,374 (16)$, $F_{44}=0,4447 (22)$, $F_{34}=0,204 (2)$. По рассчитанным собств. векторам и постоянным матрицы потенциальной энергии блока F_2 вычислены амплитуды колебаний при 0 и 300 К и отмечено их хорошее согласие с эксперим. значениями.

С. Б. Осип

SiF_4

Ом. 15834

1982

5 Д361. ИК-спектр и параметры потенциала четырехфтористого кремния. Infrared spectrum and potential constants of silicon tetrafluoride. McDowell Robin S., Reisfeld Martin J., Patterson Chris W., Krohn Burton J., Vasquez Mariana C., Laguna Glenn A. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 9, 4337—4343 (англ.)

Si, м.п.

Исследован ИК-спектр газообразного четырехфтористого кремния при $t \approx 300 \text{ K}$ в диапазоне давл. 0,3—11 мм рт. ст. Измерения велись в области полосы $\nu_4 \text{SiF}_4$ с помощью спектрометра, включающего лазер с изменяемой частотой излучения; разрешение ограничивалось доплеровской шириной линий. По значениям частот 126 линий, расположенных на участке 379,3—404,5 см^{-1} , методом наименьших квадратов определены константы полосы $\nu_4 \text{SiF}_4$. Для сравнения приведены полученные ранее аналогичные константы для

Ф. 1983, 18, № 5

полосы $\nu_3\text{SiF}_4$. Отмечено, что сумма констант кориолисова взаимодействия для полос ν_3 и ν_4 равна 0,479, т. е. менее чем на 5% отличается от значения 0,5, получаемого в гармонич. приближении. Дополнительно с помощью фурье-спектрометра с разрешением $0,04\text{ см}^{-1}$ определены положения 12 составных полос и полос обертонов указанной молекулы, позволившие найти значения гармонич. частот и постоянных ангармоничности для основных колебаний. Полученные значения молекулярных постоянных позволили вычислить квадратичное силовое поле молекулы четырехфтористого кремния. Библ. 55. Н. Филиппов

SiF_4

Омниск 13583

1982

14 Б235. Исследование полосы $\nu_3 \text{SiF}_4$ около 9,7 мкм с помощью перестраиваемого полупроводникового лазера. Patterson C. W., McDowell R. S., Nergeson N. G., Krohn B. J., Wells J. S., Petersen F. R. Tunable laser diode study of the ν_3 band of SiF_4 near 9,7 μm . «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 2, 416—423 (англ.).

$\nu_i, \text{д.н.}$;

С разрешением, ограниченным доплеровским уширением, измерена вращательная структура полосы ν_3 $^{28}\text{SiF}_4$ в области 1023—1038 см^{-1} с помощью перестраиваемого полупроводникового лазера. Приведены волновые числа наблюдаемых переходов, их отнесение, значения молек. постоянных и дипольного момента перехода для четырех колебательно-вращательных линий.

В. М. Ковба

Х. 1982, 19, N14.

SiF_4

Оригинал 13583

1982

8 Д501. Исследование полосы $\nu_3 \text{SiF}_4$ в области 9,7 мкм с помощью перестраиваемого диодного лазера. Tunable laser diode study of the ν_3 band of SiF_4 near 9.7 μm . Patterson C. W., McDowell R. S., Nereson N. G., Krohn B. J., Wells J. S., Petersen F. R. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 2, 416—423 (англ.)

Vi, M. A.

С помощью перестраиваемого диодного лазера на $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ получены спектры высокого разрешения газообразного $^{28}\text{SiF}_4$ в области полосы валентного колебания ν_3 (1023—1038 cm^{-1}). Точность определения частот колебательно-вращательных линий оценена как $\pm 0,001 \text{ cm}^{-1}$; для подавления структуры горячих переходов т-ра образца составляла 170—200 К. Выполнено отнесение 215 линий, соответствующих переходам $R(60) \rightarrow P(60)$; показано хорошее согласие экспериментальных и расчетных значений частот. По измерениям интенсивности при 296 К для линий $R(18) \rightarrow R(20)$ найдены величины дипольных моментов соответствующих переходов. Библ. 34. С. Ф. Б.

Ф. 1982, 18, N8

SiF₄

Ommler 13523 1982

96: 94211b Tunable laser diode study of the ν_3 band of silicon tetrafluoride near $9.7 \mu\text{m}$. Patterson, C. W.; McDowell, R. S.; Nereson, N. G.; Krohn, B. J.; Wells, J. S.; Petersen, F. R. (Los Alamos Natl. Lab., Univ. California, Los Alamos, NM 87545 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 91(2), 416-23 (Eng). Doppler-limited tunable-diode laser spectra of the stretching fundamental ν_3 of $^{28}\text{SiF}_4$ near 1031 cm^{-1} were analyzed and the spectroscopic consts. detd. The ν_3 vibrational dipole moment deriv. was detd. for several rovibrational lines.

(ν_3)

C. A. 1982, 96, N12

SiF₄

Oct. 16/81

1982

98: 249:4f Doppler-limited spectrum and analysis of the $3\nu_3$ manifold of tetrafluorosilane. Patterson, Chris W.; Pine, A. S. (Los Alamos Natl. Lab., Univ. California, Los Alamos, NM 87545 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 96(2), 404-21 (Eng). The two IR-active vibrational bands of the $3\nu_3$ manifold of SiF₄ were recorded at ~155 K with Doppler-limited resolu. by using a tunable laser difference-frequency spectrometer. Although all branches of the $l = 1$ band were seen, only portions of the P branch of the weaker $l = 3$ band were recorded. Some 192 lines with $J \leq 36$ were fit to a model Hamiltonian which allows the $l = 1$ and $l = 3$ bands to interact. This anal. allows detg. the effective harmonic frequency, ω_{e0} , and the 3 anharmonic coeffs. X_{33} , G_{33} , and T_{33} with high precision, so that the vibrational levels in the ν_3 ladder can be predicted accurately for several values of n . In contrast with SF₆, the l basis is the best representation for the vibrational sublevels.

M.A.

C. A. 1983, 98, N4.

SiF₄

Осн. 76167

1982

12 Б280. Спектр с разрешением ограниченным доплеровским уширением и анализ мультиплетной структуры полосы $3\nu_3$ молекулы SiF₄. Doppler-limited spectrum and analysis of the $3\nu_3$ manifold of SiF₄. Patterson C. W., Pine A. S. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 96, № 2, 404—421 (англ.)

Vi, М.П.

Полоса поглощения $3\nu_3$ молекулы SiF₄ записана при $T \sim 155$ К с разрешением, ограниченным доплеровским уширением с использованием перестраиваемого лазерного разностно-частотного спектрометра, в котором линия излучения стабилизированного одномодового аргонового лазера при 4880 А смешивалась с линией излучения перестраиваемого одномодового кольцевого лазера на красителе (при 5741 А) в нелинейном оптич. кристалле LiNbO₃. Наблюдены все ветви полполосы $l=1$ и P -ветвь слабой подполосы $l=3$. Идентификация и анализ мультиплетной структуры полосы $3\nu_3$ SiF₄ выполнен процедурой подгонки. Обработаны 192 линии с $J \leq 36$ на основе модельного гамильтониана, в котором учтено взаимодействие между $l=1$ и $l=3$ ангармонич. подуровнями $3\nu_3$. Определены: эффективная гармонич. частота $\nu_3^0 = 1030,982(3)$ см⁻¹, три ангармонич. коэф.: $X_{33} =$

X. 1983, 19, N 12

$\nu_3 = -3,0058(7) \text{ см}^{-1}$, $G_{33} = 1,7828(6) \text{ см}^{-1}$, $T_{33} = 0,20992(10) \text{ см}^{-1}$. Как и ожидалось, спектроскопич. постоянные для $3\nu_3$ состояния оказались близкими к соотв-щим постоянным для ν_3 состояния. Оценка дипольных моментов для $l=1$ и $l=3$ состояний показала, что $|\mu_{l=3}| \ll |\mu_{l=1}|$. Используя только $\mu_{l=1}$ получено хорошее воспроизведение наблюденного спектра в Q- и R-ветвях. Для точного определения $\mu_{l=3}$ необходимо исследовать очень слабую Q-ветвь $l=3$ подполосы. В отличие от SF_6 при построении матрицы энергии для взаимодействующих колебательных подуровней $3\nu_3$ в SiF_4 оказалось удобным использовать базис колебательного углового момента l , а не декартовый (n_x, n_y, n_z) базис. В колебательном приближении для $n\nu_3$ SiF_4 квантовое число l найдено хорошим, в соответствии с этим установлены приближенные правила отбора для дипольных переходов в $n\nu_3$ лестнице состояний $\Delta n = \pm 1$, $\Delta l = \pm 1$ и, используя спектроскопич. постоянные для $3\nu_3$ состояния, вычислены колебательные подуровни в обертонах $n\nu_3$ ($n=1-8$). На основе этих данных обсуждена проблема бесстолкновительной многофотонной диссоциации SiF_4 при накачке интенсивным ($\sim 200 \text{ мВт/см}^2$) CO_2 лазером.

В. М. Михайлов

SiF₄

ДМ. 16101

1982

6 Д428. Спектр SiF₄ при разрешении, ограниченном доплеровской шириной линий и анализ полос 3v₃. Doppler-limited spectrum and analysis of the 3v₃ manifold of SiF₄. Patterson Chris W., Pine A. S. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 96, № 2, 404—421 (англ.)

Исследован колебательно-вращательный спектр поглощения газообразного SiF₄ в области колебательных полос 3v₃ SiF₄. Измерения проведены при t-ре 155 К с помощью спектрометра, работающего по принципу вычитания частот и включающего кольцевой лазер на красителях с изменяемой частотой излучения. Разрешение ограничивалось доплеровской шириной линий, точность определения частот составляла 5·10⁻⁴ см⁻¹, калибровка частоты проводилась по линиям R(4) и R(5) полосы v₃ CH₄. Приведены изображения полученных спектров и таблицы частот зарегистрированных линий, проведено их отнесение по типам переходов. Из анализа частот 192 линий, принадлежащих компо-

М. П.

Ф. 1983, 18, № 6

нентам λ 3,660 см^{-1} и 3090,608 см^{-1} колебательного
 перехода $3\nu_3$ ($J \leq 36$), определены постоянные модель-
 ного гамильтониана молекулы, учитывающего взаимо-
 действие между подуровнями $l=1$ и $l=3$ уровня $3\nu_3$.
 Найденные значения постоянных ангармоничности
 $X_{33} = -3,0058(7) \text{ см}^{-1}$, $G_{33} = 1,7828(6) \text{ см}^{-1}$ и
 $T_{33} = 0,20992(16) \text{ см}^{-1}$ позволили рассчитать энергии
 уровней $n\nu_3$ вплоть до $n=8$. Отмечено, что в отличие
 от молекулы SF_6 правильные собств. ф-ции ангар-
 монич. подуровней молекулы SiF_4 ближе к l -базису,
 чем к декартову. Библ. 31. Н. Ф.

SiFy

1982

Patterson C. W.

Abstr. Pap. presented Pitts-
burgh Conf. and Expo. Anal.
Chem. and Appl. Spectrosc.
Atlantic City, N.Y., March 8-
13, 1982, S. 1, S. a., 688.
(rev. SF6 ; III)

$H_2O \cdot SiF_4$

Occ. 17724

1983

! 99: 96045m Argon matrix investigation of the 1:1 molecular complexes of silicon tetrafluoride with water, methanol, and dimethyl ether. Ault, Bruce S. (Dep. Chem., Univ. Cincinnati, Cincinnati, OH 45221 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1983, 105(18), 5742-6 (Eng). The codeposition of SiF_4 with a variety of O-contg. bases in inert matrixes at 15 K gave rise to a no. of novel 1:1 adducts. The species $H_2O \cdot SiF_4$, $MeOH \cdot SiF_4$, and $Me_2O \cdot SiF_4$ were each identified and characterized spectroscopically. The most prominent feature in the IR spectrum of each adduct was an intense Si-F stretching mode between 960 and 990 cm^{-1} . The position of this mode correlated linearly with the degree of base character of the Lewis base in the complex. Addnl. modes of the 1:1 complex were obsd. as well, including modes of the perturbed base subunit in the adduct. These modes showed little shift from the position of the free, isolated base, indicating a quite weak, but specific, interaction with SiF_4 . No evidence of a 1:2 adduct was noted under these exptl. conditions.

UK chemp
b
Mampuse

(+1) ☒

C.A. 1983, 99, N12



$CH_3OH \cdot SiF_4$
 $(CH_3)_2O \cdot SiF_4$

SiF₄

1983

Jolly William L.

(7) Chem. Phys. Lett.,
1983, 100, N 6, 546-548.

(cur. CF₄; III)

SiF₄

1983

13 Б108. Измерения углового распределения фотоэлектронов, полученных при ионизации 2p-орбиталей кремния в SiF₄ и Si(CH₃)₄ в газовой фазе. Angle-resolved photoelectron measurements on the 2p orbitals of Si in SiF₄ and Si(CH₃)₄ in the gas phase. Keller P. R., Taylor J. W., Grimm F. A., Senn P., Carlson T. A., Krause M. O. «Chem. Phys.», 1983, 74, № 2, 247—251 (англ.)

спектр

С использованием синхротронного излучения в качестве источника возбуждения измерены рентгеноэлектронные спектры Si2p молекул SiF₄ и Si(CH₃)₄ при различных углах регистрации фотоэлектронов относительно направления вектора поляризации возбуждающего излучения. На основе измеренных интенсивностей определены параметры асимметрии углового распределения фотоэлектронов β при кинетич. энергиях от 3 до 45 эВ. При энергиях >20 эВ значения β для обеих молекул близки друг к другу, а в околопороговой области β для SiF₄ ($\sim -0,5$) существенно отличается.



Х. 1983, 19, N 13

от β для $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ (~ 0). Для интерпретации полученных результатов проведены расчеты энергетич. зависимости β для $2p$ -орбитали атома кремния с помощью $X\alpha$ -метода рассеянных волн. Теоретич. зависимость качественно правильно передает эксперим. поведение β , хотя приводит к сильно завышенным результатам. С использованием простой электростатич. модели для сдвига энергии связи внутреннего уровня в молекуле и эксперим. данных по энергиям связи $\text{Si}2p$ в SiF_4 и $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ оценена разность зарядовых состояний Si в этих молекулах ($\sim 0,5$ э). Доп. расчеты β с использованием потенциала заряженного атома Si (удалялась половина электрона с верхней заполненной АО) показали, что минимум в околопороговой области энергетич. зависимости β становится более глубоким. Сделан вывод о том, что изменение зарядового состояния Si может объяснить (по крайней мере, частично) наблюдаемые различия в околопороговом поведении β в разных молекулах.

М. Гофман

Si F₄

1983

Magerl G., Frye J. M.,
et al.

UK

Appl. Phys. Lett. 1983,
42(8), 656-658.

спектр

(cell. CH₃F; III)

SiF₄ / Оптика 15948 / 1983.

мультифо-
тон. ре-
зонанс,
P₃

Patterson C.W.,
Pine A. S.,
Opt. Commun., 1983,
44, N3, 170-174.

1983

SiF₄SiF₄-D₂

(А. р. иониз.)

№ 23 Б1080. Реакции газообразных ионов в SiF₄ и в смесях SiF₄—D₂. Gaseous ion reactions in SiF₄ and SiF₄—D₂ mixtures. Senzer S. N., Lampe F. W. «J. Appl. Phys.», 1983, 54, № 6, 3524—3527 (англ.)

Методом тандемной масс-спектрометрии изучены ионно-молек. р-ции в разрядах SiF₄ (I) или смесях I—D₂ при давл. 0,15—0,25 Торр. Установлено образование ионов Si⁺, SiF⁺ (II), SiF₂⁺, SiF₃⁺ (III), D⁺, D₂⁺ и D₃⁺. В условиях опыта учитываются только р-ции ионов II, III, D₂⁺ и D₃⁺. В отсутствие D₂ единственной р-цией в системе является II+I→III+SiF₂, причем перенос иона F⁻ от I к II требует затраты 50±11 ккал/моль. В системе I—D₂ обнаружены р-ции D₂⁺+I→SiF₄⁺+D₂; D₃⁺+I→III+DF+D₂; D₃⁺+I→SiF₄D⁺+D₂; SiF⁺+D₂→SiFD⁺+D и D₂⁺+I→III+DF+D. Только последняя р-ция протекает с выделением тепла. Не обнаружено

X. 1983, 19, № 23

никакого взаимодействия между ионом III и I или D₂.
Почти полное отсутствие экзотермич. ионно-молек.
реакций означает, что ионное распределение продуктов в
химии плазмы систем I или I—H₂ будет полностью
определяться перекрестными сечениями ионизац. про-
цессов электронного захвата.

В. В. Винц.

SiF₄

214. 16-695 1983

8 Д486. Спектроскопия ИК-микроволнового двойного резонанса в области полосы фундаментального колебания ν_3 молекул SiF₄ с использованием перестраиваемого диодного лазера. Infrared-microwave double resonance spectroscopy of the SiF₄ ν_3 fundamental using a tunable diode laser. Takami Michio, Kuze Hiroaki. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 5, 2204—2209 (англ.)

Методом ИК-микроволн. резонанса изучены чисто вращательные спектры молекул SiF₄ (I) в области полосы колебания ν_3 на фоне излучения перестраиваемого по частоте диодного лазера. Идентифицированы полосы 106 переходов между подуровнями тонкой структуры полосы данного колебания в области радиочастот и ~60 полос микроволн. переходов между подуровнями, расщепленными по механизму кориолисова взаимодействия движений I. Отмечено, что погрешность определения частот наблюдаемых полос в спектрах I не превышала десятков килогерц. Вычислены 7 скалярных и 4 тензорные постоянные возбужденного состояния I. Проведен анализ слабаразрешенной Q-ветви колебания ν_3 I и рассчитаны величины постоянных B_0 , D_0 и D_{044} основного состояния I. Библ. 31. И. В. А.

М.П;

90. 1983, 18,
N 8

SiF_4

044, 16685

1983

18 Б234. Спектроскопия инфракрасного-микроволнового резонанса основной полосы ν_3 SiF_4 при помощи перестраиваемого диодного лазера. *Infrared—microwave double resonance spectroscopy of the SiF_4 ν_3 fundamental using a tunable diode laser.* Takami M., Kuze H. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 5, 2204—2209 (англ.)

ν_3 , м.п.

Методом ИК-МВ двойного резонанса измерен с точностью определения частот ~ 25 кГц чисто вращательный спектр тетрафторида кремния, $^{28}\text{SiF}_4$, в возбужденном колебательном состоянии ν_3 . Накачка осуществлялась перестраиваемым полупроводниковым лазером. Выполнены РЧ-измерения в области 1—500 МГц для 106 переходов между компонентами тонкой структуры

X. 1983, 19, N 18

и МВ-измерения в области 28—65 ГГц для 60 переходов между подуровнями кориолисова взаимодействия. Наблюдаемые спектры проанализированы для состояния ν_3 в приближении модельного гамильтониана с точностью до членов четвертого порядка и для основного состояния с точностью до членов второго порядка. Диагонализация гамильтониана проведена с учетом трех кориолисовых подуровней. Определены 12 молек. постоянных для состояния ν_3 и 3 постоянных для основного состояния. Результаты теор. расчета для молек. постоянных хорошо согласуются с эксперим. данными, что может быть использовано для оценки кубич. постоянных потенциальной функции. С. Н. Мурзин

SiF₄

Oct. 16685

1983.

/ 98: 151943j Infrared-microwave double resonance spectroscopy of the silicon tetrafluoride ν_3 fundamental using a tunable diode laser. Takami, Michio; Kuze, Hiroaki (Inst. Phys. Chem. Res., Wako, Japan 351). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(5), 2204-9 (Eng). The pure rotational spectrum of SiF₄ was investigated in the ν_3 vibrational state by IR-microwave double resonance. Frequency tunable semiconductor diode lasers were used as an IR pumping radiation source. Radio-frequency transitions among the tetrahedral fine structure splittings and 60 microwave transitions among the various Coriolis sublevels were measured with an accuracy of a few tens of kHz. Seven scalar and 4 tensor consts. of the excited state were detd. accurately. A part of the badly congested IR Q-branch spectrum was analyzed on the basis of assignment by double resonance. Three ground-state consts. B_0 , D_0 , and D_{044} were detd.

с.п., ч.б. -
оптм. гвоу-
ной резонанс

C.A. 1983, 98, N 18.

1983

SiF₄SiF₃, SiF₂, SiF

18 Б98. Газообразные продукты реакции XeF₂ с кремнием. Gaseous products from the reaction of XeF₂ with silicon. Winters Harold F., Houle F. A. «J. Appl. Phys.», 1983, 54, № 3, 1218—1223 (англ.)

Исследованы газ. продукты взаимодействия молек. пучка XeF₂ с поверхностью Si(3+). В кач-ве детектора использован квадрупольный масс-спектрометр. Для выделения ионных токов продуктов, образывавшихся на поверхности Si(3+) и на стенках вакуумной камеры использованы прерыватель пучка продуктов и синхронное детектирование. Найдено, что основным продуктом является SiF₄ (более 85%). Кроме того, в примерно равных кол-вах образуются SiF и SiF₂; возможно и образование SiF₃. При бомбардировке поверхности Si(3+) ионами Ar⁺ с энергиями 2 кэВ SiF₄ составил лишь 64—86% продуктов, остальное — SiF_n (n=1, 2, 3). Обнаружено, что в ряде случаев возможно образование SiF₄ в результате р-ции SiF₂ со стенками вакуумной камеры, сделанными из нержавеющей стали. Д. В. Чеховской

X. 1983, 19, N 18

SiF₄

1983

100: 93755w Raman scattering of tetrafluorosilane (SiF₄) molecules in amorphous fluorinated silicon. Yamamoto, Keiichi; Nakanishi, Toshiro; Kasahara, Hajime; Abe, Kenji (Dep. Electron., Kobe Univ., Nada, Japan-657). *J. Non-Cryst. Solids* 1983, 59-60(1), 213-16 (Eng). The Raman spectra of fluorinated amorphous Si films prepd. by the reactive sputtering of Si in a gaseous mixt. of SiF₄-Ar were measured. The calcs. of the normal vibration frequencies of Si-F_n bonds using the valency force field model and the central force field model were also made. Comparing the exptl. results with these calcs., the Si-F_n vibrational modes were assigned and the existence of SiF₄ mols. was confirmed.

Vi;

C. A. 1984, 100, N12



SiF₄

1984

101: 12445r Effects of anharmonicity of molecular vibrations on the diffraction of electrons. Part V. Tetrahedral molecules. Bartell, Lawrence S. (Dep. Chem., Univ. Michigan, Ann Arbor, MI 48109 USA). *J. Mol. Struct.* 1984, 116(3-4), 279-88 (Eng). Unless the skewing of radial distribution peaks is properly taken into account, diffraction analyses of gas mols. may lead to geometrically inconsistent arrays of internuclear distances. A method is given to derive the required nonbonded skew parameter $\hat{a}$ for a tetrahedral AX₄ mol. from its potential consts. in the case of an ensemble distributed among too many vibrational states to make the std. perturbation or variation methods feasible. Elements of the transformation tensor relating curvilinear coordinates $\hat{S}_i$ to rectilinear coordinates S_i are found and applied in a treatment using the "effective potential energy" approach of Miller. Illustrative calcs. are carried out for hot CF₄ and SiF₄ mols. The contributions to $\hat{a}$ from nonlinear transformations and from Morse stretching deduced by a simple model are in reasonably good agreement with the more rigorous calcs.

метрологич.
анализ. по-
методу

(H) 12

C: A. 1984, 101, N2

CF₄

SiF₄

[OM-20791]

1984

Bartell L.S., Stanton J.F.

Электроно
групп.
исследов.
структур.

J. Chem. Phys., 1984,
81, N 9, 3792-3795.



SiF₄ Borsella E., Del 1984
Bello U., et al.

12 Yugosl Summer Sch. and
Int. Symp. Phys. Ioniz. Gases
84, Sibenik, Sept. 3-7, 1984.

чекмп Contrib. Pap. and Abstr. In-
vit. Lect. and Progr. Repts.
Belgrade, S.A., 231-234.

(cur. SF₆ ; III)

SiF_4

спектр в
матрице

ср. 1985, 18, № 8

1984

8 Л135. Ориентационное упорядочение и структура центров SiF_4 , изолированных в твердых благородных газах. Orientational ordering and site structure of SiF_4 trapped in rare gas solids. Jones Llewellyn H., Swanson Basil I., Ekberg Scott A. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 12, Pt1, 5268—5271 (англ.)

Изучены ИК-спектры молекул SiF_4 (I), осажденных из газовой фазы в твердые матрицы аргона, криптона и ксенона при t -ре 10—40 К. Сопоставлены интенсивности ИК-полосы валентного асимметричного колебания ν_3 связи Si—F при различных ориентациях вектора световой волны. Установлено преимущественное (>95%) ориентационное упорядочение молекул I в матрицах с направлением оси 3-го порядка, совпадающим с направлением плоскости роста грани (111) кристаллич. матрицы. Исследованы вариации полуширины и интенсивности ИК-полос I при изменении t -ры. Предположено, что в отличие от кубич. симметрии локального поля I в Ag-матрице, в матрицах криптона и ксенона молекулы I замещают 3-атомные вакансии. Обсуждены вариации параметров ИК-полос I при совместном осаждении I и молекул UF_6 в матрицы твердых благородных газов.

И. В. А.

SiF₄

1984

14 Б1217. Ориентационное упорядочение и структура, обусловленная различным матричным окружением SiF₄, изолированного в твердых инертных газах. Orientational ordering and site structure of SiF₄ trapped in rare gas solids. Jones Llewellyn H., Swanson Basil I., Ekberg Scott A. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 12, Pt 1, 5268—5271 (англ.)

Измерены ИК-спектры высокого разрешения в области полосы ν_3 молекул SiF₄ (~ 1025 см⁻¹), изолированных в матрицах из Ar, Kr и Xe при 10 К (разбавление 1 : 20 000). Изучено поведение полос при аннелировании матриц. В спектрах Ar-матриц обнаружен дублет 1022,29/1023,03 см⁻¹, НЧ-компонента к-рого менее интенсивна при горизонтальной поляризации ИК-излучения и практически исчезает при вертикальной поляризации. Показано, что наличие 2 пиков связано с расщеплением трижды вырожденной частоты на невырожденную (НЧ-компонента) и дважды вырожденную при взаимодействии с матричным окружением. Отмечено, что связанное с понижением симметрии молекулы расщепление больше ($> 0,7$ см⁻¹), чем это обычно наблюдается ($0,1—0,3$ см⁻¹) в других молекулах и невырожденное

Di, M. N;

X. 1985, 19, N 14

колебание ниже по частоте, чем дважды вырожденное (в случае CCl_4 в Кг — наоборот). Сделан вывод, что симметрия SiF_4 в Аг понижается до C_{3v} , причем молекулы занимают только один тип мест захвата (четырехкратного замещения) в плотной кубич. упаковке Аг, а ось C_3 сильно связана с направлением роста кристалла $\langle 111 \rangle$. Степень ориентац. упорядочения оценена в 95%. Установлено, что в матрице из Кг (ν_3 — 1025,5 и 1022,80 см^{-1} соотв.) молекулы SiF_4 занимают места тройного замещения, причем особенностью ν_3 в Кг является уменьшение отталкиват. Пт при тепловом расширении решетки. Дублетная структура ν_3 SiF_4 в Хе, отчетливо проявляющаяся при $T > 25 \text{ К}$, связывается с двумя возможными расположениями SiF_4 в ячейке тройного замещения. Изотопные сдвиги по Si совпадают с газозфазными.

С. Б. Осин

SiF₄

Дм. 19587

1984

2 Д66. Производные дипольного момента, полярные тензоры и эффективные заряды в молекуле тетрафторида кремния. Dipole moment derivatives, polar tensors, and effective charges of silicon tetrafluoride. Kim K w a n. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 11, 2394—2397 (англ.)

В приближении жесткий ротатор — гармонич. осциллятор на основании имеющихся в литературе данных по интегральным молярным коэф. поглощения в ИК-диапазоне для молекулы SiF₄ рассчитаны матрицы полярных тензоров (тензоров производных дипольного момента). Для правильного выбора знака производных дипольного момента проведено сравнение с соответствующими матрицами, компоненты которых рассчитаны в рамках метода ППДП/2, а также сравнение производных дипольного момента по координатам симметрии, полученных из эксперим. данных и квантовомеханически. Рассчитан эффективный заряд атома F в молекуле SiF₄ $\chi_{F/e} = 0,574$.

В. А. Куликов

рассчит
М.А.

Ф. 1985, 18, №2.

SiF₄

1984

1 Б4321. Ионно-молекулярные реакции четырехфтористого кремния. Ion/molecule reactions of silicon tetrafluoride. Reents W. D., Jr, Mujsce A. M. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Process.», 1984, 59, № 1, 65—75 (англ.)

Методом масс-спектрометрии с преобразованием Фурье изучены ионно-молек. р-ции ионов, получаемых из SiF₄ (давл. $3 \cdot 10^{-7}$ Торр, т-ра $\sim 100^\circ \text{C}$, энергия ионизирующих электронов 70 эВ) с SiF₄, N₂, CH₄, CHCl₃, H₂O и C₂H₄). Для след. р-ций определены константы скорости [см³/(молекула·с)]: $\text{F}^+ + \text{SiF}_4 \rightarrow \text{SiF}_3^+ + \text{F}_2$ $2,3 \cdot 10^{-9}$, $\text{SiF}_4 + \text{SiF}_2 \rightarrow \text{Si}_2\text{F}_7^+ + \text{F}$ $3,6 \cdot 10^{-10}$, $\text{SiF}_4^+ + \text{N}_2 \rightarrow \text{N}_2^+ + \text{SiF}_4 < 10^{-11}$, $\text{SiF}_4 + \text{N}_2 \rightarrow \text{SiF}_3(\text{N}_2)^+ + \text{F}$ $5,8 \cdot 10^{-10}$, $\text{SiF}_3(\text{N}_2)^+ + \text{SiF}_4 \rightarrow \text{Si}_2\text{F}_7^+ + \text{N}_2$ $1,7 \cdot 10^{-10}$, $\text{SiF}_4 + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_4^+ + \text{SiF}_4$ $1,4 \cdot 10^{-9}$, $\text{SiF}_3 + \text{CH}_4 \rightarrow \text{SiF}_2\text{CH}_3^+ + \text{HF}$ $3,9 \cdot 10^{-11}$, $\text{SiF}_2\text{CH}_3^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{SiF}(\text{CH}_3)_2^+ + \text{HF}$ $8 \cdot 10^{-12}$, $\text{SiF}(\text{CH}_3)_2^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{Si}(\text{CH}_3)_3^+ + \text{HF} \leq 10^{-12}$, $\text{SiF}_4 + \text{CHCl}_2 \rightarrow \text{CHCl}_3^+ + \text{SiF}_4 \leq 2 \cdot 10^{-10}$, $\text{SiF}_4^+ + \text{CHCl}_3 \rightarrow \text{CHCl}_2^+ + \text{SiF}_4 + \text{Cl}$ $3,1 \cdot 10^{-9}$, $\text{SiF}_3^+ + \text{CHCl}_3 \rightarrow \text{CHCl}_2^+ + \text{SiF}_3\text{Cl}$ $3,2 \cdot 10^{-9}$, $\text{SiF}_4^+ + \text{CHCl}_3 \rightarrow \text{CCl}_3^+ + \text{SiF}_4 + \text{H}^+ \leq 4 \cdot 10^{-10}$. Средство к протону SiF₄ и SiF₃OH равно 484 и 669 кДж/моль соотв. Средство к SiF₃⁺ уменьшается в ряду $\text{F} < \text{N}_2 < \text{HF} < \text{SiF}_4 < \text{H}_2\text{O}$.

Ант

⊗
(+2)

х. 1985, 19, N/

Ю. И. Дорофеев

SiF_4

1984

Schlegel H. B.

теоретическая, J. Phys. Chem.,
структура, 1984, 88, N25,
 ν_i , ΔH_f , ΔS . 6254 - 6258.

(сер. SiH_2 ; III)

SiF_4

1985

Алибеков Б. Т.,
Петрик Т. Т. и др.

теор.
расчет.

М. физ. химии, 1985,
59, № 8, 1974-1978.

(см. CF_4 ; III)

SiF₄(2)

[om. 21529]

1985

консам.
атану,
сирок
ростом,
ab initio
парем-

Curtiss L.A., Maroni V.A.,
Spectrochem Acta, 1985,
A41, N 4, 585-593.

1985

SiF_4

Коломийцова Т. Д.,
Мельникова С. М.,
и др.

D_2 ;

Оптика и спектроско-
пия, 1985, 59, N 6, 1226 -
1232.
(ср. SF_6 ; III)

SiF_4

1985

1 Б1040. Квантовохимические расчеты соединений со связями Si—F. Quantum chemical calculations of Si—F-species. Lück R., Scholz G., Kolditz L. «J. Fluor. Chem.», 1985, 29, № 1—2, 877 (англ.)

С целью исследования механизма термич. деструкции алкилгексафторсиликатов полуэмпирич. методами ППДП/2 и РМХ проведены расчеты относительной стабильности и реакционной способности SiF_4 (I), SiF_3^+ (II) и SiF_2^{2+} (III). Существование плоских конфигураций I и II в тв. фазе найдено энергетически возможным. Энергия связи Si—F в рассмотренных соединениях уменьшается с ростом числа атомов F, что объяснено уменьшением угла F—Si—F, при к-ром увеличиваются равновесные значения длины связей Si—F, рассчитанные методом ППДП/2. И. Абронин

геометр.
структура

(+2) A7



SiF_3^+ , SiF_2^{2+}

Х. 1986, 19, N1

SiF₄

1985

10 Б1031. Возможность существования плоского SiF₄. Zur Möglichkeit der Existenz von planarem SiF₄. Scholz G., Lück R., Kolditz L. «Hauptjahrestag., Leipzig, 4—6 Dez., 1985. Kurzfref Sektions- und Postervortr.». S. 1., s. a., 31 (нем.)

С помощью методов ППДП/2 и РМХ проанализирована способность С, Si и Ge к образованию плоских тетракоординированных соединений. Расчеты проведены для тетраэдрич. (симметрия T_d) и плоской (D_{4h}) моделей соединений MH_4 , MF_4 , где $M=C, Si, Ge$. Все плоские модели менее стабильны по сравнению с тетраэдрич., характеризуются более длинными связями и большей поляризацией связей. С увеличением порядкового номера центрального атома и электроотрицательности заместителя возрастает склонность к образованию плоской структуры. Резюме.

X. 1986, 19, N 10

SiF₆

1985

Stanton John F.,
Bartell Lawrence S.

расчет
использ.
ссылкам.

J. Phys. Chem.,
1985, 89, N 12, 2544.

● - 2549.
(ссыл. SF₆; III)

Si Fy

1986

Cyvin S. J., Cyvin B. N.,
et al.

n.n. Z. Naturforsch., 1986,
A41, N4, 615-618.

(C_{60} CH₄; III)

SiF₄

1986

/ 105: 66835u Ionization potentials and electron momentum distributions for tetrafluorosilane valence-shell orbitals: an (e,2e) spectroscopic investigation and Green's function study. Fantoni, R.; Giardini-Guidoni, A.; Tiribelli, R.; Cambi, R.; Rossi, M. (Dip. TIB, ENEA, 00044 Frascati, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 128(1), 67-75 (Eng). Ionization potentials and electron momentum distributions of SiF₄ valence-shell orbitals were measured by means of (e,2e) spectroscopy. SCF calcns. and a Green's function study were performed on the same mol. A comparison between exptl. and theor. results shows that a significant interaction of 2p orbitals with 3d Si orbitals occurs.

(I, meop. pacem)

C.A. 1986, 105, N 8

SiF₄

1986

13 Б1115. Обертонные и комбинационные состояния валентных колебаний в тетрафториде кремния. Stretching vibrational overtone and combination states in silicon tetrafluoride. Halonen Lauri. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 120, № 1, 175—184 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Предложена простая трехпараметрич. модель для описания спектра вал. кол. в молекуле тетрафторида кремния, основанная на представлении о локальных колебаниях. Вариационным методом в базе приведенных по симметрии произведений морзевских волновых функций рассчитаны все обертонные и комбинационные состояния с $\nu_1 + \nu_3 = 5$. Показано, что с ростом возбуждения верхние состояния групп уровней $n\nu_3$ постепенно выходят из резонанса с лазерным излучением на частоте ν_3 . Обсуждено значение этого факта для объяснения механизма многофотонной диссоциации молекулы тетрафторида кремния.

В. Б. Павлов-Веревкин

М.П.

Х. 1987, 19, N 13

SiF₄

10m. 26540 1986

105: 180751p Stretching vibrational overtone and combination states in silicon tetrafluoride. Halonen, Lauri (Lab. Phys. Chem., ETH-Zentrum, CH-8092 Zurich, Switz.). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 120(1), 175-84 (Eng). A simple 3-parameter model accounts for the obsd. SiF stretching vibrational states of SiF₄. A symmetrized anharmonic bond oscillator basis set is used to calc. stretching overtone and combination eigenvalues, all of which are given to $\nu_1 + \nu_3 \leq 5$. The highest levels of the $n\nu_3$ manifold move gradually out of resonances with n quanta of ν_3 as n increases, which indicates that anharmonic resonances between the ν_3 ladder and some other vibrational ladders and(or) multiphoton resonances are needed to explain the obsd. multiphoton processes.

(ν_3)

C. A. 1986, 105, N20

SiF₄

1986

№ 11 Б1091. Силовые поля для SiF₄ и H₄SiO₄. Расчеты неэмпирическим методом молекулярных орбиталей. Force fields for SiF₄ and H₄SiO₄: ab initio molecular orbital calculations. Hess Anthony C., McMillan Paul F., O'Keeffe Michael. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 22, 5661—5665 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП в базисах ОСТ-3 ГФ, 3-21, 6-31 и 6-31 ГФ*, дополненном поляризациями на всех атомах рассчитаны гармонич. силовые постоянные (СП) и частоты молекул SiF₄ (I) и H₄SiO₄ (II). Рассчитанные в базисе 6-31 ГФ* для I симметрич. СП F₁₁, F₂₂, F₃₃ и F₄₄ на 5—13% больше их эксперим. значений, полученных с поправкой на ангармонизм. Эти же СП, полученные в неполяризованном базисе 6-31 ГФ, меньше эксперим. значений. Для II показано, что структура симметрии D_{2d}, к-рая (см. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, 2304) считалась структурой с миним. энергией, нестабильна в отношении вращения

М.П.

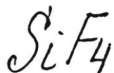
(4) 

X. 1987, 19, N 11

атомов вокруг связей Si—O, и скорее является переходным состоянием, чем глобальным минимумом. Сравнение ряда СП молекулы II с СП силикатов свидетельствует, что ССП расчеты в широких базисах могут предсказывать удовлетворительные СП для силикатных молекул и кластеров. Обсуждено влияние расширения базиса и учета поляризац. функций на геометрию и СП молекул I и II.

И. Н. Сенченя





1986

) 4 Д71. Силовые поля для SiF_4 и H_2SiO_4 . Неэмпирические расчеты методом молекулярных орбиталей. Force fields for SiF_4 and H_4SiO_4 . Ab initio molecular orbital calculations. Hess Anthony C., McMillan Paul F., O'Keeffe Michael. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 22, 5661—5665 (англ.)

Методом самосогласованного поля с использованием нескольких различных базисных наборов выполнены расчеты структурных и энергетич. характеристик SiF_4 и H_2SiO_4 . Найдены гармонические силовые постоянные и частоты колебаний. Проведено сравнение полученных валентных силовых постоянных с результатами ряда эксперим. работ по изучению различных кристаллич. полиморфов SiO_2 . При этом отмечено, что наборы силовых постоянных, заметно отличающиеся друг от друга, тем не менее обеспечивают одинаково хорошее воспроизведение эксперим. частот, и таким образом, соответствие наблюдаемых и рассчитанных частот колебаний не является достаточным критерием для выбора одного из этих наборов в качестве единственного и реального силового поля. Библ. 20.

А. И. К.

М.П.

⊠(11)

сп. 1987, 18, № 4

SiF_4

[Om. 25286]

1986

сущ. поем.,
расстояние,
ab initio
расчет

Hess A.C.; Mc Millan P.F.;
O'Keefe M.,

J. Phys. Chem., 1986,
90, N22, 5661 - 5665.

SiF_4

1986

14 Б1263. Наблюдение вращательных переходов основного состояния четырехфтористого кремния. Observation of ground state rotational transitions in silicon tetrafluoride. Jörissen L., Kreiner W., Chen Y.-T., Oka T. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 120, № 1, 233—235 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методом двойного ИК-МВ-резонанса с использованием CO_2 -лазера идентифицированы линии 4 переходов между компонентами «тетраэдрич.» расщепления вращат. уровней основного колебат. состояния молекулы SiF_4 на частотах 1,899; 3,216; 6,789 и 22,510 МГц. Наблюдались лэмбовские провалы на линиях полосы ν_3 при использовании перестраиваемого излучения, получаемого путем смешения излучения CO_2 -лазера с излучением клистрона. Для тензорной центробежной постоянной D_t получено значение 147,55 Гц. Е. В. Алиева

М.А.

X.1987, 19, N 14

SiF₄

0.m. 26 246

1986

(радиочастотная спектроскопия)

105: 180755t Observation of ground state rotational transitions in silicon tetrafluoride. Joerissen, L.; Kreiner, W. A.; Chen, Y. T.; Oka, T. (Dep. Chem., Univ. Chicago, Chicago, IL 60637 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 120(1), 233-5 (Eng). For the measurement of the ground state rotational transitions of SiF₄, IR-radio-frequency double resonance and sub-Doppler IR spectroscopy of the ν_3 fundamental band of SiF₄ were performed using microwave modulation sidebands of CO₂ laser lines. The obsd. Lamb dip frequencies and the radio frequency resonances are listed. From the radio-frequency resonance frequencies, the tensor centrifugal distortion const. for the ground state was detd. as $D_T = 147.55(10)$ Hz.

C.A. 1986, 105, N20

SiF₄

1986

Кузнецов С. Л.,
Цивадзе А. Ю. и др.

Ссыл.
поиск.

Ж. Неорг. хим. науки,
1986, 31, №3, 605-610.

(Ссыл. РСЛЗ; III)

SiF₂

1986

Kuznetsov S. L., Tsvadze
A. Yu., et al.

сущ.
нощ.

Zh. Neorg. Khim. 1986,
31(3), 605-10.

(сущ.  PCl₃; III)

SiF_4

1986

Lück R., Scholz G.,
et al.

Li. n.

Z. anorg. und allg.
Chem., 1986, 538, N 7,
191-200.

( SiF_6^{2-} ; III)

SiF_4

1986

7 Д112. Вариационный метод ячеек для многоатомных молекул SiF_4 и SiCl_4 . Variational cellular method for polyatomic molecules: SiF_4 and SiCl_4 . Machado Wanda V. M., Ferreira Luiz G., De Siqueira Manoel L. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1986, 19, № 1, 33—41 (англ.)

Обзор работ по развитию вариационного метода ячеек (ВМЯ) и результатам его использования в расчетах свойств молекул. Отмечено, что наиболее важный результат в теории ВМЯ связан с введением условий непрерывности на границе ячеек для волн. ф-ции и кулоновского потенциала. Соблюдение таких граничных условий позволяет в большой степени стабилизировать результаты расчетов молекулярных свойств методом ВМЯ по отношению к числу гармоник, используемых в разложениях волн. ф-ции. Для молекул SiF_4 и SiCl_4 при равновесных межъядерных расстояниях методом ВМЯ с учетом условий непрерывности рассчитаны первые 5 потенциалов ионизации. Полученные значения потенциалов лучше согласуются с эксперим. данными, чем существующие значения, полученные методом рассеянных волн и с помощью неэмпирич. методик.

А. И. Дементьев

(м.п.)

41

ср. 1986, 18, № 7

SiF₄

DM 23303

1986

13 Б1015. Вариационный метод ячеек для многоатомных молекул: SiF₄ и SiCl₄. Variational cellular method for polyatomic molecules: SiF₄ and SiCl₄. Machado Wanda V. M., Ferreira Luiz G., De Siqueira Manoel L. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1986, 19, № 1, 33—41 (англ.)

Предложена модификация вариац. метода ячеек (ВМЯ), связанная с введением уточненных условий непрерывности волновых ф-ций и потенциала на Пв ячеек. Показано, что учет условий непрерывности позволяет добиться стабильности результатов при варьировании длины разложений волновых ф-ций и Пт в ряд по сферич. гармоникам. В рамках модифицированного ВМЯ проведены расчеты электронного строения и потенциалов ионизации (ПИ) валентных МО молекул SiF₄ и SiCl₄. Относит. энергетич. распределение ПИ, вычисленных по ВМЯ, лучше согласуется с экспериментом, чем при использовании неэмпирич. методов и метода ССП-Хα-РВ, однако абс. значения ПИ отличаются от экспериментальных на ~3,4 и 2,7 эВ для SiF₄ и SiCl₄ соответственно.

И. А. Тополь

(9)

(11) 21

X. 1986, 19, n13

SiF₄

Am 23303

1986

104: 75245h Variational cellular method for polyatomic molecules: silicon tetrafluoride and silicon tetrachloride. Machado, Wanda V. M.; Ferreira, Luiz G.; De Siqueira, Manoel L. (Inst. Fis., Univ. Sao Paulo, 01498 Sao Paulo, Brazil). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1986, 19(1), 33-41 (Eng). New developments are described in the theory and application of the variational cellular method. The most important advance in the theory is the introduction of a continuity condition for the wavefunctions and potential at the cell boundaries. The continuity condition gives a very remarkable stability to the results for changes in the size of the angular momentum expansions. The calcd. mols. are SiF₄ and SiCl₄, for which the ionization potentials are better than those of the multiple-scattering or existing ab initio methods.

J, meop.
pacem

⊗ (7) SiCl₄ ●

C.A. 1986, 104, N10

SiF_4

1986

108: 46136a Diode laser spectroscopy of a vibrational-rotational band ν_3 of a silicon fluoride molecule. Nadezhdinskii, A. I. (USSR). *Vrashchat: Spektry Molekul.*, M. 1986, 61-101 (Russ). From *Ref. Zh., Fiz. (A-Zh.)* 1987, Abstr. No. 9L1271. Title only translated.

(ν_3)

C.A. 1988, 108, N6

SiF₄

1986

№ 18 Б1243. Диодная лазерная спектроскопия колебательно-вращательной полосы ν_3 молекулы SiF₄.
Надеждинский А. И. «Вращат. спектры молекул». М., 1986, 61—101

сч. 11

К. 1987, 19, № 18

SiF_4

1986

№ 9 Л1271. Диодная лазерная спектроскопия колебательно-вращательной полосы ν_3 молекулы SiF_4 . На-
деждинский А. И. «Вращат. спектры молекул». М., 1986, 61—101

На диодном лазерном спектрометре измерены ИК-спектры фундаментальной полосы поглощения с полным разрешением тонкой структуры трех изотопич. модификаций тетрафторида кремния. Произведена идентификация спектров и измерены частоты переходов с погрешностью, не превышающей 12 МГц. Найден набор спектроскопич. констант, с высокой точностью описывающий положение линий в спектре. Определены молекулярные константы, входящие в колебательно-вращательный гамильтониан молекулы с учетом третьего порядка теории возмущений. Проведено сравнение с результатами исследований других авторов и отмечено наличие в них больших эксперим. погрешностей. Библ. 28.

Б. Д. Ф.

М.П.

ф. 1987, 18, № 9

SiF_4

1986

17 Б3188. Модельное исследование испарения SiF_4 из расплавленных оксидных стекол. Model study of SiF_4 volatilisation from an oxide glass melt. Parker J. M., West G. F. «Mater. Sci. Forum», 1986, 7, 297—305 (англ.)

Путем моделирования на ЭВМ исследовано испарение SiF_4 при 900°C из расплавленных стекол системы $\text{Na}_2\text{O}-\text{CaO}-\text{SiO}_2$ с добавкой F. На основе известных значений коэф. диффузии Si^{4+} , Ca^{2+} , Na^+ , F- рассчитаны концентрац. профили компонентов и толщина прозрачного поверхн. слоя, образующегося в результате р-рения выпадающих кристаллов CaF_2 (р-рение этих кристаллов, придающих стеклам молочно-белый цвет, связано с испарением SiF_4). Подтвержден сложный характер концентрац. профилей, свидетельствующий о процессе с диффузионным контролем и восходящей диффузии ионов Ca^{2+} и Na^+ . Выявлена резкая граница между опаловой и прозрачной обл. стекла и зависимость диффузности границы от значений коэф. диффузии ионов F и Ca. Отмечена неприменимость использованной диффузионной модели для описания высокот-рного поведения системы, когда CaF_2 находится в растворе.

А. Е. Вольпян

X. 1986, 19, N 17

SiF₄

1986

Scholz B., Lück R.,
et al.

волев. Z. anorg. und allg
chem. Chem., 1986, 532, N1,
57-64.

(ccv. CH₄; III)

SiF₄

1986

7 24 Б1045. Теоретическое исследование строения и свойств молекул и анионов фторидов элементов III периода. Слизнев В. В., Соломоник В. Г. «Исслед. структуры и энерг. молекул». Иваново, 1986, 26—34

Неэмпирическим методом ССП с двухэкспонентными базисами Хузинаги — Даннинга (9s5p/4s2p)_F и Маклина — Чандлера (12s8p1d/6s4p1d)_{Al}, дополненным *d*-функциями, проведено исследование свойств молекул SiF₄, PF₅, SiF₂, PF₃, SF₄ и соответствующих ионов AF^{-(k+1)}. Из резюме

М.П.

(44) 

X. 1986, 19, N 24

SiF_4

[Om. 25007]

1986

Tossell J.A., Lazzarotti P.,

нормаль-

двух-

квант. расч.

ab initio

расч.

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1986, 19, N20,

3217-

3226.

SiX_y^+
 $X=F, Cl, Br, I$

1987
Dixon R. N.,
Tuckett R. P.

Chem. Phys. Lett.,
1987, 140 (6), 553-7.

исей.
стич.
орбиз.
расчет.

6^2T_2 сией, расчѐт. ● (сч. CF^+ ; III)

SiF_4

(om. 27043)

1987

Dixon D.A., Andueengo A.J., III.

темпер.,
энерг.,
колебат.
частоты,
теорет.
расчет.

J. Phys. Chem., 1987, 91,
N 12, 3195-3200.

(см. CF_4 ; III)

SiX_4^+

1987

eg $X = F, Cl, Br, I$

Disson R.N.,

Tuckett R.P.

Chem. Phys. Lett.,

v. 11.

1987, 140, N6, 553-557.

 (see, CF_4^+ ; III)

F_3Si-F (DM-27524)

1987

Garrison B. J., Goddard W. A. III,

Журнал. J. Chem. Phys., 1987, 87,
N 2, 1307-1314.

(см. SiF; III)

SiF₄

1987

В 1 Б1095. Наблюдение эффекта Штарка второго порядка в основном состоянии тетрафторида кремния, SiF₄. Second-order Stark effect observation in the ground state of silicon tetrafluoride, SiF₄. Jörissen L., Prinz H., Kreiner W. A. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 124, № 1, 236—239 (англ.)

Методом ИК-радиочастотного двойного резонанса исследован эффект Штарка 2-го порядка в основном состоянии молекулы SiF₄. В тетраэдрич. молекулах за счет возникновения индуцированного центробежным искажением дипольного момента становятся слабаразрешенными переходы с $\Delta J = 0$ в основном колебат. состоянии. В случае SiF₄ наблюдались два таких вращат. перехода. Приведена величина дипольного момента индуцированного центробежным искажением $0,^{xv} = (1,9 \pm 0,9) \cdot 10^{-6}$ Д.

В. М. Ковба

М.П.

Х. 1988, 19, N 1.

SiF₄

(DM. 28756)

1987

Marshall C. J.,

auth.

J. Chem. Phys., 1987, 87,

ностр. пер.

vol. 6626-6634.

SiF_4^+

(DM 28188)

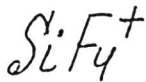
1987

Mason S. L., Tuckett R. P.,

вращат.
спектр,
виброн.
свѝзи

Mol. Phys., 1987, 62,
N1, 175-192.

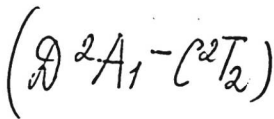
$\tilde{D}^2A_1 - \tilde{C}^2T_2$



(Am. 26817)

1987

106: 185306c The $D^2A_1-C^2T_2$ emission band system of tetrafluorosilane radical ion(1+) (SiF_4^+). Jahn-Teller distortion in the C^2T_2 state. Mason, S. M.; Tuckett, R. P. (Dep. Chem., Univ. Birmingham, Birmingham, UK B15 2TT). *Mol. Phys.* 1987, 60(4), 771-8. (Eng). The $D^2A_1-C^2T_2$ emission spectrum of SiF_4^+ was obsd. at a low rotational temp. in a crossed mol. beam/electron beam app. The narrow rotational envelope of the bands confirms the assignment of the emitter as the parent SiF_4^+ . The spectrum was analyzed, and the results compared with photoelectron data for SiF_4 . Spin-orbit splitting and Jahn-Teller distortion were obsd. in the C^2T_2 state, with both $r_2(e)$ and $r_4(t_2)$ being Jahn-Teller active vibrations.



c.A. 1987, 106, N 22

SiF_4^+

[077, 26818]

1987

1 22 Б1174. Эмиссионная полоса $\bar{D}^2A_1 - \bar{C}^2T_2$ для SiF_4^+ . Ян-теллеровское искажение $\bar{C}^2T_2$ -состояния. The $\bar{D}^2A_1 - \bar{C}^2T_2$ emission band system of SiF_4^+ Jahn-Teller distortion in the $\bar{C}^2T_2$ state. Mason S. M., Tuckett R. P. «Mol. Phys.», 1987, 60, № 4, 771—778 (англ.)

С использованием методики пересекающихся сверхзвукового молек. и электронного пучков (энергия последнего 200 эВ) исследованы эмиссионные спектры излучательной релаксации ионного состояния SiF_4^+ $\bar{D}^2A_1 \rightarrow \bar{C}^2T_2$ в обл. длин волн 528—590 нм. Высокое разрешение 0,08—0,007 нм и низкое значение вращат. т-ры позволили выделить в спектре дублеты спин-орбит. расщепления. Проведено отнесение полученного эмиссионного спектра с помощью лит. фотоэлектронных данных. Найден ряд особенностей, соотв. возбуждению $\nu_2(e)$ и $\nu_4(t_2)$ колебат. уровней состояния $\bar{C}^2T_2$ SiF_4^+ , что объяснено ян-теллеровским искажением симметрии иона в этом состоянии.

О. А. Басченко

М.Н.

X. 1987, 19, N 22

SiF_4

(om. 29180)

1987

Patil S. H.

J. Chem. Phys., 1987,
87, N 10, 5949-5956.

Se, Do,
X

SiF_4^+

1987

Suto Masako, Wang
Xueyan, et al.

J. Chem. Phys., 1987, 86,
N3, 1152-1156.

M.N.

(cor. SiF_4 ; iii)

SiF₄

1987

9 Л453. Количественное исследование процесса фотоокисления SiF₄ в области 49—120 нм. Quantitative study on the photoexcitation process of SiF₄ at 49—120 nm. Suto Masako, Wang Xiuyan, Lee L. C., Chuang T. J. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 3, 1152—1156 (англ.)

Исследован спектр поглощения в области 49—60 нм с разрешением 0,2 нм, спектры в области 49—120 нм и квантовый выход флуоресценции газообразного SiF₄ (I) в зависимости от давления I. Отнесение в спектрах I проведены по аналогии с отнесением в спектрах SF₄. Определены значения длин волн, термов, эффективных квантовых чисел, квантовых дефектов для идентифицированных ридберговских состояний I. Установлена природа излучающих центров: флуоресценция в области 49—58 нм обусловлена возбужденными ионами SiF₄⁺($\bar{D}$); за флуоресценцию в области 92—98 нм ответственны возбужденные радикалы SiF₃^{*}. Обсуждены механизм процессов фотодиссоциации и фотоионизации I, происходящие под действием синхротронной радиации. Библ. 35. А. М. М.

М.А.

⊗ (+2)

ф. 1987, 18, №9

SiF_4^+ [Om. 27892]

1987

Van Lonkhuyzen, H.;
Harts, J. F. M.

кислоты
фторид.

Chem. Phys. Lett. 1987,
140(4), 434-9.

(see GeF_4^+ ; III)

SiF₄

1988

7 16 Б1096. Индуцированный колебаниями эффект Штарка первого порядка в тетраэдрических молекулах SiH₄ и SiF₄. Vibration-induced first-order Stark effect in tetrahedral molecules: SiH₄ and SiF₄. Frye J. M., Mageri G., Kreiner W. A., Oka T. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 2, 730—737 (англ.)

Экспериментально изучено штарковское расщепление колебательно-вращат. переходов между уровнями типа E в колебат. полосе ν_3 молекулы SiF₄ и в полосе ν_4 молекулы SiH₄. Субдоплеровские измерения, основанные на насыщении лэмбовского провала, проведены с помощью установки, описанной ранее («Appl. Phys. Letters», 1983, 42, 656) при использовании линий CO₂ лазера с микроволновой модуляцией. Изучен эффект Штарка первого порядка для трех колебательно-вращат. переходов в полосе ν_4 SiH₄ и четырех переходов в полосе ν_3 SiF₄. По эксперим. измерениям штарковских расщеплений определены значения постоянного дипольного момента, индуцированного колебаниями, к-рые составили $1,46(5) \cdot 10^{-2}$ Д для SiH₄ в состоянии $\nu_4=1$ и $4,21(12) \cdot 10^{-2}$ Д для SiF₄ в состоянии $\nu_3=1$.

Б. И. Жилинский

М.П.

(4) X

Х. 1988, 19, N 16

$F_4 Si^+$
(SiF_4^+)

com. 30490

1988

Jacox M.E.,

Ti, J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 459.

SiF₄

1988

Многофотонное поглощение ИК-излучения молекулами
SiF₄ /О.В.Куричева, Б.С.Лушин, В.В.Тимофеев, Ю.Н.Житнев
// Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2, Химия. — 1988. — Т. 29, № 2. —
С. 219–220.

Бибблиогр.: 7 назв.

— — 1. Кремний, тетрафторид — Действие лазерного излучения.

№ 71458

УДК 541.14

18 № 3190

НПО ВКП 8.07.88

ЕКЛ 17.8

SiF_4^+

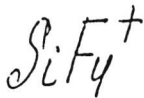
(DM. 31459)

1988

Lambert I. R.,
Mason S. M., et al.,

6035. 2A.
coem.

J. Chem. Phys., 1988,
89, N5, 2683-2690.



1988

Om. 29060

109: 63556a General discussion: electronic emission spectroscopy of tetrafluoromethane ion (CF_4^+) and tetrafluorosilane ion (SiF_4^+). Mason, S. M.; Tuckett, R. P. (Dep. Chem., Univ. Birmingham, Birmingham, UK B15 2TT). *Philos. Trans. R. Soc. London, A* 1988, 324(1578), 289-94 (Eng). Fluorescence decay was obsd. from highly excited electronic states of CF_4^+ and SiF_4^+ ions. The sign of the spin-orbit splitting is pos. for both ions. Coriolis splittings and rotational consts. are discussed.

спин-орбит
расщеплен.

(+) CF_4^+
C.A. 1988, 109, N 8



SiF_4

(OM. 30332)

1988

Org C. K., Khoo G. S.,

Re (Ge-X),
meop.
pocrem.

J. Phys. and Chem.
Solids, 1988, 49, n 8,
883- 886.



SiF₄

Om 29213

1988

/109: 61683r SCF-X α -SW calculations of small silicon-fluorine compounds. Scholz, G.; Kolditz, L. (Zentralinst. Anorg. Chem., DAW, Berlin, Ger. Dem. Rep.). *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1988, 558, 151-9. (Ger). SCF-X α -SW calcns. were used to compare the bonding situations between the tetrahedral SiF₄ mol. (*T_d*), the hexafluorosilicate anion SiF₆²⁻ (*O_h*), and the hypothetical planar SiF₄ mol. (*D_{4h}*). The size of the at. spheres was detd. by using both the covalent at. radii of Slater and the charge and at. no. radii according to J. Norman (1976). The MO anal. was performed for the valence levels of the 3 mols. and the charge distributions were calcd. Ab initio 3-21G calcns. were carried out to optimize the bond lengths of the Si-F species and to compare the results with previous CNDO/2 calcns.

neop. paucum



c. A. 1988, 109, N 8

SiF₄

OM 29213

1988

№ 10 Д151. Расчет небольших молекул со связью Si=F методом ССП $X\alpha$ рассеянных волн. SCF- $X\alpha$ -SW-Berechnungen kleiner Si-F-Verbindungen. Scholz G., Kolditz L. «Z. anorg. und allg. Chem.», 1988, 558, № 3, 151—159 (нем.; рез. англ.)

Методом ССП $X\alpha$ рассеянных волн исследовано электронное строение SiF₄ симметрии T_d (I) и гипотетич. плоская система симметрии D_{4h} (II), а также SiF₆²⁻ (O_h , III). Используются две схемы выбора радиуса атомных сфер (по Слэтеру и по Норману). Приведены распределения электронной плотности, схемы энергетич. уровней, обсуждена роль 3d-АО в связи. Длины связей оптимизированы неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО в базисе 3-21ГФ и полученные результаты сопоставлены с данными проведенных ранее расчетов по схеме ППДП/2. Отмечено, что длина связи Si=F убывает в ряду III > II > I. В. Л. Лебедев

М.П.

(11) 

ф. 1988, 18, N 10

SiF₄

DM 29213

1988

20 Б1033. Расчеты малых соединений Si—F методом ССП — $X\alpha$ рассеянных волн. SCF— $X\alpha$ -SW-Berechnungen kleiner Si—F-Verbindungen. Scholz G., Kolditz L. «Z. anorg. und allg. Chem.», 1988, 558, № 3, 151—159 (нем.; рез. англ.)

Методом ССП — $X\alpha$ —РВ рассчитано электронное строение молекул SiF₄ (конфигурация T_d), SiF₆⁴⁻ (O_h) и гипотетич. плоской системы SiF₄ (D_{4h}). Исследовано влияние различного способа выбора радиусов атомных сфер на результаты расчетов. Методом ССП в базисе 3—21 ГФ оптимизированы длины связей Si—F в исследованных соединениях. На основе результатов расчетов Пт ионизации SiF₄ (T_d) интерпретированы эксперим. данные. В плоской молекуле SiF₄ (D_{4h}) обнаружено большее, чем в др. исследованных молекулах участие Si/*p* и 3*d*-АО в хим. связи. С увеличением угла связи и уменьшением числа атомов F в молекуле длины связей Si—F уменьшаются, а связь становится более поляризованной. Эти тенденции получены в расчетах как методом $X\alpha$ -РВ, так и методом ССП и отличаются от данных, получаемых в полуэмпирич. расчетах.

И. А. Тополь

и.л.

Х. 1988, 19, № 20

SiF₄

1988

Верещагин К. А., Волков
С. Ю. и др.

ν_1 ,
и.п.

КАРС-Спектроскопия вы-
сокого разрешения полосы
 ν_1 SiF₄.

XX

Всероссийский съезд по спек-

троскотни, Киев, 1988.

Тезиси докладов, 272.

SiF₄

от. 30900

1988

Юрченко Э. Н., Бугаев В. И. и др.

гармони.
силовое поле,
силов. пост.

Ж. Структур. Ж. ИИИ,
1988, 29, № 6, 70-76.



SiF_4^+

1989

7 Б1023. Неэмпирические расчеты радикал-катионов тетрафторидов элементов IV группы. Ab initio calculations on the group IV tetrafluoride radical cations / Beärda R. A., Wiersinga H. R. R., Aarts J. F. M., Mulder J. J. C. // Chem. Phys.— 1989.— 137, № 1—3.— С. 157—164.— Англ.

Методом конфигурац. взаимодействия с учетом однократных и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям рассчитаны потенциальные Пв основных и четырех низших возбужденных состояний ионов SiF_4^+ и GeF_4^+ . Использованы базисы сгруппированных гауссовых ф-ций (9s6p)/[4s3p] на Si, (13s9p5d)/[7s5p2d] на Ge и (6s3p)/[3s2p] на F. Полученные Пт ионизации нейтральных молекул согласуются с эксперим. данными. Рассмотрены закономерности изменения х-к ионов в ряду CF_4^+ , SiF_4^+ , GeF_4^+ . Состояния $\tilde{X}$ и $\tilde{A}$ являются отталкиват., вышележащие состояния — связанные. Отмечено усиление псевдоэффекта Яна—Теллера для состояния $\tilde{C}$ при переходе от CF_4^+ к SiF_4^+ и GeF_4^+ . А. А. Сафонов

(H)
X. 1990, N 7

SiF_4

(O.M. 31609)

1989

Izenov N.R., Qi Z.,

спектр
в

Chem. Phys. Lett., 1989,

лампине

155, N 3, 283-287.

Anomalous Fragmentation in
the electron -  Impact Ioniza-

tion of SF_6 and SiF_4 in
Ar Clusters.

SiF₄

1989

Jörissen L., Prinz H., et al.,

v₃

The v₃ Fundamental of SiF₄;
the v₂/v₄ Diad of ²⁹SiH₄ and
³⁰SiH₄.

Eleventh Colloquium On
High Resolution Molecular
Spectroscopy, ● Biessen, 85

September 18-22, 1989, A1,
D5.

D5.

SiF₄

(OM 32565)

1989

D₃

111: 183292z The ν_3 fundamental of silicon tetrafluoride. Spectroscopy with laser sidebands. Joerissen, L.; Prinz, H.; Kreiner, W. A.; Wenger, C.; Pierre, G.; Magerl, G.; Schupita, W. (Abt. Phys. Chem., Univ. Ulm, D-7900 Ulm, Fed. Rep. Ger.). *Can. J. Phys.* 1989, 67(5), 532-42 (Eng). The ν_3 fundamental of ²⁸SiF₄ was investigated with laser sidebands and IR radio-frequency double resonance. From 165 IR and 206 pure rotational transitions, 10 ground state and 22 excited state consts. were detd. The calcn. was performed with a Hamiltonian developed up to sixth order.

C.A. 1989, 111, ~20

SiF_4^+

1989

Shida Tadamasu.

возб. Kagaku (Kyoto) 1989,
зеленер. 44 (1), 66-7.
состоян.

(C_{60} CF_4^+ ; III)

SiF_4

(DM 34104)

1990

Bodewitz S., Millie P., Nenner J.,
Phys. Rev. A 1990, 41, n1, 252-263
Single- and multiple-electron
effects in the Si 1s photoabsorption
spectra of SiX_4 ($\text{X} = \text{H}, \text{D}, \text{F},$
 $\text{Cl}, \text{Br}, \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \text{OCH}_3, \text{OC}_2\text{H}_5$) molecules.
Experiment and theory.

SiF₄

1990

Bozek J. D., Bancroft
G. M. et al.

Phys. Rev. Lett. 1990.

65, N 22. C. 2757-2760.

(cell. SiH₄; III)

LiF₄

[OM. 33610]

1990

Popov V.K., Rossberg M.,
et al.,

J. Mol. Struct., 1990,

218, 225-230

Laser-Induced  Fluorescence
Spectroscopy of LiF produced

by IR Multiple-photon
Dissociation of LiF_4 .

SiF₄

10M · 35787

1990

Božek J. A., Bancroft G. M.,
et al.,

Phys. Rev. Lett. 1990, 65,
N 22, 2757-2760.

Vibrationally Resolved Core-Level
photoelectron  Spectroscopy

Li 2p Levels of SiH_4 and
 SiF_4 molecules.

F₃SiF

1990

15 Б1030. Химическая связь в гипервалентных соединениях. Преобладание ионного связывания и отрицательного сверхсопряжения над вкладом *d*-орбиталей. Chemical bonding in hypervalent molecules. The dominance of ionic bonding and negative hyperconjugation over *d*-orbital participation / Reed A. E., von Ragué Schleyer P. // J. Amer. Chem. Soc.— 1990.— 112, № 4. — С. 1434—1445.— Англ.

Обзор развития представлений о природе хим. связи в гипервалентных соединениях. На примере расчета молекул SO_2Cl_2 , $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{Cl}$ (I) и $(\text{CH}_3)_3\text{SO}_2$ сопоставлены методы анализа природы связи (анализ заселенностей по Мейеру—Малликену и анализ натуральных заселенностей). При этом для I проанализировано влияние кач-ва базисного набора на результаты расчета. Расчеты в базисе 6—31 ГФ* серии 32-электронных систем состава X_3AY (CF_4 , F_3NO , O_3ClF , O_3PS^{3-} , F_3SN и др.) свидетельствуют о том, что σ -связь в этих соединениях имеет существенно ионный характер. Орбитали σ^* AX при этом являются более эффективными акцепторами электронов, чем $d_\pi(\text{A})$ орбитали. Отрицат. сверх-

(обзор)

416

X. 1990, N 15

сопряжение типа $\pi\gamma \rightarrow \sigma^*_{\text{AХ}}$, приводящее к образованию π -связи между атомами А и У, в частицах X_3AY носит определяющий характер, а вклад перекрывания $\pi\gamma \rightarrow d_{\pi}(\text{A})$ является вторичным. Однако d -орбитали поляризуют $\sigma^*_{\text{AХ}}$ орбитали. Они усиливают π_{AU} связывание и уменьшают $\sigma^*_{\text{AХ}}$ разрыхляющие взаимодействия и должны учитываться для получения качественно правильной картины. Прочность π_{AU} связи возрастает в ряду F_3SiF , F_3PO , F_3SN , F_3ClC (II), однако существование II, а также F_3IC и F_3TeC^- подвергнуто сомнению. Кроме того проанализирована природа связи в серии n -координир., содержащ. $8n$ валентных электронов, молекул (HF_2^- , BF_3 , ClO_4^- , F_4SO , F_5TeO^- , IF_6^+ , OXeF_6 и т. д.) и их «восстановленных» аналогов, имеющих одну или несколько неподеленных электронных пар у центр. атома (SF_4 , IF_6^- , ClF_3 и др.). Предложена классификация гипервалентных (и многих негипервалентных) соединений. Библ. 54. И. Н. Сенченя

лекс
лабо

SiF₄

(OM 36010)

1991

Bozek J. D., Bancroft G. M.,
et al.,

Фото-
декомп.
спектр.

Phys. Rev. A 1991, 43, N 7,
3597-3608.

Vibrational line structure
in the Si 2p ● photoelectron

Spectra of simple gaseous
molecules.



SiF₄ Ishikawa Mideaki, 1991
Fujima Kazumi, et al.,

J. Chem. Phys. 1991, 94,
No. C. 6740-6750.

(corr. ● SiMe₄; III)

SiF_4

Дм 36364

1991

12 Б1143. Спектр насыщенного поглощения SiF_4 в частотной области генерации CO_2 -лазера низкого давления / Иванов Э. И., Имхесин Х. Х., Крылов И. Р., Пазгалев А. С. // Оптика и спектроскопия.— 1991.— 71, № 5.— С. 754—757.— Рус.

Методом встречных волн во внеш. поглощающей ячейке получены спектры насыщ. поглощения газ. тетрафторида кремния на линиях $P(28) - P(40)$ полосы 9,4 мкм CO_2 -лазера. Ширина спектра на каждой из линий — (70—90) МГц. Ширина нелинейных резонансов — 300 кГц. Отношение амплитуды резонанса к шуму до 5000. Обнаружен ряд мультиплетов супертонкой структуры спектра, связанной с симметрией тетраэдра.

М.А.

X.1992, N 12

SiF₄

1992

117: 240123v The duodecet rule. Part 3. Fluoro species of the third period elements. Robinson, E. A. (Erindale Coll., Univ. Toronto, Mississauga, ON Can. L5L 1C6). *Can. J. Chem.* 1992, 70(6), 1696-705 (Eng). On the basis of the suggested new value of 54 pm for the single bond covalent radius of fluorine, the previously established duodecet rule for period 3 elements in mol. species with highly electroneg. ligands is extended to fluorides. For species such as SiF₄, (F₃Si)₂O, F₃SiNH₂, F₃PO, and PF₅ the obsd. bond lengths are consistent with significant partial double bonding involving all the ligands, including fluorine, and with a total of six electron pairs in the valence shell of the central atom. Empirical rules based on d/d_1 , the ratio of an obsd. bond length to the corresponding single bond length calcd. from the sum of covalent radii, are developed as a simple approx. guide to the extent of partial double bonding in bonds to third period elements. Bond lengths in species such as Al₂F₆, AlO₄³⁻, and Al(NH₂)₄⁺ are consistent with a duodecet rule.

СНУКНУРН
АРАМНУРН

(41) 



(all. опущен)

C.A. 1992, 117, N 24

SiF_4^+

1993

Falaleev A.G., Kovna V.I.,

исследо-
вание
глицерина-
содержащих.

Zh. Fiz. Khim. 1993,
67 (5), 987-9

(см. BF_3  $^+$; III)

28 SiF₄

1995

122: 199833q Free jet infrared spectroscopy of (²⁸SiF₄)₂ in the 10 μ m region. Urban, R.-D.; Takami, M. (Inst. Phys. Chem. Res., Saitama, Japan 351-01). *J. Chem. Phys.* 1995, 102(8), 3017-23 (Eng). The rotation-vibration spectra of ²⁸SiF₄ dimer were studied near the ν_3 band of monomer ²⁸SiF₄. A well-resolved parallel band was obsd. 17.5 cm⁻¹ below the monomer band origin. Two perpendicular bands, sepd. by 2.0 cm⁻¹ and located 4.3 cm⁻¹ above the origin for the lower component, show equidistant Q-branch peaks as only resolved lines. The obsd. band structure indicates that the 3-fold degeneracy of the vibrational motions in SiF₄ is all removed. A C_{2h} structure with a pair of SiF bonds in an antiparallel position is proposed.

См. также,
D.

C. A. 1995, 122, N 16.

1996

F: SiF₄-

P: 3

17B124. Сродство к электрону для фторидов кремния, SiF[n] (n=1-5). The electron affinities of the silicon fluorides SiF[n] (n=1-5) / King Rollin A., Mastryukov Vladimir S., Schaefer Henry F. (III) // J. Chem. Phys. - 1996. - 105, 16. - С. 6880-6886. - Англ.

Методом функционала плотности в различных приближениях исследовано электронное строение SiF[k] и SiF{-}[k], k=1-5. Приведены адиабатич. и вертикальное сродство к электрону для нейтральных систем, вертикальные энергии отщепления электрона для анионов, энергии диссоциации связей, гармонич. колебательные частоты. Библ. 35.

РМХ 1997

1996

F: SiF₄

P: 3

17B124. Сродство к электрону для фторидов кремния, SiF[n] (n=1-5). The electron affinities of the silicon fluorides SiF[n] (n=1-5) / King Rollin A., Mastryukov Vladimir S., Schaefer Henry F. (III) // J. Chem. Phys. - 1996. - 105, 16. - С. 6880-6886. - Англ.

Методом функционала плотности в различных приближениях исследовано электронное строение SiF[k] и SiF{-}[k], k=1-5. Приведены адиабатич. и вертикальное сродство к электрону для нейтральных систем, вертикальные энергии отщепления электрона для анионов, энергии диссоциации связей, гармонич. колебательные частоты. Библ. 35.

РМХ 1997

SiF₄

[Dm. 38762]

1997

Biehl H., Boyle K.J. et al.,

J. Chem. Phys., 1997,
M.A. 107(3), 720 - 729

SiF₄

Summary

1998

Silly

Zarkova L.; Petkov I et al.,

An approach to the calculation
of self consistent thermophysical
properties of scarcely
examined heavy gaseous halides.

J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 1998, 31, 805-813

F: SiF₄

P: 3

131:134914 Structure and Energetics of Group 14
(IV-A) Halides: A Compara Density Functional-
Pseudopotential Study. Escalante, Sigfrido; Vargas,
Rubicelia; Vela, Alberto (Departamento de Quimica
Inorganica Posgrado Fac de Quimica, Universidad
Nacional Autonoma de Mexico, Mexico D.F. 04510, M
J. Phys. Chem. A, 103(28), 5590-5601 (English) The
complete set of MX₂ and MX₄ (M = C, Si, Ge, Sn, Pb
and X = F, Cl, Br, group 14 halides are studied
with d. functional theory and quasirelativis
effective core potentials. To analyze the role of
d. inhomogeneities and asymptotic behavior of the
Kohn-Sham effective potential in these mols.,
following exchange-correlation energy functionals

?

C.A. 1999, 131

are tested: local, semi (generalized gradient), and hybrid functionals. For comparison, Hartree- results are also presented. Fully optimized geometries are in very good agreement with exptl. available data and with other high-level theor. cal. The energy differences assocd. with the dissocn. and disproportionation reactions are reported. Zero-point corrections and at. spin-orbit effects included in these reaction energies. The dissocn. energies predicted at Hartree-Fock level are underestimated, the local energy differences are overestimated, and both the semilocal and hybrid approaches provide the b ests. for these reaction energies. The disproportionation energies, whic commonly used to explore the relative stability of different at. valences a behavior that departs from that commonly known for reactions involving single atom: the local and semilocal disproportionation energies have ver similar values and follow the same trends.

F: SiF₄

P: 3

01m 40 015

1999

132:55070

Equilibrium structure of SiF₄.

Breidung, J.; Demaison, J.; Margules, L.; Thiel, W.
Winterthurerstrasse 190, Organisch-chemisches
Ins Universitat Zurich Zurich CH-8057, Switz.

Chem. Phys. Lett., 313(3,4), 713-717 (English)
1999 The equil. Si-F bond length in SiF₄ has been
calcd. ab initio at the MP2 and CCSD(T) levels using a
polarized valence quadruple .zeta. basis set. structure
has been also estd. using two different approx. methods
to corr ground state rotational const. B₀ reported by
Jorissen, et al., [L. Joris Prinz, W. A. Kreiner, Ch.
Wenger, G. Pierre, G. Magerl, W. Schupita, Can. Phys. 67
(1989) 532]. The re(Si-F) values obtained from these
different are in a narrow range 1.5516-1.5529 A and the
mean value is 1.5524 .+- . 0 A.

C.A. 2000, 132

1999

F: SiF₄

P: 3

131:263167 Experimental and theoretical studies
of the basicity and proton affinity of SiF₄ and the
structure of SiF₄H⁺. Ling, Y.; Milburn, R. K.;
Hopkinson, A. C.; Bohme, D. K. Department of
Chemistry and Centre for Research in Earth and
Space Science, York University Toronto, ON,
Can. J. Soc. Mass Spectrom., 10(9), 848-855
(English) 1999 A combined exptl. and theor.
approach has been employed to establish the
basicity and proton affinity of SiF₄ and the

structure of SiF_4H^+ . The k_i and energetics for the transfer of a proton between SiF_4 , N_2 , and Xe have explored exptl. in helium at 0.35 ± 0.02 torr and 297 ± 3 K with a selected-ion flow tube app. The results of equil. const. measurements are reported that provide a basicity and proton affinity for SiF_4 at $297 \pm 111.4 \pm 1.0$ and 117.7 ± 1.2 kcal mol $^{-1}$, resp. These values are more 2.5 kcal mol $^{-1}$ GB(SiF_4) GB(N_2) PA(N_2) PA(SiF_4). Ab initio MO computations MP4SDTQ(fc)/6-311++G(3df,3pd) using geometries from B3LYP/6-31+G(d,p) find value for PA(SiF_4) = 118.7 kcal mol $^{-1}$ that is in good agreement with expt. Also, the most stable structure of SiF_4H^+ is shown to correspond to a cation solvated by HF with a binding energy of 43.9 kcal mol $^{-1}$.

Support this structure is found in sep. SIFT collision induced dissocn. (CID) measurements that indicate exclusive loss of HF.

DA. 40 606

2000

F: SiF₄

P: 3

132:185674 The Scalar Relativistic Contribution
to the Atomization Energi CF, CF₄, and SiF₄.

Bauschlicher, Charles W. , Jr. NASA

Ames Research Center Moffett Field, CA 94035, USA

J. Phys. Chem. A, 104(11), 2281-2283

(English) 2000 The one-electron Douglas
Kroll (DK) approach and perturbation theory,
accounting for the mass-velocity and Darwin (MVD)
terms, are used to comp scalar relativistic
contribution to the atomization energies of CF,
CF₄, SiF₄. The difference between these two
approaches is studied as a functi basis set and
level of correlation treatment.

C. H. 2000, 132