

Silly

1258

(SiCl_4)

1930

Bhagavantam S.

Indian J. Physics 1930, 5,
35-48

"Raman spectra of some
elements and simple compounds"

C.A., 1930, 5231



SiCl₄

10

1151

1930

W (CCl₄, SiCl₄)

Schaefer C.

Z. Physik 1930, 60, 586-94
"Raman effect and infra-red
spectrum ...

Silly

G.A., 1930, 4707

SiCl_4 (r) Bp-7054-IV 1938

Wi: Herman R.C.

J. Chem. Phys., 1938, 6, 7

Sich,

K. W. F. Kohlbrausch

11938

Der Sinekhal-Raman-Effects
Ergänzungsband 1931-1932

(Verlag, Julius Springer,
Berlin 1938) 530 p.

zusatz: 424, 150, 221 u 608 cm^{-1}

Silly
Si Br4

M. F. Delwaulle
F. Francois

1944

Compt. Rend. 219, 335.

Paman cuapp Silly in
Si Br4.

~~May 10 - 1944~~

SiCl₄

Брибер В. Герцберг
Многоармиево

11945

табл. 39 газ-газ-газ и
кннн Коаврауна 1938.

$$\nu_1 = 424 \text{ см}^{-1} \quad \nu_3 = 608 \text{ см}^{-1}$$

$$\nu_2 = 150 \text{ см}^{-1} \quad \nu_4 = 221 \text{ см}^{-1}$$

Silly

salvage corp

Livingston R.L., Brockway L.O. 1946

JACS, 68, 719

$d_{Si-Ce} = 2.01 \pm 0.02$

Chemical Td gas separation

Spitzer R., Howell W.J., Schomacher V,

JACS, 64, 62, 1942

Sicily

Bq - 5778 - IV 1947

Vought R.H.

(7)

"Phys. Rev"

1947, 71 93-101.

Silly

Aihara

11949₂

S. Ch. Soc. Japan
P. h. Ch. Sect. 1949, 70, 384-7

Usuepene zasood, jenuoculu.
Silly Gram. C. bus. T-279⁹/₁
18.8 19:26.

Siccl₄

Goubeau J., Warneke E

1949

Z. anorg. u. allgem. Chem. ~~174~~ 138, 233 1921

u 3a 1949-2003.

SiCl₄ Kuma Shimanouchi 1949
семь у Гурбурга

- Shimanouchi T.

Si, cur. noc. J. Chem. Phys., 1949
17(10) 848-51.

SiCl₄

Simanovich T

1949

S. Chem. Phys. 17, 848

Норм. колебания многоатом-
ных молекул, рассчитанные
по методу Уэй-Васкелу.

III. Таблица силовых
постоянных сравнение
расч. и наблюд. частот.

Вейс IV, 41; II, 165

(Cl₂, Cl₂,
Cl₂, Cl₂, Cl₂)

и т.д.

5791

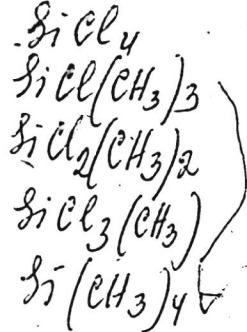
1950

SiCl_4 , SiHCl_3 , SiHBr_3 , SiBr_4 , GeCl_4 ,
 GeHCl_3 , GeHBr_3 , GeBr_4 ($\downarrow$)

Delwaulle M.L., Frangois F.
Compt.rend., 1950, 230, 743-745

The structure of ...

J



Курса Шимановичи Т. 1950
лето у Цурбуре.

Шимановичи Т
Тзучига Я, Микава Я

J. Chem. Phys, 1950, 18 (9),
1306

(Di)

Raman spectra and Normal
Coordinate Treatment of ...

(+2) ☒

SiCl₄

M. L. Delwaille

11952

J. Phys. Chem. 53, 355

Здесь лишь приводятся значения

$\nu_1 = 150$, $\nu_2 = 221$, $\nu_3 = 424$, $\nu_4 = 610$

найденные в работе автора
судя в Спектр. гайд. 219, 335, 1444

Вейс III, 31

Cuesp
Sicily

Delwaille, Buisset, Delhaye

1952

YACS 1952, 74, 5768

Кубоводы пухляки (з. арх.) мисс.
раман селфов мис, фан, мис. замислен
мисс и миссис.

SiCl_4

раман
спектр

Мурата Н.,

1952

J. Chem. Phys., 20 (7), 1183-84

Раман спектр SiCl_4 , и др.

5781

1953

SiCl_4 , SiClCH_3 , $\text{SiCl}_2(\text{CH}_3)_2$,
 $\text{SiCl}(\text{CH}_3)_3$, $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ (v.)

Smith A.L.

J. Chem. Phys., 1953, 21, 1997-2004

The infrared spectra of ...

J

5789

1953

SiCl₄, SiBr₄, SiJ₄, SiCl₂Br₂,

SiCl₃Br, SiClJ₃, SiCl₂J₂, SiCl₃J,

Kakiuti Y.

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

The normal vibrations of some..

J

спуск
и рана
смерь.

M. L. Delvaule n. sp. 1954

J. phys. Radium 15, 206-8.

Raman effect n. спуск
ноль

$\text{SiX}_{4-n}\text{Y}_n$ ($n=0, 1, 2, 3, 4$)

$\text{GeX}_{4-n}\text{Y}_n$

SnX_4 .

$\text{X} = \text{Br}$ Y = Cl

$\text{X} = \text{I}$ Y = Cl

pure is unrefined.

CA 48

80 48 e

hydroge. gal Silly calc. range

$$V_1 = 2150$$

$$V_2 = 221$$

$$V_3 = 424$$

$$V_4 = 610$$

SiCl₄

BP-5783-IV

1954

(dr. U.
curepno.)

Schneider B, et al.
Chem. listy, 48, 336.

SiCl₄

Schneider B., Pliva J. 1954
Chem. listy, 48, 336

Coll. Czechosl. Chem. Comm.,
19, N4, 653

Колебательное спектры
некоторых галогенированных
соединений. Т. Динамизм и по-
тенци. постоянные и тер-
модин. св-ва в-в ряда

SiCl_nBr_{4-n}

n=0,1,2,3,4



м. н.
т. оп.

11-5788-обз

$$J = J_0 J_0 J_c = 642.3 \cdot 10^{-40}$$

Радикал ρ Овн.

$$424 \text{ (A.) } 0.05 \quad 423$$

$$150 \text{ E } 6/2 \quad 150$$

$$610 \text{ F}_2 \quad 6/2 \quad 606$$

$$221 \text{ F}_2 \quad 6/2 \quad 220$$

$$\alpha_{\text{size}} = 2.01 \pm 0.02$$

$$S_i = 228.03$$

$$Q = 35.457$$

Корреляция $\text{cm}^2 \cdot 10^6$

$$K(q, Q) = 5.5$$

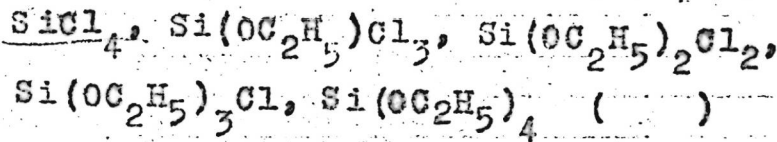
$$K(q_{ce}, q_{ce}) = 0.10$$

$$K(q_{ce}, y_{cece}) = 0.80$$

$$K(y_{ce}, y_{ce}) = 0.86$$

$$K(y_{cece}, y_{cece}) = -0.20$$

1956



Murata, Kabai

J.Chem.Soc.Japan, Pure Chem.Sec.,
 1956; 77, N 10, 1543-46

Spectra ...

SiCl_4

1956

6089

$\text{Si}(\text{OCH}_3)_3\text{Cl}$, $\text{Si}(\text{OCH}_3)_2\text{Cl}_2$, $\text{Si}(\text{OCH}_3)_3\text{Cl}$,
 SiCl_4 (V_i)

Мурата, Каваи, Йокоо

Ж. Учен. Общ. Япон., Лига Учен. Общ., 1956,
 II, п 6, 893-896

Спектры комбинационного ...

3

5779

1956

SiCl_4 , SiBr_4 , SnCl_4 (sil.post.)

Sundaram S.

Sci.and Culture, 1956, 21, N 12, 739

Sichy

Bq-3684-VI

1956

Venkateswarlu K.
et al.

"Z. phys. chem." (DDR)
1956, 212 N3-4, 145-8

Potential...

Clly
S. Clly.

u gp.
reg. no. 1957.
Cust. no. 1957.

Long S.A., Spencer T.V., Waters D.N.,
Woodward L.A. 1957

Proc. Roy. Soc. (L.) 1957, A240, 499.

инженер и паромасиентр мор. и ХУ,
(в зручии)
(Clly, Cbrly, S. Clly, S. Brly, Gclly, G. Brly, Sclly,
и S. Brly.)

CH 1957. 51, 152 43i

	CCl ₄	CBr ₄	SiCl ₄	SiBr ₄	GeCl ₄	GeBr ₄	SnCl ₄	SnBr ₄
V ₁ (A ₁)	458	267	424	219	396	235	366	220
V ₂ (E)	218	123	150	90	134	75	104	64
V ₃ (F ₂)	776	672	608	487	453	327	409	279
V ₄ (F ₂)	314	183	221	137	172	112	134	88

no Terysery

	CCl ₄	SiCl ₄
K	1,76	2,60
H	0,080	0,041
F	0,656	0,291
F'	0,087	0,058

10⁵ g/cm³

2c.cel, 77 A
2sice = 2,02 A

Proc. Roy. Soc.

A223, 130(7.11)

J. Ch. P. 17219

Эмпирические данные по работе Симановича 1949.

Метод абсолютного определения температуры 1954.

С.С.Ч.
С.С.Ч.
и др.

Диприграт Р. (Дионера) .. 1958

Ann. Phys. 1958, 3, 15-6, 377-423.

Изучение комбинац. рассеяния
в туннельном диоде. Метод

интерференции, сфокусированный с
микроскопом. Силы возб.

Результаты исследования

РМФ, 1959
19, 21, 22

контуры линии коллоидных меридианов
колебаний линии BeCl_2 , CCl_4 , SiCl_4 , и SnCl_4
Получено, гр. гр. линии. Состав из 3х
компонентов, соэф. колебаниям молекулы с
различными изотопами хлора. Оценено
влияние ангстрем, французия, Вандер Ваальс
сил на уширение линии.

(1958)

SiCl₄

Pistorius C. W. F. T.

J. Ch. Ph., 1958, 22, N3, 514.

Cum. wocum. XY, microvasgous. new - in
 fdd fd fdd-fdd' fd-fdd' fdd-fdd'

SiF ₄	0,497	5,794	2,536	2,923	1,328
------------------	-------	-------	-------	-------	-------

			-0,106	0,519	0,125 -
--	--	--	--------	-------	---------

SiCl ₄	0,399	5,575	1,216	1,653	0,748
-------------------	-------	-------	-------	-------	-------

			-0,029	0,296	0,070
--	--	--	--------	-------	-------

J. Ch. Ph., 1957, 21, 965

$$f d - f d d' = 0,296$$

$$f d d - f d d' = 0,070$$

$$f d - f d d = 0,226$$

SiCl₄ | | M. Stork, B. Schneider. | 1958

усп.
панам
смерщ
и амб. н. 6.
Chem. Listy 1958, 52, 985-85

Коробан. смерщ. немарфел
мариозаменимеллер шано
исследован рашан смерщ SiCl₄,
SiFCl₃, SiBrCl₃, SiI₃Cl₃ и и.к. смерщ
CA 53, 496. SiFCl₃, SiBrCl₃, SiI₃Cl₃ в рт. 450-2000 см.

Раман спектр (усл-51. с камерой $f=80-0$ и генератором $3,4A/m$ в рт. 4500Å) Возмущение линии $H\gamma 4358\text{Å}$
 В спектре SiCl₄ найд. всевозможные изомерные
 максимумы $\nu_1=424$; $\nu_2=150$, $\nu_4=221$ и слабый
 максимум при 596 см^{-1} (ν_3) и 614 см^{-1} (ν_3')
 $Si-Cl = 2,01$ экв. энергии. [12] в SiCl₄

SiCl₄ $K_{\nu_1} = 0,341$; $K_{\nu_2 \nu_2} = 0,014$; $K_{\nu_4 \nu_4} = 0,0538$
 Livingston, Brockway 1946.

$K_{\nu_3 \nu_3'} = 0,022$; $K_{\nu_3 \nu_3' \nu_3 \nu_3'} = 0,0171$ гинсман.
 по числ. пог. 10^6 см^{-1} $\bullet$ $F_{\nu_3 \nu_3' \nu_3 \nu_3'} = -1,50$. [пог. $6 \cdot 10^6\text{ гинсман}$]
 $F(\nu_1) = 3,45$; $F_{\nu_2 \nu_2} = -0,25$; $F_{\nu_4 \nu_4} = -2,05$; $F_{\nu_3 \nu_3'} = 12,59$.

S. U.

J. Stark B. Schneider
Я. Шток Б. Шнейдер.

1958.

Chemische Listy, ~~52~~, 56, 985

Синдр колебания кинетический
гидролизный слой.

II Синдр колебания трихлорэтилен.
Ланов.

Рамансиндр: ИСП. камера f=800
диам. 9,4 мм при 4500 Å.

И. К. Синдр Перкин-Элмер 12-С КВЗ.

$$S:Cl_4 \text{ (размешивание)} \cdot \begin{matrix} \bar{v}_1 & 424 \\ \bar{v}_2 & 150 \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} \bar{v}_3 & 596 \\ \bar{v}_3 & 614 \end{matrix}$$

сильное
максимум
в области
разрешения

$$\bar{v}_4 221. \quad \text{Delwaille} \quad \begin{matrix} \bar{v}_1=424 & \bar{v}_2=150 \\ \bar{v}_3=610 & \bar{v}_4=221. \end{matrix}$$

$$\frac{S:Cl_4}{10^{+5} \text{ г/моль}} \cdot$$

$$K_{\nu_{ce}} = 0,341 \quad \nu(\nu_{ce} \nu_{ce}') = 0,114$$

$$K_{\nu_x} = - \quad K(\nu_{ce} \nu_x) = -$$

$$K_{\nu_{ce} \nu_{ce}'} = 0,538$$

$$K_{\nu_{ce} \nu_{ce'x}} = -$$

$$\nu_{SiCl_4} = 2,01 \text{ Å}$$

$$\nu_{cece'} = 0,341$$

$$\nu(\nu_x \nu_{ce'x}) = -$$

$$\nu(\nu_{ce'x}) = -$$

$$K(\nu_{ce'x} \nu_{ce'ce'}) = 0,171$$

$$\nu_{cece'x} = -$$

$$K(\nu_{ce'x} \nu_{ce'}) = -$$

10⁶ cm/gun

Steel

$$F_{(q_{ce})} = 3,45 ; F_{(q_x)} = - ; F_{(q_{ce} q_{ce'})} = -0,25$$

$$F_{(q_{ce} q_x)} = - ; F_{(q_x q_{ce} q_{ce'})} = -2,05 ; F_{(q_{ce} q_{ce'})} = -$$

$$F_{(q_{ce} q_{ce'})} = 12,53 ; F_{(q_x q_{ce} q_x)} = -$$

$$F_{(q_{ce} q_x)} = - ; F_{(q_{ce} q_{ce'} q_{ce'})} = -1,50 ;$$

$$F_{(q_{ce} q_{ce'} q_{ce'})} = - \bullet ; F_{(q_{ce} q_x q_{ce'})} = -$$

в единицах 10^6 см^{-2}

$$K_{qce} = 5,73$$

$$K_{qceqce'} = 0,19$$

$$K_{qceqcece'} = 0,91$$

$$K_{qcecece'} = 1,6$$

$$K_{qcecece'qcece''} = 0,29.$$

S. P. H.

SiCl₄

Bep - 6566 - iv

1958

Woodward L. A.

"Trans Farad. Soc"

(C. n; vi)

1958, 54, n 9, 1271-79.

CCl₄
SiCl₄
GeCl₄
SnCl₄

1961

10B40. Интенсивности комбинационного рассеяния: колебательные амплитуды и силовые поля тетрагалондов элементов четвертой группы. Chantry G. W., Woodward L. A. Raman intensities: vibrational amplitudes and force fields of tetrahalides of group 4B. «Trans. Faraday Soc.», 1960, 56, № 8, 1110—1116 (англ.).—Рассчитана матрица преобразования L от координат симметрии к норм. координатам молекул CCl₄, SiCl₄, GeCl₄, SnCl₄, GeBr₄. Поскольку ряд матричных элементов l_{ik} очень слабо зависит от выбранного типа силового поля, в качестве критерия правильности расчета использовалось условие наилучшего совпадения эксперим. и рассчитанных интенсивностей комб. рас. (зависящих существенно от l_{ik}). Сравнение потенциала валентных сил с учетом недиагональных констант с потенциалом Юри—Бредли показывает, что первый дает лучшие результаты в отношении интенсивности и среднеквадратичных отклонений атомов, измеренных методом дифракции электронов.

Е. Никитин

Р. 10B40. 1961

Sily

Ковалев И. Ф.

1960

XIII совещание по спектро-
скопии, Ленинград

Исследования колебатель-
ных спектров метрико-
метрико- и диметрико-
метрико-

☒

Si Chy

II-2304

1960

Mikawa Y.

J. Chem. Soc, Japan,

81, 1512-19 (1960)
A102

and W. H. H. H.

ESTD 1911

27th -
6-7-60

J. F

Silly

BQ-A14

1961

Yan R. J.; et al.

Koroban.
oneup,
empoen.

Silanes; Vibrat.
Assignment ...

1961, 34 N10, 1485-



Silly Bp - 7753-IV 1962

Freeman D.E., et al
(min) Z. Phys. chem. Neue Folge
1962, 35 N8, 335-42

Silly

1962

9 Д66. Учет внутримолекулярного напряжения в некоторых простых валентно-силовых полях. Freeman D. E., Wilson M. Kent. The inclusion of intramolecular tension in certain simple valence force fields. «Z. phys. Chem.» (BRD), 1962, 35, № 4—6, 335—342 (англ.)

Для тетраэдрич. молекул типа XY_4 и XY_3Z одна из естественных координат выражается через остальные. Если эта зависимость не первого порядка, нельзя отбросить линейных членов в разложении потенц. энергии молекулы. Показано, что учет этих членов дает дополнительную силовую постоянную, отражающую влияние внутримолекулярного напряжения. Применяя простое валентно-силовое поле и валентно-силовое поле с учетом внутримолекулярного напряжения, методом Вильсона рассчитаны частоты для молекул $GeCl_4$, $SiCl_4$, $GeHCl_3$, $GeDCl_3$, $SiHCl_3$, $SiOCl_3$. В последнем случае наблюдается некоторое повышение точности расчета. У. Зирнит

ф. 1963-9

SiCl_4

8 Д53. Исследование колебательных спектров тетра-
хлор-, метилтрихлор- и диметилдихлорсилана. К о в а -
лев И. Ф. В сб. «Физ. пробл. спектроскопии. Т. I.»
М.: АН СССР, 1962, 360—363

Рассчитаны частоты и формы норм. колебаний моле-
кул SiCl_4 , CH_3SiCl_3 и $(\text{CH}_3)_2\text{SiCl}_2$. Вычислены также
силовые коэф. и коэф. влияния. При расчете силовых
коэф. и других характеристик указанных соединений
использовались комбинационные спектры и применя-
лась методика Волькенштейна, Степанова, Ельяшевича
и Маянца. Расчет силовых коэф. производился по ме-
тоду вариации одновременно для всех рассматриваемых
соединений, с учетом результатов исследования метил-
силанов (РЖФиз, 1960, № 10, 27940). Вычисленные
значения частот хорошо согласуются с эксперименталь-
ными. Отмечается некоторое различие в силовых полях
групп $\text{Si}-\text{CH}_3$ в метилсиланах и их хлорпроизводных.
В соответствии с этим ν -частоты в $(\text{CH}_3)_2\text{SiCl}_2$ повы-
шаются, δ - и ρ -частоты несколько понижаются. Такой
частотный сдвиг автор связывает с повышением элек-
троотрицательности атома Si вследствие влияния на
него атома Cl.

ф. 1963-89

1962

Вир-10119-IV



SiCl₂SiCl₄

4 Д128. Средние квадратичные амплитуды и силовые постоянные тетрахлорида кремния и дихлорида серы. Morino Yonezo, Murata Yoshitada, Ito Tetsuzo, Nakamura Junko. Mean square amplitudes and force constants of silicon tetrachloride and sulfur dichloride. «J. Phys. Soc. Japan», 1962, 17, Suppl. B-2, 37—40. Discuss., 40—41 (англ.)

Описана усовершенствованная методика изучения дифракции электронов на молекулах газа. Эта методика применена для определения межатомных расстояний в молекулах тетрахлорида кремния и дихлорида серы, для которых получены следующие значения: $\text{SiCl} = 2,017 \pm 0,005$ А; $\text{Cl} \dots \text{Cl} = 3,292 \pm 0,008$ А; $\text{S}-\text{Cl} = 2,006 \pm 0,004$ А; $\text{Cl} \dots \text{Cl} = 3,143 \pm 0,009$ А. Определены также средние квадратичные амплитуды l_e колебаний этих

Сам. метод.

ф. 1963. 4А

11-7875-12
вср-57875-12

расстояний. В спектре комб. рас. газообразного SiCl_4 измерены частоты 425; 149; 621; 220 см^{-1} . Эти частоты вместе со значениями I_e использованы для определения системы силовых постоянных молекулы SiCl_4 в координатах симметрии и в естественных колебательных координатах. Эти силовые постоянные сопоставлены с силовыми постоянными других тетраэдрич. молекул. Из ИК-спектра SCl_2 определены частоты колебаний, равные 520 ± 20 , 202 ± 7 , 524 ± 5 см^{-1} . Эти частоты вместе со значениями I_e использованы для определения силовых постоянных в упомянутых выше координатах и в системе Юри.— Брэдли.

М. Ковнер

1962

SiCl₄
SCl₂

Mean square amplitudes and force constants of silicon tetrachloride and sulfur dichloride. Yonezo Morino, Yoshitada Murata, Tetsuzo Ito, and Junko Nakamura (Univ. Tokyo). *J. Phys. Soc. Japan* 17, Suppl. B-II, 37-41(1962). The at. distances of the SiCl₄ and SCl₂ mols. and their root-mean-square amplitudes of thermal vibration were measured by the sector-microphotometer method of electron diffraction. The general force consts. were calcd. by using the fundamental frequencies together with the mean-square amplitudes thus obtained. The fundamental frequencies of the free mols. were obtained for SiCl₄ from the Raman spectrum in the gaseous state and for SCl₂ from the infrared spectrum in the gaseous state. CA

L. Nag

11-5785-11
Bep

C.A. 1963. 58.1

33e

1962

SiX₄

Shimanouchi Takehiko

X-излучен

Internat. Sympos. Molec. Struct. and

Spectrosc. Tokyo, 1962, S.I., S.A.,
СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ.

C2I6/I-C2I6/8

см. Сху

1962

(Si-C)

Si-H

mequm
cbgr

The determination of silicon-carbon and silicon-hydrogen bond dissociation energies by electron impact. W. C. Steele, L. D. Nichols, and F. G. A. Stone (Harvard Univ.). *J. Am. Chem. Soc.* 84, 4441-5(1962). Appearance potentials of selected ions in the mass spectra of silane, tri- and tetrachlorosilane and the methyl-, ethyl-, isopropyl-, and *tert*-butylsilanes, and trichlorosilanes were measured. The Si-C bond dissocn. energies in the organosilanes were calcd., the results being, in general, higher than the C-C bond dissocn. energies in the corresponding alkanes. A definite dependence on the nature of the alkyl group is observed. Si-H bond dissocn. energies in silane and SiHCl_3 are 94 ± 2 and 93 ± 4 kcal./mole, resp. The Si-C bond dissocn. energy in SiCl_4 is calcd. to be 106 ± 4 kcal./mole. CA

C.A. 1963. 58. 11
10743h

+1



SiCl_4

Radhakrishnan M.

1962

Curdene
Hof.

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

Поисковые работы по постоянным
некоторых соединений Si
типа X_2Y_4 .

BR-8692-IV



X.1963.23

Sci. Cl. 4

| BQ - 9686 - IV | 1963

(K_p , ΔH)

Yshino T.
Matsumoto A.

Techn. Repts. Osaka
Univ., 1963, 130ct,
487-93.

Silly книга Шимановских 1963
лет у купца

Шимановский Т.

суд. нот. Pure Appl. Chem;
1963, 7 (1), 131-45



Si Cl₄

Shimomouchi T.

1963

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

Force constants of small molecules.

(see CCl₄)

C.A. 1963. 59. 12

13447 et

SiX₄

X = Cl, Br

SiCl₄

9 Д81. Средние амплитуды колебаний: некоторые пирамидальные и тетраэдрические молекулы типа XY₃ и XY₄. Venkateswarlu K., Rajalakshmi K. V., Miss, Thanalakshmi R., Miss. Mean amplitudes of vibration: some pyramidal XY₃ and tetrahedral XY₄ molecules. «Proc. Indian Acad. Sci.», 1963, A58, № 5, 290—295 (англ.) 1963

Проведен расчет симметризованных матриц средних квадратов амплитуд и величин средних квадратов амплитуд валентных и деформационных колебаний и изменений расстояний между несвязанными атомами, а также, в некоторых случаях, средних амплитуд для молекул пирамидального типа F-, Cl- и Br-производных As, и тетраэдрич. типа Cl- и Br-производных Si и Sn. При расчетах использовались значения колебательных частот, взятые из таблиц (Landolt-Börnstein. «Atom and Molecular Physik». Springer verlag, Berlin, 1951), и матрицы кинетич. энергии, взятые из работ Сандарама (РЖФиз, 1960, № 9, 22931) и Писториуса (РЖФиз, 1958, № 9, 21692). Расчет выполнен для т-ры 298° К. Результаты табулированы. В. Зубов

ф. 1964. 9А



SiCl₄

Чархеев О.П.,
Дейкина М.Е.

1964

вопл.
стр-ра

[A-385]

ж. структур. химии,
1964, 5, № 6, 924.

● (Сил. Стр-осл. пер.)
(Сил. РВСл-осл.)
стр.

SiCl_4

Cyrin S. Z., Bruenoll Z. 1964
и др.

Bull. Soc. chim. belg., 73, N1-2, 5-
-22.

[A-622]

Среднеквадратичные амплитуды колебаний и ряд физических характеристик нейтральных молекул типа XCl_4 . (см. SiCl_4)

SiCl₄

1964

X-ray investigation of molecular liquids. V. P. Klochkov and A. F. Skryshevskii (State Univ., Kiev). *Ukr. Fiz. Zh.* 9(4), 420-8(1964). An x-ray investigation of SiCl₄, MeSiHCl₂, EtSiCl₃, PhSiCl₃, and Si(OEt)₄, with scintillation recording of the intensity curves, yielded the basis for calcg. the electron d. distribution functions. A temp. increase results in an increase of the intensity at small scattering angles, in a redn. and broadening of the 1st max., and in its shift towards the smaller scattering angles. A model of the SiCl₄ mol. is constructed, based on previously detd. interat. distances, valence angles, and van der Waals radii. The configuration of the MeSiHCl₂ mol. is close to a tetrahedron, with valence angles CSiCl = 115°, ClSiCl = 110°, and bond lengths Si-C = 1.85 Å. and Si-Cl = 2.08 Å. The distances between nonbonded atoms are Cl-Cl = 3.15 Å. and C-Cl = 3.27 Å. Centers of mols. are 6.82 Å. apart. The Si(OEt)₄ mol. configuration is also nearly tetrahedral, with

C. A. 1964 C. N. 7 7832 C.



the valence angle $\text{OSiO} = 112\text{--}115^\circ$ and lengths of bonds $\text{C-O} = 1.42 \text{ \AA}$, $\text{C-C} = 1.54 \text{ \AA}$, and $\text{Si-O} = 1.66 \text{ \AA}$. Interat. distances are $\text{O}\dots\text{O} = 2.80 \text{ \AA}$ and $\text{Si}\dots\text{C} = 3.17 \text{ \AA}$. The shortest distance between atoms of neighboring mols. is $6.90 \text{ \AA}$. The configuration of the EtSiCl_3 mol. as well is nearly tetrahedral, with a 110° Si valence angle and bond lengths $\text{C-C} = 1.54 \text{ \AA}$, $\text{Si-C} = 1.85 \text{ \AA}$, and $\text{Si-Cl} = 2.08 \text{ \AA}$. The interat. distances are $\text{C}\dots\text{Cl} = 3.10 \text{ \AA}$ and $\text{Cl}\dots\text{Cl} = 3.37 \text{ \AA}$. Centers of mols. are $6.85 \text{ \AA}$ apart. The law of additivity fails in the calcn. of the bond lengths because of the strongly ionic character of the Si bonds ($\text{Si-O } 50\%$, $\text{Si-C } 12\%$, and $\text{Si-Cl } 30\%$). The mol. packing in the liquids is discussed.

Alexandre Fuchs

SiCl₄

Nagarajan G.

1964

71-5876-10
Bp - 9789-10

Bull. Soc. chim. Belg.,
73, N9-10, 768

Средние асимметричные ко-
лебательные спектры метри-
ческих молекул типа
X₂Y₂. VIII. Температурно-
зависимое кривое.

(см. SiF₄) III

SiCl_4

Силловые
пог.

↓
i

ВФР - 9834 - LV

1964

1 Д49. Потенциальные постоянные некоторых молекул типа XY_4 . Radhakrishnan M. Potential constants of some XY_4 type molecules. «Z. phys. Chem.», (BRD), 1964, 41, № 3—4, 197—200 (англ.)

Приводится таблица частот колебаний молекул XCl_4 ($\text{X} = \text{Si, Ge, Al, Ti, Sn, Zr, Pb, Hf}$) и длин связей в этих молекулах. По этим данным вычислены 5 силовых постоянных в естественных колебательных координатах каждой молекулы. Они сопоставлены с силовыми постоянными системы Юри — Брэдли. М. Ковнер

Ф. 1965. 170



BP-9834-1V

1964

XY₄
(сироб.
но ет)

Potential constants of some XY₄ type molecules. M. Radhakrishnan (Annamalai Univ., Annamalainagar, India). *Z. Physik. Chem. (Frankfurt)* 41(3/4), 197-200(1964)(in English). Theoretical. The potential constns. were evaluated for some XY₄ type mols., viz., the tetrachlorides of Si, Ge, Al, Ti, Sn, Zr, Pb, Hf, using a general quadratic potential energy function including the nonbonded forces and applying Wilson's group theoretical method. Potential constants of some XY₄-type molecules and ions. *Ibid.* 201-4. With the same method, the potential constns. of SO₄²⁻, ClO₄⁻, PO₄³⁻, SiO₄⁴⁻, CrO₄²⁻, OsO₄²⁻, SeO₄²⁻, and IO₄⁻ were evaluated. Friedrich Epstein

8 SiCl₄, GeCl₄, AlCl₃, TiCl₄, SnCl₄, ZrCl₄,
PbCl₄, HfCl₄

C.A. 1964 C/NC 64/29



SiCl_4 Freeman D.E., Wilson M.K. 1965

Spectrochim. acta, 21, N10, 1825

Transferable force fields for
chlorinated SiH_4 & GeH_4 .



Silly

Ommuck 523 | 1965

Max. Root.

Mean-square amplitudes and force constants of tetrahedral molecules. II. Silicon tetrachloride. Yonezo Morino and Yoshitada Murata (Univ. Tokyo). *Bull. Chem. Soc. Japan* 38(1), 104-13(1965)(Eng); cf. *CA* 54, 16052e. The at. distances and mean-sq. amplitudes of SiCl_4 were detd. by the sector-microphotometer method. The quadratic force consts. of the potential function were detd. by combining these amplitudes with the Raman vibrational frequencies of the gaseous state.

Naola V. Watson

C.A. 1965.63.2
1332

Bq - 21841 - IV

SrCl₂

A. N. Ryan. Diss. Abstr. 26, n7, 3656.

[1966]

определен-
(анализирован
в vac. glass)

SrCl₂ был обнаружен в карбате при-
меси в анализируемом образце BaCl₂.
Мног. цифровых и аналитич. данных
SrCl₂ определены методом ион. вза-
имодействия с BaCl₂. Найден:

$$r(\text{Sr}-\text{Cl}) = 2,090 \pm 0,0046$$

$$r(\text{Ca}-\text{Cl}) = 3,293 \pm 0,0118$$

$$l(\text{Sr}-\text{Cl}) = 0,0526 \pm 0,0068$$

$$l(\text{Ca}-\text{Cl}) = 0,0863 \pm 0,0098$$

SiCl_4

Shimanouchi T. et al. 1966

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

anal. 1
noctm
Bp-M 1629-10

Force constants of CF_4 ,
 SiF_4 , BF_3 , CH_4 , SiH_4 , NH_3
and PH_3

(see CF_4)

Silby

Griffiths J. S.,
Rao G. - H.

1967

спектр

J. Chem. Phys., 46, n 5, 1679.

Характеристики нового
фотоэлектрического метода
оптической спектроскопии
II. Приложение к лазерной

спектроскопии комбинационного
растяжения.

(см. HSCl_3) III

SiCl_4

Müller A.,
Fadini A.

1967

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

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

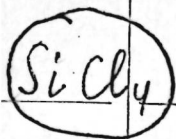
(см. BF_4^-)

Sicly Bep-A 704-IV 1967

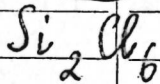
Genons W. H.
cur. net. Graham J. D.

Spectrochim. Acta
1967, A-23, N3, 732-34.

1968



Bürger H., Falius H.

Z. anorgan. und allgem.
Chem., 363, n 1-2, 24Vi,
см. котр.Комбинированные силиконы
и силоксановые коэффициенты
 PS_4^{3-} , $\text{P}_2\text{S}_6^{4-}$ и изомер-
ных молекул SiCl_4
и SiCl_6 (см. PS_4^{3-}) III

1968

SiCl₄

6 Д328. ИК-спектры и силовые постоянные тетра-хлоридов: SiCl₄, GeCl₄, SnCl₄. Bürger H., Ruoff A. Infrarotspektren und Kraftkonstanten der Tetrachloride SiCl₄, GeCl₄ und SnCl₄. «Spectrochim. acta», 1968, A24, № 11, 1863—1867 (нем.; рез. англ.)

Получены ИК-спектры газообразных SiCl₄, GeCl₄, SnCl₄, TiCl₄. Исследованы контуры полос колебаний ν_3 и ν_4 . Для SiCl₄, GeCl₄ и SnCl₄ определены постоянные корриолисова взаимодействия, и с их помощью рассчитана валентная силовая постоянная связи — f_r и постоянная взаимодействия двух связей. Найдено: $f_r(\text{SiCl}) = 3,102$; $f_r(\text{GeCl}) = 2,890$; $f_r(\text{SnCl}) = 2,661$ мгн/Å . Значения силовых постоянных хорошо согласуются с данными других методов. Библ. 12. Л. Д. Щерба

сил. пост.

оп. 1969. 6 д

+2

X

1968

-SiCl₄силовые
коэфф.из.

7 Б254. Инфракрасные спектры и ~~силовые коэффи-~~
циенты тетрахлоридов SiCl₄, GeCl₄ и SnCl₄. B ü r -
ger H., Ru off A. Infrarotspektren und Kraftkonstanten
der Tetrachloride SiCl₄, GeCl₄ und SnCl₄. «Spectrochim.
acta», 1968, A24, № 11, 1863—1867 (нем.; рез. англ.)

Исследованы ИК-спектры газ. SiCl₄, GeCl₄ и SnCl₄.
Из величины интервала между *P*- и *R*-ветвями неразре-
щенного контура полосы ν_4 определены значения по-
стоянной корiolисового взаимодействия $\zeta_4 = -0,230 \pm$
 $\pm 0,05$ (SiCl₄), $0,104 \pm 0,05$ (GeCl₄) и $0,347 \pm 0,05$ (SnCl₄).
Из опытных значений частот основных колебаний и по-
стоянной ζ_4 вычислены силовые коэф. наиболее общего
силового поля этих молекул. Для валентного силового
коэф. связей найдены значения $f_r = 3,102$ (SiCl₄),
2,890 (GeCl₄) и 2,661 мдн/А (SnCl₄). М. Р. Алнев

X. 1969. 7

X

1968

SiCl₄

(111663n) Infrared spectra and force constants of silicon tetrachloride, germanium tetrachloride, and tin tetrachloride. Buerger, H.; Ruoff, A. (Tech. Hoch. Braunschweig, Brunswick, Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A*. 1968, 24(11), 1863-7 (Ger). The ir fundamentals ν_3 and ν_4 of SiCl₄, GeCl₄, SnCl₄, and ~~Si~~Cl₄ were recorded. ξ values were calcd. from the well resolved band contours of ν_4 . They served to compute the stretching force consts. SiCl 3.102, GeCl 2.890, and SnCl 2.661 millidynes/A.

RCSQ

ν_3 u ν_4 ,
calcd. waven.

+2

C.A. 1968. 69. 26

X

Silly

1968

De Alti G.,
Galasso V., Bigotto A.

конедан.
амониз

Corsi e semin. chim. CNR
e FG, n. 14, 46-47.

(all. Silly) III

III II

(SiCl_4)

SiCl_3

SiCl_2

~~А~~

оп. 1969. 3Г

ВР - XIV - 603 1968

3 Г68. Образование отрицательных ионов из SiCl_4 и органических соединений хлористого кремния электронным ударом. Jäger K., Henglein A. Die Bildung negativer Ionen aus SiCl_4 und organischen Siliciumchloriden durch Elektronenstoß. «Z. Naturforsch.», 1968, 23a, № 8, 1122—1127 (нем.; рез. англ.)

Путем использования ионного источника Фокса измерены потенциалы появления и получены кривые эффективности ионизации отрицат. ионов, образованных в SiCl_4 , CH_3SiCl_3 , $(\text{CH}_3)_2\text{SiCl}_2$, $(\text{CH}_3)_3\text{SiCl}$, $\text{C}_2\text{H}_5\text{SiCl}_3$ и $\text{C}_6\text{H}_5\text{SiCl}_3$ электронным ударом. Помимо некоторых осколочных ионов, в SiCl_4 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{SiCl}_3$ и $\text{C}_6\text{H}_5\text{SiCl}_3$ наблюдались отрицат. молекулярные ионы. Найдено, что элек-

+2



тронное сродство радикала SiCl_3 почти равно электрон-
ному сродству атома Cl , а электронное сродство SiCl_2
превышает 2,5 эв. В смеси SF_6 и кремниевых соединений
имеют место процессы диссоциативного захвата элект-
рона от SF_6^- (напр. $\text{SF}_6^- + \text{SiCl}_4 \rightarrow \text{Cl}^- + \text{SiCl}_3 + \text{SF}_6$).
Делается вывод о том, что в этих процессах электрон
в SF_6^- ведет себя как свободный электрон с нулевой
кинетич. энергией. Наблюдались также различные реак-
ции между ионами O^- и соединениями кремния.

Резюме

SiCl₄

UK.
chemp

King S.T.

J. Chem. Phys., 49(3),
1321.

(see. CH₃Cl) III

1968

1968

SiChy

Medina A.
Morcillo y.

Di

An. fis. Real soc. esp.
fis y quim. 1968, 64,
Nº-8, 257-261

(Acc. Chy) III

SiCl_4

Г. К. Са.

15 Б266. Инфракрасный спектр, постоянные кориолисового взаимодействия, средние амплитуды и эффект сокращения молекулы SiCl_4 . Peacock C. J., Müller A., Kebabcioğlu R. The infrared spectrum, Coriolis coupling, force constants, mean amplitudes and shrinkage effect for SiCl_4 . «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 27, № 1—4, 351—357 (англ.)

Исследован ИК-спектр газ. SiCl_4 . Из величины интервала между P - и R -ветвями полосы ν_4 вычислена постоянная кориолисового взаимодействия $\xi_{44} = -0,221 \pm \pm 0,027$. Это значение ξ_{44} вместе с частотами колебаний $\nu_1 = 425$, $\nu_2 = 149$, $\nu_3 = 619$ и $\nu_4 = 221 \text{ см}^{-1}$ использовано для определения силовых коэф. наиболее общего силового поля SiCl_4 . Найденный набор силовых коэф. сопоставлен с результатами др. авторов, использовавших приближенные силовые поля. Вычислены также формы колебаний, распределение потенциальной энергии колебаний по внутренним колебательным координатам, средне-квадратичные амплитуды колебаний, величина эффекта сокращения (при $t = 0$, 298 и 500° K) и термодинамич. функции SiCl_4 при t -рах 200—2000° K.

М. Р. Алиев

X. 1969. 15

(+1) (II)

(X)

1968

399-2014-XIX

SiCl₄

-J_i

и.и.

†

ф. 1969. 7А

7 Д330. ИК-спектр, кориолисово взаимодействие, силовые постоянные, средние амплитуды и эффект сжатия SiCl₄. Peacock C. J., Müller A., Kebabcioglu R. The infrared spectrum, Coriolis coupling, force constants, mean amplitudes and shrinkage effect for SiCl₄. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 27, № 1-4, 351-357 (англ.)

Получены спектры газообразного четыреххлористого кремния при t-ре 37°С в области основных колебаний ν_3 и ν_4 . Полоса колебания ν_3 простая, в то время, как у полосы ν_4 наблюдается структура, отнесенная к P-, Q- и R-ветвям. Из расстояния между P- и R-ветвями получена постоянная кориолисова взаимодействия $\zeta_{44} = -0,221 \pm 0,024$. Определены средние амплитуды колебаний, вычислена величина эффекта сжатия (δ) и набор силовых постоянных для молекулы SiCl₄. При расчетах не учтена ангармоничность колебаний. Вычислен ряд термодинамич. ф-ций четыреххлористого кремния в приближении идеального газа. Библ. 10. М. В. Тонков

1969
XIV
14.09.69
ВФ-20.44

BQP-1792-XIV 1969

SiCl₄(rb.) Levin Y.W.

Spectrochim. acta,

Part A, 1969, 25, ~6,

1157.

(see. see) II

BCl_4 } (recom. exp, U_0)
 SiCl_4 }

1969

XIV-9428

Ryan R. R., Hedberg K.,
J. Chem. Phys., 1969, 50, N11,
4986-45

10

(see B_2Cl_4) III

Si Cl₄

Green J.C. et al.

1970

(9)

Phil. Trans. Roy. Soc.
London, A 268 (1184),
111.

● (Calc. CCl₄) III

Silly

Wendling E.
Mahmoudi S.

1970

cur. n.

C. r. Acad. Sci., Ser. C
1970, 24(1), 5-8



(Cur. CF₄) III

Silly

Wendling &,
Mahmoudi S.

1970

сп. кв.
земли.
соб.

Rev. Chim. Miner,
1970, 4, 6, 1007



1971

SiCl₄

Bassett P. J.
Lloyd J. R.

J. Chem. Soc. 1971, A,
14, 641-5

(C₆H₆ CCl₄)_{III}

Silly

10m. 19795

1971

P-M

Clark R. J. H., Willis C. J.,

KP4

Inorg. Chem., 1971, 10,

31. Examples

N 6, 1118-1126.

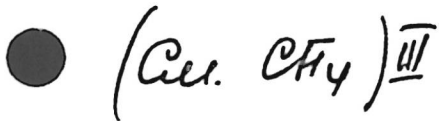
SiCl₄

Clark R.Y.,
Rippon D.M.

1971

Vi

Chem. Commun.,
1971, ~20, 1295.



Silly

Bp - 950 - XIV 1941
Dele - Debois M. L.
Wallart F.

Vi

C. R. Acad. Sci. Ser. B.
1941, 242, 18, 1059.

(Ces. Si - Kal) IV
cecece.

194

9 Д298. — Силовые постоянные тетрагалогенидов кремния и расчет колебаний хлорбромсиликатов $\text{SiCl}_n\text{Br}_{4-n}$.
 Höfler Friedrich. Kraftkonstanten der Silicium-tetrahalogenide und Schwingungsberechnungen an Chlorbromsilanen $\text{SiCl}_n\text{Br}_{4-n}$. «Z. Naturforsch.», 1971, 26 a, № 3, 547—550 (нем.)

С помощью различных способов оценки силовых полей SiF_4 и SiCl_4 получены величины силовых постоянных для SiBr_4 и SiI_4 . В расчете основных колебаний SiCl_3Br , SiCl_2Br_2 и SiClBr_3 использованы силовые постоянные, определенные для SiBr_4 и SiCl_4 , которые либо не корректировались, либо усреднялись, либо были взяты с соответствующей поправкой. По спектрам комб. рас. SiClBr_3 показано, что в согласии с расчетом, ν_6 имеет величину 161 см^{-1} . Резюме

См. также SiF_4

Ф. 1971. 9Д

4

X

1971

SilCl₄

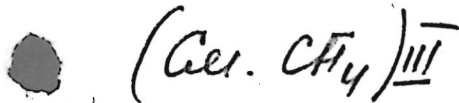
Lloyd D. L.,
Bassett P. Y.

Y,

J. Chem. Soc.,

proposed.
cyclic

A 1971, 4, 641



Sicly

Wedding Ed,

1941

Mahmoudi S.

сест.

ностр.

Bull. Soc. chim. France,

1941, n1, 3-12



(Сест. Сты) III

Сест. ност. об.

	Cen. uocT (mduh/K)				Часов. кол. (cei-1)				Sept
	1	2	3	4	V1	V2	V3	V4	
сиды (82)					424	150	608	231	
<u>I</u> A	2889	0,1894			341,9	164,9	643,1	191,5	5040
<u>II</u> A	3,116	0,2631			386,2	112,2	630,9	239,0	3700
<u>III</u> A	2,539	0,3257		-0,0809	428,9	139,5	605,4	225,3	159
<u>IV</u> A	2,614	0,0649	0,2975		426,8	158,5	606,6	213,2	144
<u>V</u> A	2,623	0,0734	0,1477		426,8	160,6	606,6	211,5	213
<u>VII</u>	2,548	0,0393	0,2942	-0,0547					
<u>VI</u> A	2,607	0,1856	0,1434		423,9	153,9	608,1	218,3	22,4
<u>VIII</u>	2,588	0,1367	0,1459	0,0394					

Silly

Wendling & et al

1971

Bull. Soc. chim.

cc. n.

France, 1941, n° 1,

3883.

(cc. ccl) III

30510.6038

Ch, Ph, TE, MGU

SiCl₄ (chem. proc.)
41125 *

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 MX_4 (M - group IV element, X = F, Cl, Br, or I). см.прод.

857

859

861

0868

НИИХ

ВИНИТИ

30510.6038.

Ch, Ph, TET, MGU

41125

прод .

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

(англ.)

0868 дик

857 859

201

ВИНИТИ

1972

SiCl₄

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

Adv. Raman Spectr.,

1972, I, 493-6

I₂

Romane.
Rocm.



(see CF₄; 11)

Silly

ommuch *4-478

1972

min

Clark R.J. Rippon D.H.

"J. Mol. Spectroc."

1972, 44, 113, 479-503.

● (cur. CF₄; III)

SiCl₄

1972.

Lazarev, R.N.

"Chem. Phys. Lett." 1972,

суд.
носм.

15, N 4, 631-3

● (суд. SiO₄ III)

SiCl_4

XIV-4231

1972

(с.п.; ν_i)

У 3 Б180. Определение точного силового поля SiCl_4 из изотопического сдвига $\text{Cl}^{35}-\text{Cl}^{37}$ и анализ колебательных спектров $\text{SiCl}_3^{35}\text{Cl}^{37}$, $\text{SiCl}_2^{35}\text{Cl}_2^{37}$, $\text{SiCl}^{35}\text{Cl}_3^{37}$, $\text{Si}^{28}\text{Cl}_4$, $\text{Si}^{29}\text{Cl}_4$ и $\text{Si}^{30}\text{Cl}_4$. Mohan N., Müller A. Determination of the exact force field of SiCl_4 from $^{35}\text{Cl}-^{37}\text{Cl}$ isotope shift and analysis of the vibrational spectra of $\text{Si}^{35}\text{Cl}_3^{37}\text{Cl}$, $\text{Si}^{35}\text{Cl}_2^{37}\text{Cl}_2$, $\text{Si}^{35}\text{Cl}^{37}\text{Cl}_3$, $^{28}\text{SiCl}_4$, $^{29}\text{SiCl}_4$ and $^{30}\text{SiCl}_4$. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 42, № 1, 203—207 (англ.)

см на обороте

X. 1973 N 3

Для молекул SiCl_4^{35} и SiCl_4^{37} (точечная группа симметрии T_d) с использованием лит. значений частоты нормального колебания $\nu_4 = 221,3 \text{ см}^{-1}$ и величины изотопич. сдвига $\nu_3 - i\nu_3 = 5,7 \text{ см}^{-1}$ вычислены силовые коэф. класса F_2 общего валентного силового поля: $F_{33} = 3,05 \pm 0,21$, $F_{34} = 0,19 \pm 0,08$, $F_{44} = 0,228 \pm 0,008 \text{ Мдин/А}$, к-рые сопоставлены с лит. данными. Расчет проводили с использованием параметрич. формы матрицы силовых коэф., рассматривавшейся Штреем (см. РЖХим, 1968, 9Б53). С использованием этих силовых коэф. вычислены частоты нормальных колебаний различных изотопич. разновидностей молекул SiCl_4 , удовлетворительно воспроизводящие доступные для них эксперим. частоты.

А. П. Александров

SiCl₄

XIV-4231

1972

Chem. h.

V_i

146963g Determination of the exact force field of silicon tetrachloride from chlorine-35-chlorine-37 isotope shift and analysis of the vibrational spectra of Si³⁵Cl₃³⁷Cl, Si³⁵Cl₂³⁷Cl₂, Si²⁵-Cl³⁷Cl₃, ²⁸SiCl₄, ²⁹SiCl₄, and ³⁰SiCl₄. Mohan, N.; Mueller, A. (Inst. Chem., Univ. Dortmund, Dortmund, Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 42(1), 203-7 (Eng). The exact force field of SiCl₄ was detd. from ³⁵Cl-³⁷Cl isotope shift data. The ³⁵Cl-³⁷Cl isotope frequency shift data, obtained with a resolution of 0.5 cm⁻¹, was suitable for establishing reliable force consts. However, the error limits in the values thus obtained were larger than corresponding error limits for force consts. calcd. with Coriolis coupling consts. as addnl. data. When isotope frequency shift data was obtained with 0.2 cm⁻¹ resolution, the corresponding error limits in the values of the force consts. were practically the same as those obtained with Coriolis coupling consts. Calcd. and obsd. frequencies for the title isotopic species are given.

C.A. 1972 76.24

SiCl₄

XIV-4231

1972

1 Д176. Определение точного силового поля молекулы SiCl₄ из сдвига частот при изотопозамещении ³⁵Cl—³⁷Cl и анализ колебательных спектров Si³⁵Cl₃³⁷Cl, Si³⁵Cl₂³⁷Cl₂, Si³⁵Cl³⁷Cl₃, ²⁸SiCl₄, ²⁹SiCl₄ и ³⁰SiCl₄. Mohan N., Müller A. Determination of the exact force field of SiCl₄ from ³⁵Cl—³⁷Cl isotope shift and analysis of the vibrational spectra of Si³⁵Cl₃³⁷Cl, Si³⁵Cl₂³⁷Cl₂, Si³⁵Cl³⁷Cl₃, ²⁸Si, Cl₄, ²⁹SiCl₄ and ³⁰SiCl₄. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 42, № 1, 203—207 (англ.)

Из частот колебаний Si³⁵Cl₄ и Si³⁷Cl₄ вычислены силовые постоянные молекулы SiCl₄. Полученный набор силовых постоянных воспроизводит частоты колебаний остальных изотопозамещенных SiCl₄, указанных в заголовке, с точностью до 0,5 см⁻¹.
М. Р. Алиев

Р. № 9. 1973. 1

SiCl₄

Mohan N., 4 pp.

1972.

"J. Mol. Struct.", 1972,

(C.N.)

13, N2, emp 155-162.

(as CH₄, III).

Sicl₄

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

1972

(c.n.) "Indian J.Pure.and Appl.Phys."

1972, 10,N8,590-593.

(cm.CCl₄;III).

Si Cl₄

(Dy, Dy⁺)
u.n.

Ranganathan V.

1972

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

(cu CH₄; iii)

SiCl₄

1973

18 Б170. Дальнейшие наблюдения эффектов разбавления и изменения температуры на спектры комбинационного рассеяния SiCl₄ и CS₂. Creighton J. A., Sinclair T. J. Further observations on the effects of dilution and change of temperature on the Raman spectra of liquid SiCl₄ and CS₂. «Spectrochim. acta», 1973, A 29, № 5, 817—820 (англ.)

vi

Изменения контуров полосы ν_1 жидк. SiCl₄ в спектре КР при разбавлении, а также сравнительно незначительное влияние т-ры на контуры полосы ν_1 подтверждают сделанное ранее предположение, что аномальная форма полосы ν_1 жидк. SiCl₄ есть результат анизотропии жидк. состояния, нежели проявление налагающихся полос горячих переходов. Такие разбавители, как углеводороды и Si₂Cl₆, устраняют эту анизотропию. В случае же жидк. CS₂ интенсивность полосы горячего перехода по сравнению с интенсивностью полосы основного колебания ν_1 заметно меняется при разбавлении.

Из резюме

ж. 1973 № 18

(41)

✗

40208.080

Ch, TE, Ph

SiCl₄

31603

1973

1998

Раман - спект.

Griffiths James E.

Intermolecular interactions in liquid
and gaseous SiCl₄.

"Spectrochim. acta", 1974, A30, N1, 169-180

(англ.) 0040 ББК

025

0216

033 43

ВИНИТИ

40913, 1836

TC, Ch, Ph

Sicly

41125

1974

02
4-6151

Clark Robin J.H., Mitchell Peter D. Pre-
resonance Raman intensity studies on the
fundamentals of the group iv tetrahalide-
des. "J. Mol. Spectrosc.", 1974, 51, N.3,
458-474

(англ.)

0189 ккк :

152 157-181

ВИНИТИ

41220.8442

Ch, Ph, ETC

Sicly - 34469

02 1974
#4-7635

Elumalai K., Radhakrishanan M.

Influence of atomic mass on the coriolis coupling constnats in some XY_4 -type molecules: XCl_4 molecules.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1974, 12, N 6, 462-463 (англ.) 0261 ДИК

234 238 ,0203

ВИНИТИ

SiCl₄

1974

11 Б156. Межмолекулярные взаимодействия в жидком и газообразном SiCl₄. Griffiths James E. Intermolecular interactions in liquid and gaseous SiCl₄. «Spectrochim. acta», 1974, A30, № 1, 169—180 (англ.)

Исследована т-рная и конц-онная зависимость ИК-спектров и спектров КР ($\lambda_{\text{возб.}} = 6388 \text{ \AA}$, 5145 \text{ \AA} и 4880 \text{ \AA}) SiCl₄ в жидк. и газ. состоянии, а также в р-ре HSiCl₃; одновременно проводились измерения молек. веса, для газов изучена зависимость интенсивностей линий от давления. Установлено, что особенности аномального поведения распределения интенсивностей в тонкой изотопич. структуре линии $\sim 430 \text{ см}^{-1}$ спектра КР SiCl₄ обусловлены проявлением «горячих» полос и межмолек. взаимодействия (аналогичный вывод можно сделать также на основании т-рной зависимости интенсивностей полос 368 и 474 см^{-1} в ИК-спектре); при этом межмо-

Спектр.

х. 1974 № 11

лек. взаимодействия проявляются и в газе. Тип межмолекулярных взаимодействий не уточнен, вместе с тем показано, что степень димеризации в р-ре мала, энтальпия димеризации $2\text{SiCl}_4 \rightleftharpoons (\text{SiCl}_4)_2$ — $\sim 1,4 \pm 0,5$ ккал-моль. Сравнение поведения тонкой структуры линии $\Delta\nu_1$ в ряду CCl_4 , SiCl_4 , GeCl_4 , SnCl_4 хорошо согласуется с распределением заселенностей этого колебательного уровня, однако, низкот-рные аномалии в спектре SiCl_4 не позволяют считать «горячие» полосы единственной причиной уширения компонент тонкой структуры. А. Бобров



1974

SiCl₄

спектр

ΔH димериз.

6 Д525. Межмолекулярные взаимодействия в жидком и газообразном SiCl₄. Griffiths James E. Intermolecular interactions in liquid and gaseous SiCl₄. «Spectrochim. acta», 1974, A30, № 1, 169—180 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения и комб. рас. газообразного, жидкого SiCl₄ и его растворов в CCl₄, SiHCl₃ и C₆H₆ при т-рах 200—300° К в области 150—1300 см⁻¹. Приведены таблицы частот полос с их отношением и полученные спектры в области полосы ν₁. Наблюдаемые аномалии интенсивности компонент изотопной структуры связаны с влиянием межмолекулярных взаимодействий и наложением горячих полос. Концентрационные и температурные изменения показывают, что межмолекулярные взаимодействия для жидкой фазы являются доминирующим фактором и заметны даже в газовой фазе. PVT-измерения показывают, что энтальпия димеризации ~1,4 ккал/моль. Библ. 19.

М. В. Тонков

ф. 1974, № 6



ΔH димериз.

1974

SiCl₄

21 Б28. Неэмпирическое исследование роли d -орбиталей в хлорсилане. Howell James M., Van Wazer John R. An ab initio study of the role of d orbitals in chlorosilane. «J. Amer. Chem. Soc.», 1974, 96, № 10, 3064—3070 (англ.)

Проведены неэмпирич. расчеты волновой функции хлорсилана методом ССП МО ЛКАО в несгруппированном базисе ГФ с учетом и без учета d -АО на атомах Si и/или Cl. Разностные карты электронной плотности показывают, что учет d -АО на Si или на Cl оказывает примерно одинаковое влияние на перенос заряда между атомами Si и Cl, хотя обычная интерпретация в терминах вкладов от отдельных АО приводит к выводу, что учет d -АО только на Si приводит к переносу заряда от атома Cl, а результатом учета d -АО только на Cl является в основном поляризация этого атома. Вычисленные изменения орбитальных энергий внутренних электронов при учете d -орбиталей интерпретированы в терминах изменений электростатич. потенциала в области остова. Резюме

x. 1974 N 21

SiCl₄

1974

схема
расстояния

Furness P.M.,
Cien. Cult (Sao Paulo),
1974, 26, (9) 875-6.



(сн H₃CF; III)

SiCl_4

SiCl_2

Si_2Cl_6

термич.
диссоц.

Оттиски 3037

1974.

19 Б1049. Прямое спектроскопическое доказательство образования дихлорсилилена при пиролизе гексахлордихлоридана. Нефедов О. М., Мальцев А. К., Святкин В. А. «Изв. АН СССР. Сер. хим.», 1974, № 4, 958

Методом ИК-спектроскопии изучен механизм термич. диссоциации SiCl_6 . Р-ция проводилась при низком давл. (10^{-3} — 10^{-4} мм) в пиролизере, присоединенном к оптическому криостату. Продукты р-ции изолировались в матрице Ag на подложке из CsJ при 15—20°. Диссоциация Si_2Cl_6 в данных условиях протекает при т-рах >600 — 650° ; при т-рах $\geq 900^\circ$ конверсия Si_2Cl_6 приближается к 100%. Продуктами р-ции являются SiCl_4 и SiCl_2 , причем SiCl_4 не диссоциирует при т-ре $<1100^\circ$ и не является источником SiCl_2 в условиях эксперимента. Основным направлением р-ции является карбеноидный распад Si_2Cl_6 . Механизм р-ции не изменяется в интервале т-р 650—1100°.

Н. Б. Кротова

Х. 1974 №19

⊕2 ⊗

SiCl_3Cl

1974

2, 20, 11

Provitali S. L., Sezione S. L.,
Rev. Espinosa, Quim., 1974,
5(2), 61-6.

(cris. CH_3F ; III)

50603.1267

Ph, Ch, TC

34457

SiCl₄

(суд. пос.)

1974

48-9190

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. (суд. CF₄; III)

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

0378 гек

352

352

370

ВИНИТИ

Sil'ly (m, rb)

1974

Sharma D.R.

Pandey A.N., et al

Sp. aumt.
Korset, l,
Cum. hser.

Z. Naturforsch
1974, 29a n 10

1504-6.

(cum. Ti'ly; III)

41014.8794
Ch, Ph, TC

40892
Sil4 (попытки
к рив)

1974
2557

Wang J. Ling-Fai, Margrave J.L.,
Franklin J.L.

Interpretation of dissociative-electron
attachment processes for silicon
tetrachloride.

"J. Chem. Phys.", 1974, 61, N 4, 1357-1360
(англ.)

0211 пик

183 184 - 203

ВИНИТИ

30-8750

SiCl₄

оттиски 3187

1975

Baran Enrique J.

"Monatsh Chem" 1975
106, N 1, 121-126
(нем. яз. нем.)

средние
амплит.
колебан.

(см CH₄; $\overline{\text{III}}$)

50507.7648

Ph, Ch, TC

Суд. пост. ср. анал. 1975
29864 колл.
Sicly #4-8936

Clark Robin J.H., Mitchell Peter D. Va-
pour phase Raman intensity studies on the
group IV tetrachlorides. "J. Chem. Soc.
Faraday Trans.", 1975, Part 2, 71, N 3,
515-524

(англ.) (суд. СССР; III)
0359 пик

335 338 03 5 1

ВИНИТИ

SiCl₄

ammun 3412 1975

Isotani S.

"J. Mol. Struct"

ammun.

1975, 28, N1, 61-76
(amm)

50917.3350
Ex-C, Ch, TC

4 0392

Silly

1975

3303

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 04 1231-1236
(англ.)

422 424

4 4 2

ВИНИТИ

Sicly omnuen 3595 1975

Pabst R.E; et al.

Report. Chem. Rice Univ.

Houston, Texas.

Negative ion electron
impact studies of
group IVA tetrahedric.

50926.9312

Ch, Ph, TC, MGU

(м. и) 23025

Sicly (суд. пост)

1975

*4-9748

Ramaswamy K., Chandrasekaran V. Force field studies by parametric representation method of some XY_4 tetrahedral type molecules. "Acta phys. pol.", 1975, 48, N 1, 105-125 (англ.)

(суд. СНЧ; III)

0457 пик

420 431

ВИНИТИ

IX-6549-IV
00-6549-00

1975

Sily

23 Б77. О классификации нормальных колебаний молекул. II. Недиagonальные элементы матрицы распределения энергии. Rytter E. On the classification of normal modes of vibration. II. The interaction terms in energy distributions. «Acta chim. Acad. sci. hung.», 1975, 85, № 2, 147—151 (англ.; рез. рус.)

По лит. данным для частот и форм колебаний вычислено распределение полной, потенциальной и кинетич. энергии колебаний по внутренним колебательным координатам для молекул ACl_4 ($A=Si, Ge, Sn$), BF_6 ($B=S, Se, Te, W, U, Rh, Ir$), RuO_4 и OsO_4 . Показано, что для отнесения колебаний этих молекул по их форме лучше использовать распределение полной энергии. Сообщ. I РЖХим, 1974, 22Б70.

М. Р. Алиев



X1975 N23

(411)

(41) Ембву

расчет
полной
потенциальной
и кинетич.
энергии

SiCl₄

№ 3 - 8044

1975

(vi)

12 Б209. Интенсивности полос ИК-поглощения и полярности связей. Часть V. Молекулы типа XCl₄ (X=C, Si, Ge и Sn). Stoeckli-Evans Helen, Barnes A. J., Orville—Thomas W. J. Infrared band intensities and bond polarities. «Part 5 XCl₄ molecules (X=C, Si, Ge, Sn). «J. Mol. Struct.», 1975, 24, № 1, 73—83 (англ.)

Из измерений спектров поглощения и кривых дисперсии в интервале 1000—10 см⁻¹ получены значения интенсивностей полос ν_3 и ν_4 SiCl₄ (I), GeCl₄ (II) и SnCl₄ (III) в газовой фазе. Проведено сравнение с данными по поглощению жидкостей. Показано, что соотношение интенсивностей газ : жидкость определяется короткодействующими специфич. взаимодействиями молекулы с ближайшим окружением. На основании того, что моле-

X. 1975. № 12

(+2)



кулы типа XCl_4 являются сферич. и для них взаимодействия такого рода не должны быть существенными, сделан вывод о возможности образования «комплексов», индуцированных столкновениями даже в среде неполярных молекул. Вычислены значения моментов переходов и атомарных поляризуемостей. Моменты перехода оказались равными $0,9D$ для I, $1,5D$ для II и $2,7D$ для III. Расхождение значений для газов и жидкостей объясняется влиянием обертонов и составных токов, к-рые трудно отделить от основного, а также наличием в жидк. фазе сильного диэлектрич. поля по сравнению с газовой. Увеличение момента связи при переходе от I к III обусловлено частично увеличением ее длины и поляризуемости центрального атома.

Б. Г. Антипов

1975

SiCl₄

*45-8044.

GeCl₄SnCl₄

(vi)

49495x Infrared band intensities and bond polarities. 5. Carbon, silicon, germanium, or tin tetrachloride molecules. Stöckli-Evans, Helen; Barnes, A. J.; Orville-Thomas, W. J. (Dep. Chem. Appl. Chem., Univ. Salford, Salford, Engl.). *J. Mol. Struct.* 1975, 24(1), 73-83 (Russ). Gas phase band intensities of ν_3 and ν_4 of SiCl₄, GeCl₄ and SnCl₄ were derived from dispersion curves measured by using a Michelson interferometer at 1000 to 10 cm⁻¹. The results obtained are discussed in relation to the corresponding liq. phase band intensities. Bond polar properties were derived from the obsd. intensities by using a modified Gribov method, the moments obtained being 0.9 D for SiCl, 1.5 D for GeCl and 2.7 D for SnCl.

C.A. 1975 82 N8

⑫

☒

(сч. Такна
Ccl₄)

Silly

1976

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

curr.
review.

Indian J. Phys., 1976,
50, N 10, 871-75.

(curr. CF₄; III)

SiCl₄

1977

Cayley B. C. et al

violet absorption spectra of the group IV A tetrachlorides. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.» 1977, 11, № 4, 383—397 (англ.)

Di

В области 40 000—87 000 см⁻¹ (250—115 нм) исследованы спектры поглощения паров CCl₄ (I), SiCl₄ (II), GeCl₄ (III) и SnCl₄ (IV). С помощью данных фотоэлектронной спектроскопии проанализированы спектры поглощения I—IV и идентифицированы переходы типа $\sigma^* \leftarrow n$ ридберговские переходы с МО типа $1t_1$, $3t_2$ и $1e$, локализованных на атомах хлора. Значительная дестабилизация состояния, соответствующего переходу $\sigma^* \leftarrow n$ в молекуле II, по сравнению с I, III, IV свидетельствует о взаимодействии МО типа d (π) атома Si и МО типа p (π) атомов Cl. Это взаимодействие сильнее всего сказывается в II. Библ. 23. Ю. В. Чижов

Ф. 1978, N 1, 354.

SiCl₄

15-18897

1977

Girijavallabhan C.P.

J. Mol. Spectrosc.,
1977, 65, NI, 142-146.

Chem. Notes

(Chem. B₇, III)

Silly

[X-18-18897]

1977

Girjavalabhar C. P., et al.

J. Mol. Spectrosc., 1977,

65, 142-6

Average Potential Energy Criterion

Force fields of XY_3 and tetrahedral  some planar XY_4 molecules.

Li Cl₄

* 15-188971

1977

* 15-18872

Girijavallabhan C.P. Id.

(car. wet.)

J. Mol. Spectros. 1977,

65, 142-6

70525.6721

Ch, TC

96615

Silly (M.V.)

1977

*U-18835

Königer F., Müller A., Orville-Thomas W.J. The use of isotopic substitution and matrix isolation techniques in determining molecular constants for group IVA tetrahalides. "J. Mol. Struct.", 1977, 37, N 2, 199-227 (англ.)

846 850 874 0883 нмк . ВИНТИ

сш. 2174114

SiCl₄

1947

Mishra, K.C. et. al.

corr.
noct.

Indian J. Pure Appl. Phys.
1947, 15(10) 400-4.

corr. Cl₄-III

SiCl₄

1977

Pabst R. E. et al.

Int. J. Mass. Spectrom. and
Ion Phys. " 1977, 25, N4,
361-374 (anal.)

(Ae)

●
cu. GeCl₄ - III

1947

Silly
 belly
 snelly

спектры
 ионизации.

2 Б152. Спектры испускания четыреххлористого углерода и родственных с ним соединений, возбуждаемые контролируемым электронным ударом. Toyota Mi-pogu, Ogawa Teiichiro, Ishibashi Nobuhiko. «Нихон кагаку кайси, Nippon kagaku kaishi, J. Chem. Soc. Jap., Chem. and Ind. Chem.», 1977, № 8, 1077—1080 (япон.; рез. англ.)

Исследованы спектры испускания тетрахлоридов углерода, кремния, германия и олова, возбуждаемые электронным ударом с энергией 300 эв. На основании анализа зависимости интенсивности полос CCl и CCl_2 в спектре CCl_4 от тока электронного пучка и давления CCl_4 сделан вывод, что молекулы $\text{CCl}(A^2\Delta)$ образуются в результате одноэлектронных мономолек. процессов

типа $\text{CCl}_4 \xrightarrow{e} \text{CCl}(A^2\Delta) + \text{Cl}_2(X, A, C) + \text{Cl}(3p^5)$ или $\text{CCl}_4 \rightarrow \text{CCl}(A^2\Delta) + 3\text{Cl}(3p^5)$ с пороговой энергией около

(7.2) □

2, 1948, N2

15,5 эв. В спектре наблюдались также атомные линии углерода, хлора и линии Cl (II). Кроме того, предполагается, что широкая полоса в области 390—650 нм может быть отнесена к молекуле CCl_2 . В спектрах испускания SiCl_4 , GeCl_4 и SnCl_4 наблюдались полосы моноклоридов и атомные линии кремния, германия и олова, причем интенсивность атомных линий возрастала при переходе от кремния к олову. Широкие полосы с максимумами около 410 и 560 нм (SiCl_4), 480 и 620 нм (GeCl_4), 440 нм (SnCl_4), по аналогии со спектром CCl_4 предварительно отнесены к молекулам MCl_2 .

В. М. Ковба

Silly

1977

Thirugnansambandam P.
et al.

numerus. 4

cur. not. Indian J. Phys.,
1977, 13 (5) 342-56

(cur. CF₄ ; n_i)

Sicly

Lommuca 8416 / 1978

Sibry

Asundi R.K., et al.

of 30p,

Indian J. Pure and Appl. Phys.

in. 11.

1978, 16, p. 142-150.

Pamant
Creek?

omni 7265 1978.

SiCl_4

Bouix J. et al.

Si
Raman
spectr

J. Raman Spectrosc.
1978, 7 (6), 346-48

(see AsCl_3 ; III)

SiCl₄

1978

precursor
of. empty

Gimarc, B. M. et al.
J. Am. Chem. Soc., 1978, 100(8),
2340-5.

cell. Cl Fe⁺-III

1978

Silly
Silly
Silly(y)

Li₂Si₂
(20; 4Hf)

9 Б73. Масс-спектрометрическое исследование состава газа в системах Si—Cl и Si—Li. Ihle H. R., Wu C. H., Miletic M., Zmbov K. F. Mass spectrometric studies of gas species in the systems Si—Cl and Si—Li. «Adv. Mass. Spectrom. Vol. 7A. Proc. 7th. Int. Mass Spectrom. Conf. Florence, 1976». London, 1978, 670—677 (англ.)

Исследована фрагментация при электронном ударе молекул SiCl_n, где $n=1-4$, возникающих в ячейке Кнудсена над смесью Si+CuCl. При температуре от 200 до 300° в составе пара обнаружены молекулы SiCl₄, SiCl₂, Si₂Cl₄, Si₂OCl₆ в соотношении 100 : 2 : 0,3 : 0,06. Обсуждаются механизмы фрагментации соотв-щих молек. ионов. Значения потенциалов ионизации и появления ионов спектра получены несколькими методами и составляют для SiCl₄ 11,44 и 11,60 эВ, для SiCl₂ 11,42 и 11,50 эВ, для Si₂Cl₆ 11,0 эВ. Аналогичным способом исследован состав пара над смесью Li₂CO₃+α-Al₂O₃. Зафиксировано образование димера Si₂Li₂, теплота разл. к-рого оценена равной 115±10 ккал/моль; энергия диссоциации связи D₀⁰=67±6 ккал/моль. М. Туркина

(+2) □
2.1980. №3

1573

SiCl₄
 GeCl₄
 расчет
 электр.
 структуры

V/4 Б31. Применение метода рассеянных волн X_α для расчета электронной структуры молекул CCl_4 , $SiCl_4$ и $GeCl_4$. Оношко Д. Е., Титов С. А. «Теор. и экспе-рим. химия», 1978, 14, № 5, 676—679

Проведен самосогласованный расчет электронной структуры тетраэдрич. молекул ACl_4 ($A=C, Si, Ge$) с помощью метода рассеянных волн X_α . Выполнен расчет основных состояний указанных молекул, а также рассчитаны величины потенциалов ионизации с использованием концепции переходного состояния Слейтера. Результаты расчета сопоставлены с данными фото-электронной спектроскопии, а также с результатами расчетов др. методами. Получено хорошее согласие с экспериментом.

Автореферат

□

(+1)

Л. 1979, N 4

Silly

ommueu 7528 | 1978.

Dr

Ramaswamy K.
et al.

pacifegle.
amocet.
nomeris.
mepuei.

Acta phys. polon.,
1978, A53 (5) 733-36

SiCl₄

номер 6503

1978

Sarkar P.C., et al

Acta phys. pol. 1978,
A53, N6, 895-904

ст. 11.
см. нот.



ст. SiF₄ - III

SiCl₄

1979

Andersen P.R., et al.

момент
эмпири.

Chem. Phys., 1979, 41 (1-2)

γ_i ; ϵ_i

209-219.

(см.  SiH₃Cl; III)

SiCl₄

Common 8912 1973

Arnold J. H., et al.

J. Mol. Spectrosc.

1979, 78(2), 267-76.

cur. no. cur.
v_i

cur. SO₂ - III

SiCl₄

1979

Egdell, R. G., et al.

promoted.
on exp.

J. Electron Spectrosc. and
Relat. Phenom. 1979, 17,
N4, 267-73.

cm. CCl₄-III

Silly

[индекс 8216]

1979

Граната Г. Р., et al.

Mol. Phys., 1979, 37, N 4,

1297-1304

оценочная.
ссылка.



ав. № 4-III

57Cl₄

1979

Гузиков А.Т. "З"

Защит.
Стрелки

Докл. АН УССР,
1979, Б (6), 432-35

(соч. 57Cl₄; III)

SiCl₄

1979

Hartmann E.

E_i, u.n.

Chem. Phys. Lett. 1979,
68, N1, 175-78.



coll. SiH₄-III

Silly

Lommu 8837

1979

Tossell J. A.

pages
J. A. C. C. C.

Chem. Phys. Lett.,
1979, 67 (2,3), 359-64



SiCl₄

ommuch 11229 | 1980.

El - Issa B.D., et al.

кв. мех.

факт

21. ступ.

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

(Cu CF₄) III

Silly

Common 10345 1980

Lohr L.L. et al.

Kb. max,
factor.

Ind. J. Quant. Chem.

1980, 18 (2), 347-355

SiCl_4

(ommuc 11184)

1980.

Ohwada K.

Chem. Noct.

J. Chem. Phys., 1980,

73, 5459-63

● (cell CH_4) III

SiCl₄

[ommu 10034] 1980.

Tripathy M., et al.

(c.u.s. no. 1.) Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1980,
18, 305-306.

Silly
(Silly)[†]

Ommuck 12784

1981

Glidewell C., et al.

J. Mol. Struct. 1981,

молек.
геометрия.

85, 87-98.



SiCl_4

SiCl_4^+

Si ;

Омтиск 12908

1981

3 Д448. Спектроскопия матричной изоляции продуктов резонансного фотолиза хлоридов элементов IV группы при облучении светом аргоновой лампы. Matrix spectroscopy of the argon resonance photolysis products of group IV chlorides. Miller J. Houston, Andrews Lester. «J. Mol. Struct.», 1981, 77, № 1—2, 65—73 (англ.)

Получены ИК-спектры 800—300 cm^{-1} продуктов фоторазложения молекул MCl_4 (I) ($\text{M} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$) в пучке излучения аргоновой лампы, изолированных при $T = 15$ К в Ar-матрице. Обнаружено, что наиболее стабильными продуктами фотолиза I в матрице являются радикалы MCl_3 и MCl_2 . Идентифицированы ИК-полосы колебаний матрично-изолированных ионных структур SiCl_3^+ и SiCl_4^+ . Проведено сопоставление колеба-

12

$\text{GeCl}_4, \text{SnCl}_4$ ●

ф. 1982, 18, №3.

тельных спектров матрично-изолированных и газообразных радикалов I. Предположено, что ион SiCl_4^+ обладает менее искаженной тетраэдрич. структурой нежели ион CCl_4^+ с повышенной фоточувствительностью. Сделан вывод, что прочность связей в катионах MCl_3^+ уменьшается в ряду Si—Ge—Sn—C . Библ. 22. И. В. А.

SiCl_3

CMMLCK 12908

1981

96: 60165z Matrix spectroscopy of the argon resonance photolysis products of Group IV chlorides. Miller, J. Houston; Andrews, Lester (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, VA 22901 USA). *J. Mol. Struct.* 1981, 77(1-2), 65-73 (Eng). Matrix IR spectra of the Ar resonance photolysis products of SiCl_4 include the previously identified SiCl_2 and SiCl_3 radicals, SiCl_3^+ at 742 cm^{-1} and a possible identification of SiCl_4^+ at 717 cm^{-1} . Similar studies with GeCl_4 produced GeCl_2 and a reassignment for GeCl_3 , and expts. with SnCl_4 gave the SnCl_2 and SnCl_3 species. Optical spectroscopic evidence for SiCl_4^+ at 475 nm suggests that this mol. ion is less distorted than its more photosensitive CCl_4^+ counterpart.

ck ckemp
b
sample

C.A. 1982, 96, N8

LiCl_3^+ , LiCl_2 , LiCl_4^+ , BeCl_2 , BeCl_3 ,
 SnCl_2 , SnCl_3 (лек пример в литературе)

Silly

12743

1981

Witschel W., et al.

Копировать.
но сн.
(расчет)

J. Quant. Spectrosc.
Radiat. Transfer 1981,
25, 463-470.

Silly

1983

Dhanalakshmi. A.,
Kamala P.

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

(Civ. CF₃H; III)

Silly

om. 17491 | 1983
om. 17 791

Dines T. F., French M. F.,
et al.

Ramar
Spectrosc.

J. Ramar Spectrosc.,
1983, 14, N4, 225-231.

Silly

1983

Jolly William L.

(7)

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

(cu.CF₄; III)

Silly

1983

Pandey A.N., Chopra Y.R.,
et al.

сир.
носм.

Acta Phys. Pol. A 1983,
A64(5), 605-614.

(сир. Аллеу; III)

Sily

1983

Zhu Ji-Kang, Li Gu,
et al.

pacrim
y;

Theor. chim. acta,
1983, 63, N3, 223-233.

(an. CCl₄; III)

Silby

1984

Hallmeier Karl-Heinz,
Hartmann Eberhard, et al.

расшир
перуов

Wiss. Z. Karl-Marx-Univ.
Leipzig. Math.-naturwiss.
R. 1984, 33, N4, 382-389.

(Ser. CCl₄; III)

SiCl₄

1984

8 Б1148. Спектры комбинационного рассеяния кристаллических тетрахлоридов кремния и олова. Raman spectra of crystalline silicon and tin tetrachlorides. Tse Wan-Sun. «Proc. 9 Int. Conf. Raman Spectrosc., Tokyo, Aug. 27 — Sept. 1, 1984.» Tokyo, 1984, 634—635 (англ.)

Исследованы с разрешением 1 см^{-1} спектры КР в области $40\text{—}700 \text{ см}^{-1}$ поликрист. SiCl₄ (I) и SnCl₄ (II) при 80 и 18 К. Приведены значения частот активных в КР колебаний ν_1 (A_1), ν_2 (E), ν_3 (T_2) и ν_4 (T_2) для разных естественных изотопич. сочетаний атомов Cl. Отмечено, что при 18 К отношение интенсивностей различных изотопич. компонент полосы ν_1 соответствует природному содержанию изотопов Cl. В спектрах I, II не наблюдалось предсказанного фактор-группового расщепления полос ν_1 , из чего сделан вывод о незначительном вкладе этого эффекта. А. Н. Курский

спектр, ν_1 ,

(H) ~~17~~

X. 1985, 19, 48

SiCl₄

1985

Ho P., Coltrin M.E., et al.

M.N.

J. Phys. Chem., 1985, 89,
N 21, 4647-4657.

(car. SiH_n (n=1, 2, 3, 4); III)

Silly

[DM: 21727]

1985

Sjoerdsma J. S., Van
Tright J. B.

вопрос.,
ссылка.

Chem. Phys. Lett.,
1985, 117, N4, 336-339.

Silly

[DM: 25227]

1986

Anderson A., Basista H.T.
et al.,

Raman.
спектр

J. Raman Spectrosc., 1986,
17, N4, 321-324.



SiCl₄

1986

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

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

(car.  CH₄; III)

Silly

1986

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

Chem.
nostr.

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

($\bullet$ cer. Pcl_3 ; III)

SiCl₄

[OM-23303]

1986

Machado W.V.M., Ferrei-
ra L.B., De Siqueira M.L.

reop.
praeem

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1986, 19, N1
33-44. (Chem. SiF₄, III)

SiCl₄

1986

/ 106: 146279b Cold jet infrared absorption spectroscopy: the ν_3 band of $^{28}\text{Si}^{35}\text{Cl}_4$. Yamamoto, Satoshi; Matsumoto, Yoshiyasu; Takami, Michio; Kuchitsu, Kozo (Coll. Sci., Nagoya Univ., Nagoya, Japan). *Reza Kagaku Kenkyu* 1986, 8, 5-7 (Japan). An IR vibration-rotation spectrum of the ν_3 band of $^{28}\text{Si}^{35}\text{Cl}_4$ was measured by a tunable diode laser with Doppler-limited resolu. Stark modulation was applied for extg. the absorption lines due to the tetrahedral species from heavily congested spectrum lines. Many low- J transitions were obsd. by measuring the absorption in a supersonic free jet. The mol. consts. for the ν_3 band of $^{28}\text{Si}^{35}\text{Cl}_4$ were detd.

(ν_3)

M.A.

C.A. 1987, 106, N18 ●

SiCl₄

Om 26745

1987

7 20 B1177. Спектры поглощения SiCl_4 , Si_2Cl_6 , SiF_3CH_3 и GeF_4 в вакуумной ультрафиолетовой области. Absorption spectra of SiCl_4 , Si_2Cl_6 , SiF_3CH_3 and GeF_4 in the VUV region. Iduki T., Washida N., Itoh U., Toyoshima Y., Onuki H. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 136, № 5, 447—450 (англ.)

Измерены спектры поглощения молекул SiCl_4 , Si_2Cl_6 , SiF_3CH_3 и GeF_4 в области 110—200 нм (синхротронный источник вакуумного УФ-излучения) и спектр возбуждения флуоресценции Si_2Cl_6 . Полосы в спектрах первых трех молекул связаны в основном с ридберговскими переходами: SiCl_4 — $\lambda=140$ нм, $4s \leftarrow 3t_2$ (величина терма, $E=32\,200$ см⁻¹, $n^*=1,85$, $\delta=2,15$); 128,9, $4p \leftarrow 1t_1$ (19 400; 2,38; 1,62); 126,8, $4s \rightarrow 1e$ (29 200; 1,94; 2,06); 123,0, $4p \leftarrow 3t_2$ (22 300; 2,22; 1,78); 115,7, $4p \leftarrow 1e$ (21 600; 2,25; 1,75), МО $1t_1$, $3t_2$ и $1e$ —верхние занятые МО SiCl_4 ; Si_2Cl_6 —174, $4s \leftarrow 4a_2$ (верхняя занятая МО) (31 400; 1,87; 2,13); 138, $ns \leftarrow n_{\text{Cl}}$; 129,3 $np \leftarrow n_{\text{Cl}}$; 124,0,

М.П.

(X) (43)

X. 1987, 19, N20

$np \leftarrow n_{\text{Cl}}$; 119,0, $np \leftarrow n_{\text{Cl}}$; 112,5, $(a_2)^{-1}$; SiF_3CH_3 — 133,5,
 $4s \leftarrow e$ (31 500, $\delta=2,14$); 117,5, $4p \leftarrow e$ (21 400, $\delta=1,73$)
и (или) $4s \leftarrow a_1$ ($\delta=2,19$). В спектре GeF_4 наблюдалась
одна полоса, отнесенная к валентному переходу $\delta^* \leftarrow$
 $\leftarrow 1t_1$. В спектре испускания при фотовозбуждении
 Si_2Cl_6 (резонансные атомные линии H α -Лаймана и
Ag 1) наблюдался переход $\tilde{A}^1B_1 \rightarrow \tilde{X}^1A_1$ SiCl_2 .

В. М. Ковба



SiCl₄

Dom. 26745

1987

№ 11 Л262. Спектр поглощения SiCl_4 , Si_2Cl_6 , $\text{SiF}_3\text{C}_3\text{H}_7$, GeF_4 в ВУФ-области. Absorption spectra of SiCl_4 , Si_2Cl_6 , SiF_3CH_3 and GeF_4 in the VUV region. Ibuki Toshio, Washida Nobuaki, Itoh Uichi, Toyoshima Yasutake, Onuki Hideo. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 136, № 5, 447—450 (англ.)

С использованием синхротронного излучения исследован спектр поглощения (110—200 нм) молекул, указанных в заглавии работы. Структура в спектрах Si_2Cl_6 и SiCl_4 приписана ридберговским переходам неподеленной пары хлора. Диффузные полосы в спектре SiF_3CH_3 также отнесены к возбуждению ридберговских состояний. В спектре GeF_4 широкие полосы идентифицированы как обусловленные валентными переходами с внешних орбиталей. Исследована также флуоресценция, возбуждаемая резонансным излучением H L_α (1216,7 Å) или ArJ (1048/1067 Å) в Si_2Cl_6 . Зарегистрировано излучение молекул SiCl_2 ($A^1B_1-X^1A_1$), образующихся в результате диссоциации Si_2Cl_6 .
В. С. Иванов

и.п.

⊗ (43)

ср. 1987, 18, № 11

SiCl₄

[am. 26745]

1987

Ф 20 Б1177. Спектры поглощения SiCl_4 , Si_2Cl_6 , SiF_3CH_3 и GeF_4 в вакуумной ультрафиолетовой области. Absorption spectra of SiCl_4 , Si_2Cl_6 , SiF_3CH_3 and GeF_4 in the VUV region. Iduki T., Washida N., Itoh U., Toyoshima Y., Onuki H. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 136, № 5, 447—450 (англ.)

Измерены спектры поглощения молекул SiCl_4 , Si_2Cl_6 , SiF_3CH_3 и GeF_4 в области 110—200 нм (синхротронный источник вакуумного УФ-излучения) и спектр возбуждения флуоресценции Si_2Cl_6 . Полосы в спектрах первых трех молекул связаны в основном с ридберговскими переходами: SiCl_4 — $\lambda=140$ нм, $4s \leftarrow 3t_2$ (величина терма, $E=32\,200$ см⁻¹, $n^*=1,85$, $\delta=2,15$); 128,9, $4p \leftarrow 1t_1$ (19 400; 2,38; 1,62); 126,8, $4s \rightarrow 1e$ (29 200; 1,94; 2,06); 123,0, $4p \leftarrow 3t_2$ (22 300; 2,22; 1,78); 115,7, $4p \leftarrow 1e$ (21 600; 2,25; 1,75), МО $1t_1$, $3t_2$ и $1e$ — верхние занятые МО SiCl_4 ; Si_2Cl_6 — 174, $4s \leftarrow 4a_2$ (верхняя занятая МО).

(43)

~~14~~

х. 1987, 19, № 20

(31 400; 1,87; 2,13); 138, $ns \leftarrow n_{Cl}$; 129,3 $np \leftarrow n_{Cl}$; 124,0, $np \leftarrow n_{Cl}$; 119,0, $np \leftarrow n_{Cl}$; 112,5, $(a_2)^{-1}$; SiF_3CH_3 — 133,5, $4s \leftarrow e$ (31 500, $\delta=2,14$); 117,5, $4p \leftarrow e$ (21 400, $\delta=1,73$) и (или) $4s \leftarrow a_1$ ($\delta=2,19$). В спектре GeF_4 наблюдалась одна полоса, отнесенная к валентному переходу $\delta^* \leftarrow 1t_1$. В спектре испускания при фотовозбуждении Si_2Cl_6 (резонансные атомные линии H α -Лаймана и Ag 1) наблюдался переход $\tilde{A}^1B_1 \rightarrow \tilde{X}^1A_1$ $SiCl_2$.
 В. М. Ковба



SiCl_4^+

(Om. 31461)

1988

Lambert I.R., Ma-
son S.M. et al.,

(M. Chapp)

J. Chem. Phys., 1988,

89, N5, 2675-2682.

SiCl_4^+

(DM-31459)

1988

6030.24.
coem.

Lambert I. R.,
Mason S. M., et al.,
J. Chem. Phys., 1988,
89, NS, 2683-2690.

Silly

(OM 30332)

1988

Org C.K., Khoo F.S.,

re(Be-X),
meop.
pactem.

J. Phys. and Chem.
Solids, 1988, 49, n 8
833-886.

1988

SiCl₄

19 Б4463. Эмиссионная спектроскопия плазменного разложения тетрахлорида кремния. Emission spectroscopy of the plasma decomposition of silicon tetrachloride. Rowe M. D. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1988, Pt2, 84, № 2, 191—197 (англ.)

Изучено влияние условий СВЧ-разряда (скорость газового потока, состав газовой смеси, мощность разряда) в смесях SiCl₄ с избытком Ar на эмиссионные спектры частиц, возникающих при плазменном разл. SiCl₄. При больших избытках Ar и низких мощностях плазма имеет зеленую окраску, обусловленную переходом SiCl(A²Σ → X²Π). При снижении доли SiCl₄ интенсивность эмиссионной полосы SiCl₂ при 330 нм снижается, тогда как ранее неотождествленные полосы при 390 нм усиливаются показывая тем самым, что они не обусловлены SiCl₂. Термодинамич. расчеты в совокупности с наблюдением снижения конц-ии SiCl₂ и повышения конц-ии атомов Si показывают, что в этих условиях возрастает степень молек. диссоциации. Предположено, что полосы при 390 нм обусловлены переходом Si₂(H³Σ_u⁻ → X³Σ_g⁻).

В. Е. Скурат

(4) 18

X. 1988, 19, N 19

LiCl

1988

9 Б1312. Инфракрасная абсорбционная спектроскопия в свободной струе стабильных и нестабильных молекулярных образцов. Free-jet infrared absorption spectroscopy of stable and unstable molecular species / Takami M., Ohshima Y., Yamamoto S., Matsumoto Y. // Faraday Discuss. Chem. Soc.— 1988.— № 86.— С. 1—12.— Англ.

На диодном лазерном спектрометре с использованием сверхзвуковой струи в обл. частот $623\text{--}625\text{ см}^{-1}$ с точностью $0,0001\text{ см}^{-1}$ измерен спектр ИК-поглощения стабильной неполярной молекулы SiCl_4 . Анализ вращат. структуры полосы ν_3 выполнен с использованием эффективного гамильтониана с 5 параметрами. Частота полосы ν_3 равна $623,93151(11)\text{ см}^{-1}$. Приведены результаты измерений вандерваальсовых комплексов $(\text{N}_2\text{O})_2$ вблизи 1280 см^{-1} , $\text{C}_2\text{H}_2\cdot\text{Ar}$, $(\text{C}_2\text{H}_2)_2$, $(\text{C}_2\text{H}_2)_3$ в обл. $730\text{--}755\text{ см}^{-1}$, $\text{BF}_3\cdot\text{X}$ ($\text{X}=\text{Ne}, \text{Ar}, \text{Kr}$) вблизи 1450 см^{-1} , $\text{C}_6\text{H}_6\cdot\text{X}$ ($\text{X}=\text{Ar}, \text{Kr}$) вблизи 673 см^{-1} и $(\text{NO})_2$ вблизи 1865 см^{-1} . Обсуждены возможности использования метода ИК-микроволнового двойного резонанса для изучения молек. комплексов. С. Н. Мурзин

М.А.

Х. 1990, № 9

SiCy

lom. 30900

1988

Юрченко Э. Н., Бураев В. И. и др.,

гармонич.

силовое поле,

силов. пост.

ж. структур. химии,

1988, 29, 146, 70-76.



SiCl_4^+

1989

Shida Tadamasa.

возб. Kagaku (Kyoto) 1989,

Физикер. 44 (1), 66-7.

Состоян.

(сер. CF_4^+ ; III)

Lill4

(OM 84104)

1990

Bodeur S., Millie P., Nenner J.,
Phys. Rev. A 1990, 41, N1 252-263.

Single - and multiple-electron
effects in the Si 1s photoabsor-
ption spectra of Si X₄ (X = H, D, F,
Cl, Br, CH₃, C₂H₅, OCH₃, OC₂H₅) mole-
cules. Experi-ment and
theory.

SiCl₄

(DM-36010)

1991

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

Фомо-
злекмп.
чекмп

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

Vibrational fine structure
in the Si 2p ● photoelectron

spectra of simple gaseous
molecules.



Lilly

(от. 35844)

1991

Чумаевский Н. А.

Раман-
спектры,
частоты

Ж. Неорган. химии. 1991,
36, № 10, 2655-2660.

колеба-
ний

Изотопный эффект и спек-
тры хлоридов элементов IV и
V групп.

LiCl₄

(Ом 36 111)

1991

№ 4 Д73. Силовые поля тетраэдрических галогенидов и модель эффективных ядерных зарядов / Ежов Ю. С. // Ж. физ. химии.— 1991.— 65, № 11.— С. 3119—3121

Из эксперим. данных рассчитаны полные наборы постоянных гармонич. валентного силового поля тетрагалогенидов титана, германия, гафния и тетрахлоридов XCl_4 ($\text{X} = \text{C}, \text{Si}, \text{Sn}, \text{Pb}, \text{Zr}, \text{Th}, \text{V}, \text{Cr}$). Показано, что модель эффективных ядерных зарядов неадекватна полученным значениям постоянных.

М.А.

⊕ (7)

ф. 1992, № 4

$\text{CCl}_4, \text{SnCl}_4, \text{PbCl}_4, \text{ZrCl}_4, \text{ThCl}_4,$
 $\text{VCl}_4, \text{CrCl}_4$

SiCl₄ 1991
Ishikawa Hideaki,
Fujima Kazumi, et al,
M.N. J. Chem. Phys. 1991, 94,
NO. C. 6740-6750.

(cell. ● SiH₄; III)

Silly

1993

Ежов Ю. С.

М. Физ. химия. 1993.

и. н.

67, N 5. С. 1000-1003.

(сеч.  СС₄; III)

$SiCl_4$

$SiCl_4^-$

структ.
и табличн.
осн. и выжн.
возб. осей,
теор.
расчёт

1994

Gutsev G. L.

J. Phys. Chem. 1994,
98 (6), 1570-5.

● (сеч. $SiCl$; II)

Silly

1995

Wang, J.F.; Schwarz, W.H.E.,

Do,
Cue. NOCM,
re, meop.
PACET

THEOCHEM 1995, 338,
847-62.

(Cue. ● CO; III)

Silly

[OM 39602]

1998

Riehl H., et al.,

вак.м. J. & Electron Spectroscopy
yf-yauf. and Related Phenomena
чекмр. 1998, 97, 89-113

F: SiCl₄

P: 3

131:134914 Structure and Energetics of Group 14 (IV-A) Halides: A Comparison Density Functional-Pseudopotential Study. Escalante, Sigfrido; Vargas, Rubicelia; Vela, Alberto (Departamento de Química Inorgánica Posgrado Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, México 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 quasirelativistic effective core potentials. To analyze the role of d. inhomogeneities and asymptotic behavior of the Kohn-Sham effective potential in these molecules, following exchange-correlation energy functionals are tested: local, semi (generalized gradient), and hybrid functionals. For comparison, Hartree- results are also presented. Fully

C-A. 1.999, 131

optimized geometries are in very good agreement with exptl. available data and with other high-level theoretical. The energy differences associated with the dissociation and disproportionation reactions are reported. Zero-point corrections and atomic spin-orbit effects included in these reaction energies. The dissociation energies predicted at Hartree-Fock level are underestimated, the local energy differences are overestimated, and both the semilocal and hybrid approaches provide the best estimates for these reaction energies. The disproportionation energies, which are commonly used to explore the relative stability of different atomic valences, show a behavior that departs from that commonly known for reactions involving single atoms: the local and semilocal disproportionation energies have very similar values and follow the same trends.