Si – Br

7577

(AsH_3; AsD_3; $DSiCl_3$; $DSiBr_3$) 1936

Delfosse J.M.
Nature 1936, 137, 868

"Raman spectra of " heavy" arsine, silicochloroform and silicobromoform"

C.A., 1936, 5498[6]

$SiBr_3D$

10

$SiBr_2F_2$

Spitzer R.,
Howell W. J.,
Schomaker V.
J. Am. Chem. Soc.,
64, N1, 62

1942

стр-ра
мол-лы
методом
дифракции
электронов.

5755 a
1950

AlF_3, CaF_2, MgF_2, LiF, $CaCl_2$, AlF_3
(melts)

Sheridan J., Gordy R.
Phys. Rev., 1950, 79, 215

Microwave spectra and ...

$SiBrF_3$

5759

1957

SiF_3H, SiF_3Cl, SiF_3Br, $Si^{28}F_3CH_3$

(*)

Sheridan J., Cordy W.
J. Chem. Phys., 1951, 19, 965-970

The microwave spectra...

J

$SiBrF_3$

1953

5789

$SiCl_4$, $SiBr_4$, SiJ_4, $SiCl_2Br_2$, $SiCl_3Br$,
$SiClJ_3$, $SiCl_2J_2$, $SiCl_3J$,

Kakiuti Y.
Bull.Chem.Soc.Japan., 1953, 26, N 5,
260-261

The normal vibrations of some...

J

$SiBrCl_3$

$SiCl_3Br$

$SiClBr_3$

$SiCl_2Br_2$

ВР - 5483 - IV

1954

Schneider R., et al.

Chem. Listy, 48, 336.

и.и.

спектры

Coll. Czechosl. Chem.

Comm., 19, N 4, 653.

1958.

5780

$SiCl_4$, $SiFCl_3$, $SiBrCl_3$, $SiJCl_3$
(Ji, sil.post.)

Stokr J., Schneider B.
Chem.Listy, 1958, 52, N 6, 985-995

$SiBr_2Cl_3$

J

1963

8693

$SiH_2(CH_3)_2$, $Si(CH_3)_2F_2$, $Si(CH_3)_2Cl_2$,
$Si(CH_3)_2Br_2$, $SiCl_2Br_2$, SiD_2F_2

(sil.post., r)

Radhakrishnan M.
Z.phys.Chem. (DDR), 1963, 222, N 3-4,
211-216

Potential constants... $SiBr_2Cl_2$

J

M759 – IV

1965

SiH_3F; SiH_3Cl; SiH_3Br; SiH_3J;

SiD_3F; SiD_3Cl; SiD_3Br; SiD_3J; (√)

Bald D.F., Buttler M.J., McKean D.C.
Spectrochim.Acta, 1965, 21, N 3,
451-64

Frequency shifts from gas ...

J orig.
PX,1966,2 101

M 1165

1965

SiD_3H, SiH_3F, SiH_3J, SiF_3H, SiF_3D, $SiCl_3H$,

$SiBr_3H$, $SiBr_3Cl$, SiJ_3Cl, $SiCl_3Br$, $SiCl_3J$

([illegible])

Venkateswarly K., Devi V.M.,
Current sci (India), 1965, 34(12), 373-4
Mean amplitudes of vibrationi XY_3Z type of silicon compounds

CA., 1965, 63, N 9, 10843h

J

M 1191

1966

CH_3F, CD_3F, SiH_3F, SiD_3F (matrix room.)

X= F, Cl, Br, J, CH_3Cl, CD_3Cl, SiH_3Cl, SiD_3Cl, CH_3Br, CD_3Br, SiH_3Br, SiH_3J, SiD_3J, SiD_3Br, CH_3J, CD_3J

Pulay P., Torok F.

Acta Chim. Acad. Sci. Hung. 1966, 47(3), 273-9

Paratemer form of matrix F. II. Assignment with tho aid tho parameter form (short communication)

F

CA., 1966, 65, N 2, 1397g

J

$(SiBr_3)_2O$

1968

12 Б193. Колебательные спектры гексабромдисилоксана и гексабромдисилазана. Bürger Hans, Schulze Manfred. Die Schwingungsspektren von Hexabromdisiloxan und Hexabromdisilazan. «Z. Chem.», 1968, 8, № 7, 256—257 (нем.)

Исследованы ИК-спектры (33—4000 $см^{-1}$) и спектры КР жидких $Br_3SiOSiBr_3$ (I) и $Br_3SiNHSiBr_3$ (II). Спектры сопоставлены с ранее исследованными кол. спектрами $SiBr_4$ и $HSiBr_3$. Произведен расчет силовых постоянных I и II и дано отнесение полос сим. и асим. вал. кол. SiOSi, отнесены соответственно полосы 693,5 и 1094 $см^{-1}$; SiNHSi—726 и 955,5 $см^{-1}$. В области (315—530 $см^{-1}$) лежат вал. кол. SiBr, а в области ниже 230 $см^{-1}$—деф. кол. SiBr. Из различия спектров I и II в области вал. кол. SiBr сделан вывод о понижении локальной симметрии C_3 групп $SiBr_3$ в II. Анализ нормальных колебаний приводит к предположению что ниже 80 $см^{-1}$ для I и II должна лежать еще одна ненаблюдавшаяся фундаментальная частота.

А. Александров

ν_i, см. пост.

X · 1969 · 2

Si-Br

Maijs, L.

1968

(сверх) „Z. anorg. allgem. chem.",

293, №170, 1953.

jensovsky „Z. Chem." 2, 334, 1962;

3, 453, 1963.

(см Si-F, III)

BZ- XIV-625 1968

SiFBr3

м.в. спектр

72638g Microwave spectrum and structure of fluorotribromosilane and methyltribromosilane. Mitzlaff, M.; Holm, R.; Hartmann, Hermann (Univ. Frankfurt/Main, Frankfurt/M., Ger.). *Z. Naturforsch. A* 1968, 23(11), 1819–21 (Ger). Microwave absorption spectra (30–40 GHz.) were recorded for $SiFBr_3$ and $MeSiBr_3$. Si–Br bond lengths 2.171 and 2.175 A., and Br–Si–Br bond angles 111.36 and 111.09° were detd. for $SiFBr_3$ and $MeSiBr_3$, resp., by least sqs. anal. of the rotational consts. of the ^{79}Br and ^{81}Br species with assumed values 1.56, 1.90, 1.093 A., and 109.35° for bond lengths Si–F, Si–C, and C–H, and the H–C–H bond angle, resp. Measured and calcd. rotational consts. are tabulated. The $SiBr_3$ group has the same structure in $SiFBr_3$, $SiHBr_3$, and $MeSiBr_3$. A 1-kcal./mole barrier to internal rotation in $MeSiBr_3$ was detd. from the intensity ratios of the rotational lines of mols. in the torsional ground state to those of mols. in the 1st excited torsional state.

FBJG

C.A. 1969. 70. 16

ВУ-XIV-625 1968

SiFBr3

м.в. спектр, структура, V0

Ф, 1969. АД

4 Д353. **Микроволновый спектр и структура фтортрибромсилана и метилтрибромсилана.** Mitzlaff M., Holm R., Hartmann H. Mikrowellenspektrum und Struktur von Fluortribromsilan und Methyltribromsilan. «Z. Naturforsch.», 1968, 23a, № 11, 1819—1821 (нем.; рез. англ.)

В области 30—40 *Гц* исследованы микроволн. спектры молекул $SiFBr_3$ (I) и CH_3SiBr_3 (II). Определены структурные параметры d_{Si-Br}, равные 2,171±0,001 (для I) и 2,175±0,01 Å (для II) и углы Br—Si—Br, равные (111,36±0,15)° (для I) и (111,09±0,15)° (для II). Найден барьер внутреннего вращения $V_3 \approx 1$ *ккал/моль*.

X

БФ—XIV—625 1968

SiFBr3

Ab. reing.

Структуре

10 Б273. Микроволновый спектр и структура фтортрибромсилана и метилтрибромсилана. Mitzlaff M., Holm R., Hartmann H. Mikrowellenspektrum und Struktur von Fluortribromsilan und Methyltribromsilan. «Z. Naturforsch.», 1968, 23a, № 11, 1819—1821 (нем.; рез. англ.)

В диапазоне 30—40 *Ггц* исследованы вращательные спектры молекул $SiFBr_3$ (I), CH_3SiBr_3 (II) и их изотопич. разновидностей по Br. Определены значения вращательной постоянной B_0 и постоянных центробежного искажения D_J и D_{JK}. Из значений B_0 при предположении, что Si—F=1,56, Si—C=1,90, C—H=1,093 A и ∠HCH=109,35, определены длины связи Si—Br= =2,171±0,001 в **I**, 2,175±0,001 A в **II** и вал. угла ∠BrSiBr=111,36±0,15° в **I** и 111,09±0,15° в **II**. Барьер внутреннего вращения группы $SiBr_3$ $V_3 \approx 1$ *ккал/моль*.

М. Р. Алиев

+1

X.1969.10

X

$SiBr_3F$

$SiBr_2F_2$

SiF_3Br

Raman-спектр

1969

(107331b) Raman spectra of silicon fluorobromides. Dubois, Marie L.; Delhaye, Marie B.; Wallart, Francis (Lab. Spectrosc. Raman, Fac. Sci., Lille, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1969, 269(5), 260–2 (Fr). Si fluorobromides, prepd. by the reaction of $AlBr_3$ and Na^+ or Ba^{2+} fluorosilicates at 270°, were condensed in 2 fractions: 1 fraction at 20°, rich in $SiBr_4$ and $SiBr_3F$; and another fraction at −78°, rich in SiF_2Br_2 and SiF_3Br. By studying temp. dependence (room temp. to 77°K.) of the He-Ne laser-excited Raman spectra, and by considering changes predicted by symmetry changes on exchange of F and Br atoms, assignment of the fundamental frequencies of each of the 4 mols. was accomplished without isolating the compds. in pure form.

FBIF

C. A. 1969. 71. 22

$SiBrCl_3$

1971.

Aleshonkova, Yu. A.; et al

Dokl. Nauch-Tekh. Konf. Ivanov.

Chim. Tekh. Khim.-Tekhnol. Inst. 1971, 15-17.

(см. CCl_2Br_2; III)

$SiClBr_3$
$GeClBr_3$

1971.

Alochonkova, Yu.A.; et al

Dokl. Nauch-Tekh. Konf. Ivanov.

Khim.-Tekhnol. Inst. 1971, 15-17.

Синтез.
Свойства.

● (см. $CClBr_3$; III)

[Si-Hal] XIV-334 1971

$SiCl_3Br$

$SiCl_2Br_2$

$SiClBr_3$

Höfler F.

Z. Naturforsch., 26a (3), 547.

ν_i

M.H.

(см. SiF_4) III

40115.1275
Ch,Ph,TE,Ex-C

SiF_3Br.

29848

1973

Б-3030

Cradock Stephen, Ebsworth E.A.V., Whiteford R.Alastair. Photoelectron spectra of some simple fluorosilanes. "J. Chem. Soc. Dalton Trans.", 1973, N 22, 2401-2404 (англ.)

0022 ИНК

(см SiF_3H; III)

008 009 - 015

ВИНИТИ

1978

Si_2Br_6

Sahini V.E., et al

Rev. roum. chim., 1978,

cell.

23, N5, 643-9

noct.

(cell Si_2F_6) III

1978

Si_5Br_{10}
Si_6Br_{12}

12 Б235. **Колебательные спектры и силовые константы перхлорированных и пербромированных циклосиланов.** Hassler K., Kovar D., Hengge E. Schwingungsspektren und Kraftkonstanten perchlorierter und perbromierter Cyclosilane. «Spectrochim. acta», 1978, A34, № 12, 1199—1203 (нем.)

Исследованы ИК-спектры в области 50—700 $см^{-1}$ и спектры КР Si_5X_{10} (I) и Si_6X_{12} (II) (X=Cl, Br). Проведен расчет частот и силовых констант I и II с использованием модифицированного валентно-силового поля. Силовые константы связей (f) SiX и SiSi I и II сопоставлены с соотв-щими силовыми константами SiX_4 (III) и Si_2X_6 (IV). Показано, что f(SiX) и f(SiSi) в I и II уменьшаются по сравнению с константами дисиланов IV и остаются практич. неизменными при переходе от I к II: f(SiCl) (N/см)=3,11, 2,9, 2,6, 2,6; f(SiBr) (N/см=2,45, 2,3, 2,2, 2,25 в III, IV, I и II соотв., f(SiSi) (N/см)=2,4, 2,2, 2,2 (для хлорсиланов), 2,1, 1,85, 1,85 (для бромсиланов) в IV, I и II, соответственно.

Е. Б. Назарова

Сил. пост.

I.

Ж. 1979, N12

$SiBr_3Cl$ 1981

Aleshonkova Yu. A., Volkov N.V., et al.

ν_i, сим. Deposited Doc. 1981, VINITI 2717-81, 11pp.

колеб.

(см. CF_3Cl; III)

$SiCl_3Br$ 1981

Alekhonkova Yu. A.,
Volkov N. V., et al.

Vi, ell.
поел.

Deposited Doc. 1981,
VINITI 2717-81, 11 pp.

(см. CF_3 ее; III)

$SiBr_3F$ 1981

SiF_3Br Aleshonkova Yu. A.,

Volkov N. V., et al.

Vi, сим.

носц.

Deposited Doc. 1981,

VINITI 2717-81, 11pp.

(См. CF_3Cl; III)

SiH_2FBr 1982

SiH_2ClBr Bureš M., Černý Č.,

Pavlíček J.

Di, см. пост.

Chem. listy, 1982, <u>76</u>, N4, 375-388.

(см. SiH_4; <u>III</u>)

$(SiBr_2)_5$

1982

Hörig M., et al.

ЭМ. носит.

ΔE.

Monatsh. Chem., 1982, 113, N2, 129–138.

(см. $(SiCl_2)_6$, III)

$(SiBr_2)_4$

1982

Mönig M., et al.

Monatsh. Chem.,

1982, 113, N2, 129–

–138.

см. $(SiCl_2)_6$; III

см. новей.

ΔF.

$(SiBr_2)_6$

1982

Hönig M., et al.

Monatsh. Chem.,

1982, 113, N2, 129-

-138.

Спец. масса.

ΔE.

(см. $(SiCl_2)_6$, III)

$SiBr_3Cl$ 1983

Dhanalakshmi A.,
Komala P.

Vi;

Bull. cl. sci. Acad. roy. Belg., 1983, 69, N2, 110-116.

(см. CF_3H; III)

$SiBr_3O$ 1983

Dhanalakshmi A.,
Kamala P.

Bull. cl. sci. Acad. roy.
Belg., 1983, 69, n2, 110-116.

(cm. CF_3H; III)

$Si_{4-x}Br_x$ (ОП. 20534) 1984

Aron J., Burnell J., Ford T.A.,

J. Mol. Struct., 1984, 110, N3-4, 361-379.

И.Л.

От. 22296 1985

$Br_3Si-SiBr_3$ и др.

Stölevik R., Bakken P.,

J. Mol. Struct., 1985,

124, N 1-2, 133-142.

расчет структуры, вращат. барьера, сил. пост.

SiHzBr | Dm · 26612 | 1986

Dobbs K.D., Mehre W.J.,

u.n. J. Compcut. Chem., 1986,
7, N 3, 359–378.

$SiHD_2Br$ 1986

Duncan J. L., Marvie J. L., et al.

ИК спектр

J. Mol. Struct. 1986, 145 (3-4), 225-42.

(сер. Si_2HD_5; III)

$Br_2HSi-SiHBr_2$ (от. 25234) 1986

молекул. структура, электроно-граф. исследован.

Thomassen H., Hagen K., Stølevik R., et al.,

J. Mol. St

SiF_3Br 1987

4 Л203. Микроволновый спектр, структура, постоянные квадрупольной связи и дипольный момент молекулы бромтрифторсилана. Microwave spectrum, structure, quadrupole coupling constants, and dipole moment of bromotrifluorosilane. Cox A. Peter, Ewart Ian C., Gayton Tim R. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 125, № 1, 76—90 (англ.)

В диапазоне 8—40 ГГц исследованы МВ-спектры четырех изотопных форм молекулы SiF_3Br. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leqslant 12$ и их квадрупольная СТС в основном колебательном состоянии и в первых возбужденных состояниях вырожденных колебаний ν_5 и ν_6. Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных, q-постоянных l-удвоения, постоянных квадрупольной связи ядер ^{79}Br (344 МГц) и ^{81}Br (287 МГц) и дипольного момента (0,835 ед. Дебая). Для $^{28}SiF_3{}^{79}Br$ $B_0 = 1550{,}06$ МГц; $D_J = 0{,}166$, $D_{JK} = 1{,}245$ кГц; $q_5 = 0{,}30$, $q_6 = 1{,}17$ МГц.

М. Р. Алиев

М.П.

ф. 1988, 18, N 4

SiF3Br

1987

7 Б1349. Микроволновый спектр, структура, постоянные квадрупольного взаимодействия и дипольный момент бромтрифторсилана. Microwave spectrum, structure, quadrupole coupling constants, and dipole moment of bromotrifluorosilane. Cox A. P., Ewart I. C., Gayton T. R. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, **125**, № 1, 76—90 (англ.)

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре с использованием РЧ—МВ двойного резонанса в обл. частот 12—38 гГц измерены вращат. спектры 4 изотопич. образцов бромтрифторсилана $^{28}SiF_3{}^{79}Br$, $^{28}SiF_3{}^{81}Br$, $^{30}SiF_3{}^{79}Br$ и $^{30}SiF_3{}^{81}Br$ в основном и двух возбужденных колебат. состояниях. Анализ МВ-данных позволил существенно уточнить значения молек. постоянных, опубликованных ранее. Существенно уточнены значения ^{79}Br- и ^{81}Br-ядерных квадрупольных постоянных $eQq = 344{,}0(1)$ и $287{,}4(1)$ МГц, соотв. Определены полный дипольный момент $\mu = 0{,}835(7)\,D$ и структурные параметры $r(SiBr) = 2{,}1559(37)$ А,

Уб спектр; структура, Y, м.л.

Х. 1988, 19, N 7

$r(SiF) = 1{,}5591(52)$ Å, $\angle FSiB = 110{,}38(19)°$, $\angle FSiF = 108{,}55(19)°$.

С. Н. Мурзин

SiH_2DBr
$SiHD_2Br$

1987

Weaving J. S.,
Ford T. A.

J. Mol. Struct.,
1987, 161, 245–
– 264.

колебаний.
вол.чисел,
теор. расчёт,
распределение.
потенциал.
энергия.

BrF_3Si^+ | om.30490 | 1988

(SiF_3Br^+) Jacox M.E.,

Ti, Pi; J. Phys. and Chem. Ref. Data, 1988, 17, N2, 460.

F-Li-Cl | Om. 33714 | 1990

Binnewies M.,
Schnöckel H.,

I, перио д. данные

Chem. Rev. 1990, 90,
N1, 321-330.

SixOyBr2 (OM 31803) 1990

Korvica A., Kinowicz,

Z anorg. allg. Chem.
1990, 587, 157-166.

Über die Bildung von
Polyoxoboraten beim

Reaktion von Salz (K=Ca, Ba) mit Säure

Br_3SiSiH_3
$Br_2HSiSiHBr_2$

1991

115: 377087f IR and Raman spectra of some bromodisilanes and iododisilanes. Hassler, K.; Poeschl, M. (Inst. Anorg. Chem., T. U. Graz, A-8010 Graz, Austria). *Spectrochim. Acta, Part A* 1991, 47A(3-4), 439-44 (Ger). IR and Raman spectra of the disilanes X_3SiSiH_3, $X_2HSiSiHX_2$ (X = Br, I) and IH_2SiSiH_2I and their deuterated derivs. are reported and assigned. The measured H/D isotope shifts were used for a normal coordinate anal.

ИК - и Ра - ман. спектры,
Di

(41) ⊗

$I_2HSiSiHI_2$
IH_2SiSiH_2I

C.A. 1991, 115, N 4

H_2SiBr Оп 35983 1991

24 Б1343. Инфракрасный спектр высокого разрешения $H_3Si^{79}Br$ в области от 21 до 233 $см^{-1}$. Фундаментальные частоты ν_1 и ν_4. The high-resolution infrared spectrum of $H_3Si^{79}Br$ from 2100 to 2330 cm^{-1}. The ν_1 and ν_4 fundamentals / Lattanzi F., di Lauro C., Bürger H. // Mol. Phys.— 1991.— 72, № 3.— С. 575—592. — Англ.

Исследован фурье-ИК-спектр высокого разрешения $H_3{}^{28}Si^{79}Br$ в области фундаментальных полос ν_1 и ν_4 (21—233 $см^{-1}$). В спектре наблюдался ряд ангармонич. резонансов. Отмечено наличие нескольких сильных колебательно-вращат. возмущений, особенно в области низких значений K. Объяснены нек-рые аномалии вращат. структуры спектра. С помощью МНК с использованием итерац. процедуры найдены значения колебательно-вращат. параметров. Б. С. Авербух

М.П.

Х. 1991, №24

Si_2H_5Br 1993

McLean D.C., McPhail A.L., et al.,

(LK) Spectrochim. Acta, Part A 1993, 49A(8), 1079-94.

(cell. Si_2H_5Cl; III)

$X_3SiSiHX_2$, X_3SiSiH_2X 1994

$X = Br, J$

120: 230246k Vibrational spectra and normal coordinate analysis of penta- and tetrahalodisilanes $X_3SiSiHX_2$ and X_3SiSiH_2X, X = Br and I. Hassler, K. (Inst. Anorg. Chem., TU, A-8010 Graz, Austria). *Spectrochim. Acta, Part A* 1994, 50A(2), 243-9 (Ger). The IR and Raman vibrational spectra of the title compds. were measured and assigned with the aid of normal coordinate analyses. SiSi-force consts. were calcd. They increase with increasing electronegativity of the halogen X.

UK, CKP, сил. пост., Di

$J_3SiSiHJ_2$, J_3SiSiH_2J

(H)

C.A. 1994, 120, N 18

1995

F: Si-H-Br
P: 3
14Б167. Симметрично замещенные силаны (XH[2]C)[2]SiH[2], (XH[2]C)[2]SiX[2], (X[2]HC)[2]SiH[2] и (X[2]HC)[2]SiX[2] с X=F, Cl, или Br. Конформационные энергии, структура и торсионные силовые постоянные, полученные методом молекулярной механики. Symmetrically substituted silanes: (XH[2]C)[2]SiH[2], (XH[2]C)[2]SiX[2], (X[2]HC)[2]SiH[2] and (X[2]HC)[2]SiX[2] with X=F, Cl or Br. Conformational energies, structures and torsional force constants obtained by molecular-mechanics calculations / Johansen Tore H., Stolevik Reidar [Journal of Molecular Structure] // J. Mol. Struct. - 1995. - 372, N 2 - 3. - С. 275-284. - Англ.

PRIX 1997

1995

F: Si3H2Br6
P: 3

14Б168. 1,1,1,3,3,3-Гексабромтрисилан. Структура и конформация, определенные методами газовой электронографии, колебательной спектроскопии, а также с использованием расчетов неэмпирическим методом МО и методом молекулярной механики. 1,1,1,3,3,3-Hexabromotrisilane: Structure and conformation determined by gas-phase electron diffraction, ab initio molecular orbital and molecular mechanics calculations, and vibrational spectroscopy / Johansen Tore H., Hagen Kolbjorn, Stolevik Reidar, Ernst Margot, Hassler Karl [Journal of Molecular Structure] // J. Mol. Struct. - 1995. - 372, N 2 - 3. - С. 161-172. - Англ.

РЖХ 1997

$Si_3(Br_3)_3$

1995

124: 98233e **The 1,1,1,3,3,3-Hexabromotrisilane: structure and conformation determined by gas-phase electron diffraction, ab initio molecular orbital and molecular mechanics calculations, and vibrational spectroscopy.** Johansen, Tore H.; Hagen, Kolbjorn; Stolevik, Reidar; Ernst, Margot; Hassler, Karl (Department of Chemistry, AVH, University of Trondheim, N-7055 Trondheim, Norway). *J. Mol. Struct.* 1995, 372(2-3), 161-72 (Eng). The mol. structure of 1,1,1,3,3,3-hexabromotrisilane at 140°C was studied using gas-phase electron diffraction. The two $SiBr_3$ groups are both staggered relative to the central SiH_2 group, but a twist of about 13° of the $SiBr_3$ groups relative to the exactly staggered position reduces the symmetry to C_2. From the vibrational spectra a distinction between C_2 or C_{2v} symmetry is possible, and point group C_{2v} can be ruled out by arguments based on the selection rules. Bond lengths (r_g) and valence angles ($\angle_a$) are: r(Si-Si) = 2.344(18)Å, r(Si-Br) = 2.205(4)Å ∠SiSiSi = 112.9(19)°, ∠(BrSiBr) = 109.6(6)° (av. BrSiBr angle), and ∠(SiSiBr) = 109.3(6)° (av. SiSiBr angle). Error limits are given as 2σ where σ includes ests. of uncertainties in voltage/height measurements and correlation in the exptl. data. The IR and Raman vibrational spectra are assigned using normal coordinate calcns. as well as ab initio calcns.; harmonic force consts. are reported. In addn. mol. mechanics and ab initio (RHF/SBK and RHF/STO-3G) calcns. were performed to assist the structural anal. and to compare with the diffraction results.

M. group.

C.A. 1996, 124, N8

Si_2H_5Br
Si_2D_5Br

1995

McKean D. C.,
McPhail A. L. et al.
Spectrochim. Acta.
Part A 1995, 51A
(2), 215–35.

ИК, СКР
спектр. газ.,
Vi

(спектр. Si_2H_5Cl; III)

D_3SiBr 1997

126: 322559s **Millimeter–wave and high resolution infrared spectra of D_3SiBr.** Buerger, H.; Cosleou, J.; Demaison, J.; Mkadmi, E. B.; Paplewski, M. (Anorganische Chemie, Univ.–Gesamthochschule Wuppertal, D–42097 Wuppertal, Germany). *J. Mol. Spectrosc.* **1997**, 182(1), 205–214 (Eng), Academic. The mm–wave (mmw) spectra of $D_3Si^{79}Br$ and $D_3Si^{81}Br$ in the vibrational ground state were recorded at 150–650 GHz. The mmw spectra of $D_3Si^{79}Br$ in the $\nu_3 = 1$ and $\nu_6 = 1$ states were studied in some limited spectral ranges. FTIR spectra of monoisotopic $D_3Si^{79}Br$ covering the bands $\nu_3(a_1, 418.650\ cm^{-1})$, $\nu_6(e, 464.254\ cm^{-1})$, $\nu_5(e, 685.367\ cm^{-1})$, and $\nu_2(a_1, 686.373\ cm^{-1})$ were recorded with resolns. of $(2.5–3.5) \times 10^{-3}\ cm^{-1}$. J–dependent ground state parameters up to sextic terms were detd. from the mmw spectra, and A_0 =1,.425263(12) cm^{-1} for $D_3Si_{79}Br$ was derived from fits of several $(\Delta k - \Delta l) = \pm 3$ interactions obsd. in the ν_2/ν_5 band system. While ν_3 and ν_6 interact weakly by Coriolis x, y resonance, the Coriolis resonance of the almost degenerate ν_2 and ν_6 bands (~6000 IR lines) supplemented by mmw data and of the ν_2 and ν_5 bands (~8000 lines) were obtained with root–mean–square deviations of 0.28 and $0.37 \times 10^{-3}\ cm^{-1}$ for the IR data. Some hot bands of ν_3 were detected and analyzed.

(нет спектр)

C. A. 1997, 126, N24

SiFCl

1997

127: 363628c **Detection of a new halosilylene, SiFCl, by microwave spectroscopy.** Fujitake, Masaharu; Hirota, Eizi (The Institute for Molecular Science, Okazaki, Japan 444). *J. Mol. Struct.* 1997, 413–414, 21–30 (Eng), Elsevier. The rotational spectrum of SiFCl in the ground vibronic state was obsd. at 340–356 GHz. The anal. of the obsd. spectrum, which consisted of both a–type and b–type transitions, yielded rotational consts. and centrifugal distortion consts. of the ^{35}Cl and ^{37}Cl isotopic species in the ground state. The harmonic force field of SiFCl was derived from the centrifugal distortion consts. and the inertial defects detd. for both isotopic species and was used to calc. the vibrational frequencies of the mol. The av. structure in the ground vibrational state is $r_z(Si-F) = 1.5960$ Å, $r_z(Si-Cl) = 2.0714$ Å, $\theta_z(F-Si-Cl) = 100.85°$ and $\delta r_z(Si-Cl)$ [$^{35}Cl-^{37}Cl$ difference] = 0.000065 Å by using the obsd. rotational consts. and the harmonic force field derived.

Мб спектр, структурн. параметры

C. A. 1997, 127, N 26

$BrLiO$
Br_2LiO

1998

Alikhani, M.E; et al.,

стр-ра, Di, теор. расч

J. Comput. Chem. 1998, 19 (11), 1205-14.

(сл. ClLiO; III).

1999

F: HBrSi2
P: 3
132:127981 Effect of substituents on the structure and stability of the disilyne isomers.
Bei, Yi-Ling; Feng, Sheng-Yu Department of Chemistry, Shandong University Jinan 250100, Peop. Rep. China Huaxue Xuebao, 57(12), 1306-
1312 (Chinese) 1999 The 6-31G** level of quantum chem. ab initio calcns. was used in the theor. research on the structure and stability of

C.A. 2000, 132

substituted disilynes a their isomers HYSi2 and Y2Si2 (Y = F, Cl, Br, Li). The effect of substit on the stability of various isomers, esp. that of Si-Si bond, is discusse detail. The results show that among various substituted disilyne isomers disilenylidene structures and double-bridged structures have the lowest e and can be exptl. detectable, while the classical linear structures have energy and are thus unstable.

1999

F: Br2Si2
P: 3
132:127981 Effect of substituents on the structure and stability of the disilyne isomers.
Bei, Yi-Ling; Feng, Sheng-Yu Department of Chemistry, Shandong University Jinan 250100, Peop. Rep. China Huaxue Xuebao, 57(12), 1306-
1312 (Chinese) 1999 The 6-31G** level of quantum chem. ab initio calcns. was used in the theor.

C.A. 2000, 132

research on the structure and stability of substituted disilynes a their isomers HYSi2 and Y2Si2 (Y = F, Cl, Br, Li). The effect of substit on the stability of various isomers, esp. that of Si-Si bond, is discusse detail. The results show that among various substituted disilyne isomers disilenylidene structures and double-bridged structures have the lowest e and can be exptl. detectable, while the classical linear structures have energy and are thus unstable.

1999

F: Si2Br6
P: 3 131:65144 Studies on vibrational spectra and normal coordinate analysis of hexabromodisilane.
Xu, Xue-Jun; Xue, Ying; Xie, Dai-Qian; Yan, Guo-Sen (Dep. Chem., Sichuan Univ., Chengdu 610064, Peop. Rep. China). Gaodeng Xuexiao Huaxue Xuebao, 20(6), 941-944 (Chinese) 1999 The optimized geometries, IR intensities, Raman activities and fundamental vibrational frequencies and PEDs are reported for D3d symmetr of Si2Br8 using HF/6-31G and B3LYP/6-31G method. The predicted value of Si-Si torsional vibrational frequency is given. A

normal coordinate anal was carried out and HF force field is scaled with scale factor of 0.9 pertinent to all vibrational modes. The av. error between the predicted frequencies obtained from HF/6-31G SQM force field and the obsd. fundamental vibrational frequencies is 9.4 cm-1; the av. error between th predicted value from unrefined DFT force field and the obsd. result is 8. cm-1. The fundamental vibrational frequencies obtained from DFT calcn. with B3LYP/6-31G.bul. are in good agreement with the exptl. results.

$SiBr_4^+$

2000

134: 170314h **Observation of different ionic state of $SiBr_4$ – photoelectron spectroscopic and theoretical studies.** Sun, Zheng; Zheng, Shi-jun; Wang, Dian-xun (State Key Lab. for Structural Chemistry of Unstable and Stable Species, Institutes of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing, Peop. Rep. China 100080). *Hua-xue Xuebao* 2000, 58(12), 1645–1648 (Ch), Kexue Chubanshe. The Photoelectron Spectroscopy (PES) and different ionic state of $SiBr_4$ were reported. The ionic states of $SiBr_4^+$ are X $^2T_2$, A $^2T_1$, B ^2E, C $^2T_2$ resp. The adiabatic ionization potential of the compd. is I_a(X $^2T_2$ – X $^1A_1$) = 10.532 eV. A frequency of 450 ± 30 cm^{-1} was obsd. in the PES band of X $^2T_2$ ionic state. The assignment of the PE spectrum was performed with the help of theor. calcns. and band characters. Obvious spin–orbital coupling split was obsd. in X $^2T_2$ and A $^2T_1$ states, and the splitting space are 0.27 and 0.53 eV. The comparison of different calcns. shows that the outer valence Green's function method gives good results in ionization potential calcns.

$X^2\Pi_2$, $A^2\Pi$, B^2E, C^2T_2

(Y)

C.A. 2001, 134, N12