

Метилзамещенные силаны
№6.

1985

22 Б1193. Спектры колебательных обертонов метилзамещенных силанов. Vibrational overtone spectra of methyl-substituted silanes. Bernbeim R. A., Lampe F. W., O'Keefe J. F., Qualey J. R. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 7, 1087—1094 (англ.)

Методом фотоакустич. спектроскопии изучены спектры поглощения метил-, диметил-, триметил- и тетраметилсилана в обл. обертонов вал. кол. связей Si—H и C—H ($4000—8500\text{ см}^{-1}$ и $12\,800—18\,200\text{ см}^{-1}$) (при комн. т-ре и давл. до 100 мм). Спектры интерпретированы в рамках модели локальных мод. Идентифицированы полосы, относящиеся к переходам с $\Delta V=5, 6, 7$ для обертонов $\nu(\text{C—H})$ и $\Delta V=8, 9$ для обертонов $\nu(\text{Si—H})$. Определены эффективные гармонич. частоты основных кол. $\nu(\text{C—H})$ и $\nu(\text{Si—H})$ и диагональные постоянные ангармоничности. Проведено сравнение результатов с аналогичными параметрами для молекул CH_4 и SiH_4 . Сопоставлены величины полуширин полос обертонов с полуширинами полос основных колебаний.

Г. М. Курамшина

Спектры
колебательных
обертонов

X. 1985, 19, № 22

$\text{Si}_2(\text{CH}_3)_6^{\pm}$

(om. 20996)

1985

Glidewell Ch.,

Inorg. Chim. Acta,
1985, 97, 173-178.

расчет
темп.,
структур,
 ΔH_f^0

C(Si₂H₄)₂

1985

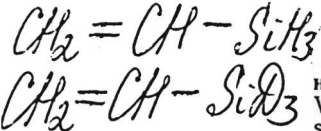
22 Б1027. Молекулярное и электронное строение металласпиропентанов. Molecular and electronic structures of metallaspiropentanes. Gordon Mark S., Boudjouk Philip. «J. Amer. Chem. Soc.», 1985, 107, № 5, 1439—1440 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с оптимизацией геометрии проведен расчет электронного строения систем типа $X(\text{Si}_2\text{H}_4)_2$, $X=\text{C}$ (I), моделирующих металлспиропентановые соединения Si (II). Расчет выполнен в базисе 3—21 ГФ, отдельные точки на Пв потенциальной энергии рассчитаны в базисе 6—31* ГФ. Наиболее устойчивой для I и II найдена искаженная пирамидальная структура, искаженная квадратная структура менее стабильна на 32,3 ккал/моль в случае I и 66,2 ккал/моль в случае II. Заряд центрального атома в оптим. структуре I $Z_{\text{C}} = -0,748$ значительно больше заряда в II $Z_{\text{Si}} = -0,167$, что может объяснить наблюдаемую относительную устойчивость II к электрофильной атаке. Вместе с тем I значительно более устойчив по отношению к диссоциации на $M(\text{Si}_2\text{H}_4)$ и Si_2H_4 : энергия диссоциации I составляет 133,1 ккал/моль, а для II 64,1 ккал/моль.

О. В. Гриценко

Do;

X. 1985, 19, 22
N 22 Si₂H₄



1985

19 Б1220. Колебательный спектр, анализ нормальных координат и торсионный барьер винилсилана. Vibrational spectra, normal coordinate analysis and torsional barrier of vinylsilane. Kalasinsky V. E., Rodgers S. E., Smith J. A. S. «Spectrochim. acta», 1985, A41, № 1—2, 155—165 (англ.)

Исследованы ИК-спектры поглощения и спектры КР молекул $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{SiH}_3$ и $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{SiD}_3$ в газовой фазе. Полосы отнесены к основным колебаниям, обертонам и комбинац. тонам. Вблизи полос ν_4 и ν_5 идентифицированы серии полос суммарных и разностных тонов торсионного колебания ν_{21} с ν_4 и ν_5 . Выполнен анализ нормальных координат этих молекул. Вычислены гармонич. силовые постоянные и распределение потенц. энергии колебаний по внутр. колебат. координатам, дано отнесение колебаний по их форме. Из частот комбинац. полос $\nu_4 \pm \nu_{21}$ и $\nu_5 \pm \nu_{21}$ вычислены частоты переходов между торсионными уровнями: 1—0=132, 2—1=121, 3—2=106, 4—3=94 см^{-1} для $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{SiH}_3$, из к-рых оценены параметры торсионного Пт: $V_3=529$, $V_6=11 \text{ см}^{-1}$. Е. В. Алиева

ν_i, ν_o

X. 1985, 19, N 19

$\text{CH}_3\text{SiSi}(\text{CH}_3)_3$ (M. 22225) 1985

Krogk-Jespersen K.

во время,
структура,
E;

J. Amer. Chem. Soc.,
1985, 107, N3, 537-
-543.

(Cm. SiLi_2 ; III)

$(\text{CH}_3)_2\text{SiSi}(\text{CH}_3)_2$ (m. 22.25) 1985

Krogh-Jespersen R.

рецензия,
отруктура,
E; J. Amer. Chem. Soc.,
1985, 107, N3, 537-
-543.

(ср. SiLi_2 ; III)

$(CH_3)_2SiSi(CH_3)_2$ (DM-2225) 1985
 $CH_3SiSi(CH_3)_3$

Krogh-Jespersen K.,
empyknypa, J. Amer. Chem. Soc.,
ab initio 1985, 107, n 3, 537-543.
pacem.

SiH_3CH_3

1985

Magnusson Eric.

Tetrahedron 1985,

meop.

paerem.

41 (14), 2945-8.

( cel. SiH_3BH_2 ; III)

1985

~~C(CH₃)₄~~Si(CH₃)₄

Спектр

12 Л234. Фотоакустическая спектроскопия обертонов соединений $M(CH_3)_4$ ($M=Si, Ge, Sn$). Photoacoustic overtone spectroscopy of $M(CH_3)_4$ compounds ($M=C, Si, Ge, Sn$). Manzanaresi Carlos, Yamasaki N. L. S., Weitz Eric, Knudtson J. Thomas. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 117, № 5, 477—484 (англ.)

Метод фотоакустич. спектроскопии (ФАС) применен для измерения спектров поглощения соединений ряда $M(CH_3)_4$, где $M=C, Si, Ge, Sn$, в газовой фазе в области энергий, соответствующих внутримолекулярным переходам в колебат. состояния связей C—H с большими квантовыми числами $n=1-7$. Для $n \leq 4$ спектры поглощения измерены и обычной спектрофотометрич. методикой, а для $n=5-7$ результат удалось получить только методом ФАС. Измерены абс. значения сечений поглощения для $n=5$ и 6, а также основные частоты локальных мод и параметры ангармоничности. Для высоких значений n обнаружено сужение линии поглощения с ростом массы центрального атома (M) молекул $M(CH_3)_4$. Библ. 34.

В. С.

ф. 1985, 18, № 12 $Ge(CH_3)_4, Sn(CH_3)_4, C(CH_3)_4$

$\text{CH}_3\text{C} \equiv \text{CSiH}_3$

1985

102: 140041p Millimeter-wave spectrum and internal rotation of 1-silylpropyne, $\text{CH}_3\text{C} \equiv \text{CSiH}_3$. Nakagawa, Jun; Yamada, Koichi; Bester, Manfred; Winnenwiser, Gisbert (Erstes Phys. Inst., Univ. Koeln, 5000 Cologne, 41 Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 110(1), 74-85 (Eng). Rotational transitions of $\text{CH}_3\text{C} \equiv \text{CSiH}_3$ were obsd. in the millimeter-wave region using a computer-controlled source-frequency modulation spectrometer with a 1.8-m-long free space absorption cell. The obsd. spectrum clearly showed the effect of internal rotation with a small potential barrier. It was analyzed by calcg. the torsion-rotation energies on the basis of torsional wave functions obtained by diagonalizing the torsional part of the Hamiltonian. The least-squares anal. has yielded the rotational const. $B = 2068.2817(4)$ MHz and a few centrifugal distortion const. The barrier height to internal rotation was detd. to be $3.77(70)$ cm⁻¹ from the contour map of the std. deviation. Also, the A rotational const. of the silyl group around the symmetry axis was estd. by fixing the A const. of the Me group to the value of $\text{CH}_3\text{C} \equiv \text{CH}$.

48 cncmp,

Vo, franz. not.

C. A. 1985, 102, N 16.



1985

9 Л170. Миллиметровый спектр и внутреннее вращение 1-силилпропина ($\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CSiH}_3$). Millimeter-wave spectrum and internal rotation of 1-silylpropylene, $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CSiH}_3$. Nakagawa Jun, Yamada Koichi, Bester Manfred, Winnewisser Gisbert. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 1, 74—85 (англ.)

В диапазоне 80—150 ГГц исследован МВ-спектр молекулы 1-силилпропина. Идентифицировано ~ 400 линий вращательных переходов с $J=20-19$, $26-25$, $27-26$, $28-27$ и $36-35$ и с различными K , m_s , m_c (m_s и m_c — квантовые числа внутреннего вращения групп SiH_3 и CH_3 соответственно) в основном колебательном состоянии. Анализ спектра выполнен по модели внутренних осей, в которой учитывается кватричное центробежное искажение и взаимодействие вращения молекулы с внутренним вращением, как по ф-лам теории возмущений, так и путем прямой диагонализации матрицы энергии. Определены значения вращательных и квар-

м.п., №;

ср. 1985, 18, № 9

тичных центробежных постоянных и параметров внутреннего вращения. Для барьера внутреннего вращения и вращательной постоянной группы SiH_3 получены значения $V_3 = 3,77 \text{ см}^{-1}$ и $A_s = 88\,500 \text{ МГц}$. Показано, что величина V_3 сильно коррелирована с разностью $5A_c - 9A_s$. Обнаружен случайный резонанс между уровнями с $m_s, m_c = 3,4$ и $6,1$. М. Р. Алиев



1985

18 Б1310. Миллиметровый спектр и внутреннее вращение 1-силилпропина, $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CSiH}_3$. Millimeter-wave spectrum and internal rotation of 1-silylpropyne, $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CSiH}_3$. Nakagawa J., Yamada K., Bester M., Winnewisser G. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 1, 74—85 (англ.)

На автоматизированном миллиметровом спектрометре с модуляцией источника и 1,8 м поглощающей ячейкой в свободном пространстве измерен в обл. частот 82—149 ГГц вращат. спектр 1-силилпропина, $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CSiH}_3$, в основном колебат. состоянии. Идентифицировано около 400 переходов $J=20-19$, $26-25$, $27-26$, $28-27$ и $36-35$. Анализ спектра выполнен с использованием модернизированного гамильтониана Кивельсона с учетом квартичного центробежного искажения, внутр. вращения и крутильно-вращат. взаимодействия. Определено 12 молек. постоянных, в том числе вращат. посто-

$$v_i, m, n;$$

X. 1985, 19, N. 18.

янная $B=2068,2848(6)$ МГц, барьер внутр. вращения $V_3=3,77(70)$ см⁻¹ и вращат. постоянная группы SiH₃ $A=88500(230)$ МГц. Полученные данные существенно уточняют результаты МВ-измерений Кирхгоффа и Лайде в обл. частот 8—37 ГГц (Krichhoff W. H., Lide D. R. Jr. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, 2203), в к-рых для барьера внутр. вращения получена оценка <1 см⁻¹.

С. Н. Мурзин



1985

Tossell J. A., Moore J. H.,
et al.

отрук-
тура

Inorg. Chem., 1985, 24,
N^o 7, 1100-1103.

(ср. SiH_4 ; III)

$\text{Si}(\text{CH}_3)_4$

1986

Almlof J., Kaegele K. Jr.,

Theor. Chim. Acta, 1986,
M. 17. 69, N5-6, 437-446.

( CH_4 ; III)

$\text{Me}_3\text{SiCMe}_2\text{CH}_2-\text{H}$ 15 Б4046. ДМ. 23438 1986
Кинетический метод определения энергии диссоциации связи $\text{Me}_3\text{SiCMe}_2\text{CH}_2-\text{H}$ и величина энергии стабилизации в β -кремнийзамещенном алкильном радикале. Kinetic determination of the bond dissociation energy $D(\text{Me}_3\text{SiCMe}_2\text{CH}_2-\text{H})$ and the magnitude of the stabilisation energy in a β -silicon-substituted alkyl radical. Auner Norbert, Walsh Robin, Westrup Julian. «J. Chem. Soc. Chem. Commun.», 1986, № 3, 207—208 (англ.)

Д₀,
Спектрофотометрически измерена кинетика р-ции $\text{J}_2 + \text{Me}_3\text{SiCMe}_3 \rightarrow \text{Me}_3\text{SiJ} + \text{HJ} + \text{Me}_2\text{C}=\text{CH}_2$, протекающей через промежут. радикал $\text{Me}_3\text{SiCMe}_2\text{CH}_2\cdot$, при т-рах 596—633 К и различных давл. реагентов. Энергия диссоциации связи $\text{Me}_3\text{SiCMe}_2\text{CH}_2-\text{H}$ равна 410 ± 11 кДж/моль. Энергия стабилизации $\text{Me}_3\text{SiCMe}_2\text{CH}_2\cdot$ составляет 12 ± 5 кДж/моль, что значительно выше энергии стабилизации α -кремнийзамещ. радикала $\cdot\text{CH}_2\text{SiMe}_2\text{CMe}_3$. Обсужден цепной механизм р-ции J_2 с $\text{Me}_3\text{SiCMe}_3$, стадией инициирования к-рой является образование радикалов $\text{J}\cdot$ при распаде J_2 . В. В. Неделько

Х. 1986, 19, N 15.

$(\text{CH}_3)_2\text{Si}^{\cdot}$

1986

Авакян В. Г.,
Волкова В. В. и др.

м. п. Докл. АН СССР, 1986,
287, N 5, 1150 - 1154.

 (сир. $\text{H}_2\text{Si}^{\cdot}=\text{S}$; III)

SiCH⁺
SiCH

Осн. 24/95

1986

Чаркеев О. П.,
Зноблева Т. С.

расчет
Ензона и
барьер
изомер.

Координат. химия,
1986, 12, N 8, 1011-1037.

SiC_2H

1986

Flores J. R., Largo-la-
brerizo A., et al.

u.n.

J. Mol. Struct. Theo-
chem, 1986, 148, N1-2,
33-43.

(cen. SiC_2 ; III)

SiC₂H⁺

[OM-25071]

1986

Flores J. R., Largo-Cab-
rerizo A., Largo-Cab-
rerizo J.,

at initio
pccm

J. Mol. Struct Theo-
chem, 1986, 148,

N1-2, ● 33-43.

C_2SiH_2

1986

19 Б1057. Структуры и энергии синглетного силациклопропенилидена и 14 менее стабильных изомеров C_2SiH_2 . Structures and energies of singlet silacycloprenyliden and 14 higher lying C_2SiH_2 isomers. Frenking Gernot, Remington Richard B., Schaefer Henry F. «J. Amer. Chem. Soc.», 1986, 108, № 9, 2169—2173 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП в двухэкспонентном базисе проведена оптимизация геометрий 15 изомеров синглетного C_2SiH_2 . Для трех наиболее стабильных

геометр.,
структура

изомеров — 3-силациклопропенилидена $CH=CH-Si:$ (I), винилиденсилена $H_2C=C=Si$ (II) и силиленил-ацетилен $HC\equiv C-SiH$ (III) оптимизация повторена в поляризованном базисе, вычислены колебат. частоты и интенсивности, а также проведено уточнение энергий методом конфигурац. взаимодействия. Глобальный ми-

X. 1986, 19, N 19

нимум Пв отвечает структуре I, II и III менее стабильны соотв. на 17 и 22,4 ккал/моль. Повторное исследование I—III двухконфигурац. методом ССП слабо влияет на результаты. Кроме I—III, на Пв обнаружены еще 5 минимумов, лежащих значительно выше по энергии.

В. Я. Беспалов

CaSiH_2

(Dm. 24068)

1986

ссылаясь
на
журнал, J. Amer. Chem. Soc.,
март, 1986, ● 108, N 9, 2169 -
апрель 2173.

SiC₂H⁺

1986

8 Б1059. Неэмпирическое исследование протонирования SiC_2 . An ab initio study of SiC_2 protonation. Flores J. R., Largo-Cabrerizo A., Largo-Cabrerizo J. «J. Mol. Struct. Theochem», 1986, 148, № 1—2, 33—49 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП с использованием базисных наборов ОСТ-3 ГФ, 6-31 ГФ и 6-31 ГФ* проведены расчеты электронного и геометрич. строения молекулы SiC_2 (I) и ее протонированных изомеров. Для протонированных структур проведены расчеты в базисе 6—31 ГФ**. Энергии корреляции всех структур найдены по теории возмущения Мёллера — Плессета до 4-го порядка. Линейная протонированная по атому С форма $\text{SiCCH}^+(\text{C}_{\infty v})$ выгоднее др. изомеров $\text{CCSiH}^+(\text{C}_{\infty v})$ и $\text{CSiHC}^+(\text{C}_{2v})$. Оцененное с учетом энергии нулевых колебаний и энергии корреляции сродство к протону равно 231,8 ккал/моль.

И. Н. Сенченя

М.П.



Х. 1987, 19, № 8

$(CH_3)_2 Si$

1986

Gordon M. S., Schmidt
M. W.

et. n.

Chem. Phys. Lett., 1986,
132, N 3, 294-298.

(cu. ● $Li_2 Si$; III)

$\text{Si}(\text{CH}_3)_2$ [Om. 25059]

1986

Grev R. S., Schaefer H. F. III

Yop
chemp

J. Amer. Chem. Soc.,
1986, 108, N 19, 5804-
5808.

$(CH_3)_3Si-X-[am. 24626]$

1986

$-Si(CH_3)_3$

$X=O, S, Se, Te$

Hamada K., Morishita H.,

Spectrosc. Lett., 1986, 19,

N 7, 815-826.

Раман.

ИК и 1H -NMR

спектры

SiCH₃

1986

19 Б1307. Отнесение частот колебаний молекулы диметилсиландиола. Molecular vibration frequency assignment of dimethylsilanediol. Ho Thien D. «Appl. Spectrosc.», 1986, 40, № 1, 29—35 (англ.)

Исследованы спектры ИК-поглощения (4000—400 см⁻¹) мономеров диметилсиландиола (I), диметилсилан-d₂-диола (II) и тетраметилдисилан-1,3-диола (III) (димера) в виде табл. с KBr и эмульсией с вазелиновым маслом. Изучены поляризованные спектры ИК-поглощения и спектр КР монокристалла I. Предложено отнесение фундаментальных частот колебаний для модели I, имеющей симметрию C_{2v}, выделены обл. групповых частот фрагментов SiCH₃, SiOH, OH.

Г. М. Курамшина

(42) 1X

X. 1986, 19, N 19

SiH_3CH_3 (om 23466)

1986

Luke B.T., Pople J.A.,

Krogh-Jespersen M.B., et al.,

J. Amer. Chem. Soc., 1986,

108, N2, 260-269.

ab initio
prozet,
struktur,
energi
et al.



SiH_3CH

1986

Lucke Brian T., Pople J. A.,
et al.

J. Amer. Chem. Soc.,
1986, 108, n2, 260-
- 269.

геометр.,
структ.,
E, D.

(corr. SiH_2 ; III)

H Si CH

10M 234671

1986

Luke B.T., Pople J.A.,

Krogh-Jespersen M.-B.,

ab initio,
структура,
энергия
связи

J. Amer. Chem. Soc., 1986,
108, no. 2, 270-284.

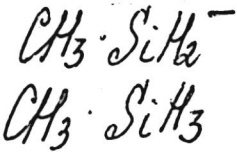
CH₃ SiH₃

1986

(ν_0)

105: 161149g The torsional spectrum methylsilane. Moazzen-
Ahmadi, N.; Ozier, I.; Jagannath, H. (Dep. Phys., Univ. British
Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 2A6). *J. Mol. Spectrosc.* 1986,
119(2), 299-312 (Eng). Fourier transform spectroscopy was used to
study the weak, perturbation-allowed torsional spectrum of MeSiH₃.
At 330-380 cm⁻¹, 339 lines in the ($\nu = 2 \leftarrow 0$) band were measured at
low pressure with a resolu. of 0.015 cm⁻¹. At 150-360 cm⁻¹, partially
resolved torsion-rotation structure was obsd. at moderate pressures
with a resolu. of 0.15 cm⁻¹ in 5 bands; $\nu = 1 \leftarrow 0$, $2 \leftarrow 1$, $2 \leftarrow 0$, $3 \leftarrow 1$,
and $4 \leftarrow 2$. By combining 13 low-resolu. Q-branch frequencies for
 $\nu 3 \leftarrow 1$ and $4 \leftarrow 2$, the high-resolu. ($\nu = 2 \leftarrow 0$) measurements, and
the microwave-mol. beam data set for $\nu \leq 2$ presented earlier by M.
Wong et al. (1983), it was possible to det. 20 torsional, rotational, and
distortion consts., including effective values for the height V_3 of the
hindering barrier and the 1st-order correction V_6 in the Fourier
expansion of the potential function.

C. A. 1986, 105, 118



[Um. 23 335]

1986

Magnusson E.,

J. Amer. Chem. Soc.,
1986, 108, N1, 11-16.

геометр.,
структ.,
стабильность
конформаций,
теор. расчет

SiH_3CH_3 | Om. 25343a" |

1986

Magnusson E.,

Austral. J. Chem., 1986, 39, N 5,
747-755.

М.П.,
КВ.Мех.
Почет.

Si-отанешка

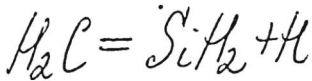
1986

— 20 Б1041. Структура и потенциальная функция внутреннего вращения аллилсилана: результаты неэмпирического расчета в базисе 3-21 ГФ* и методом MM2. Structure and torsional potential function of allylsilane: results from MM2 and ab initio calculations [3-21G(*)]. Profeta S., Unwalla R. J., Cartledge F. K.: «J. Org. Chem.», 1986, 51, № 10, 1884—1885 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП в базисе 3-21 ГФ* и методом молек. механики MM2 с параметрами, подогнанными по неэмпирич. расчету, исследованы геометрия и барьер внутр. вращения в аллилсилане. Равновесная конформация соотв. углу $\sim 103^\circ$ от цис-формы, результаты неэмпирич. расчета отклоняются от эксперим. данных не более чем на 0,0027 нм и $2,9^\circ$, расчета методом MM2 — на 0,0024 нм и $3,1^\circ$. Величины цис- и транс-барьеров равны 2,25 и 3,43 ккал/моль (3-21 ГФ*), 2,09 и 2,75 ккал/моль (MM2). В. А. Болотин

структура и
потенц. ф-ция

X. 1986, 19, N 20



Om. 22991

1986

13 Б1057. Теоретические исследования радикальной реакции $\text{H}_2\text{C}=\text{SiH}_2+\text{H}$. Theoretical studies of the radical reaction $\text{H}_2\text{C}=\text{SiH}_2+\text{H}$. Sakai Shogo, Gordon Mark S. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 123, № 5, 405—408 (англ.)

Неэмпирическим многоконфигурац. методом ССП (МК ССП) в базисе 3—21 ГФ с варьированием всех независимых степеней свободы рассчитаны силаэтилен (I), переходные состояния (ПС) и продукты р-ций $\text{I}+\text{H}\rightarrow\text{CH}_3\text{SiH}_2\cdot$ (1) и $\text{I}+\text{H}\rightarrow\cdot\text{CH}_2\text{SiH}_3$ (2). Энергии стационарных точек вычислены в базисе 6—31 ГФ** с учетом электронной корреляции в 4-м порядке теории возмущений Меллера—Плессета (ТВМП-4). ПС обеих р-ций имеет симметрию C_s . Длина образующейся связи $\text{C}-\text{H}$ ($\text{Si}-\text{H}$) в ПС р-ции 1 (2) составляет 2,301 (2,919) А. Вычисленные по МК ССП (в скобках — ТВМП-4 актив. барьеры и теплоты (ккал/моль): р-ция (1) 2,13 (11,25) и —65,23 (—69,84) р-ция (2) 0,43 (9,44) и —50,37 (—55,89).

В. И. Фаустов

геометрия,
структура, ΔH

X. 1986, 19, n13

CH₆Si

1986

④11 Б1089. Нахождение характеров и матриц неприводимых представлений группы симметрий нежесткой молекулы метилсилана. Тулуб А. В., Дышлис А. А., Морозов В. П. «Теор. и эксперим. спектроскопия». Днепропетровск, 1986, 117—125

Предложен метод нахождения характеров и матриц неприводимых представлений группы симметрии нежестких молекул. Метод применен к молекуле метилсилана.

Резюме

X. 1987, 19, N 11

$C_3H_5SiH_3$

1986

105: 234775v Barrier to internal rotation of the silyl group in cyclopropyl silane from the MW spectrum in the first excited torsional state. Typke, Volker; Botskor, Ivan; Wiedenmann, Karl Heinz (Bereichsrechenzent. Forsch. Lehre, Univ. Ulm, D-7900 Ulm/Donau, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 120(2), 435-40 (Eng). The microwave (MW) spectrum of the 1st excited state of the internal rotation of the SiH_3 group in cyclo- $C_3H_5SiH_3$ was recorded and analyzed at 6.9-38.0 GHz. Recordings were made with conventional Stark spectroscopy as well as with MW-MW ODR. From the anal. of the torsional splittings the following parameters were derived: $V_3 = 1917.6(44)$ cal/mol, $I_a = 5.888(14)$ u $\cdot$ A 2 , $\theta_a = 21.56(21)^\circ$.

(yb, Vo)

C. A. 1986, 105, N 26

$\text{Si}(\text{CH}_3)_2$

(Im. 26466)

1987

Baggott J.E., Blitz M.A.,
Frey H. Jr., et al.,

сиркыр
ноуиуиуи.

Chem. Phys. Lett., 1987,
135, N1-2, 39-45.

$\text{Si}(\text{CH}_3)_4$

1987

У 6 Л316. Исследование валентных уровней $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$, $\text{Sn}(\text{CH}_3)_4$ и $\text{Sn}(4d)$ в молекуле $\text{Sn}(\text{CH}_3)_4$ методом фотоэлектронной спектроскопии с варьируемой энергией фотонов. Variable-energy photoelectron study of the valence levels of $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ and $\text{Sn}(\text{CH}_3)_4$ and the $\text{Sn } 4d$ levels of $\text{Sn}(\text{CH}_3)_4$. Bice J. E., Tan K. H., Bancroft G. M., Tse J. S. «Inorg. Chem.», 1987, 26, № 24, 4106—4114 (англ.)

В области 21—70 эВ с использованием для возбуждения монохроматизированного синхротронного излучения получены фотоэлектронные спектры молекул $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ и $\text{Sn}(\text{CH}_3)_4$ в газовой фазе. Хорошее соответствие между полученными экспериментально и теоретически рассчитанными методом рассеянных волн X_α коэф. ветвления фотоэлектронов позволило надежно установить порядок следования заполненных орбиталей в молекулах: $3t_2 < 1t_1 \approx 1e \approx 2t_2 < 2a_1$. Сопо-

М.Н.

(4) [X]

ф 1988, 18, N 6

ставление резонансов формы, обнаруженных в областях 4, 10 и 20 эВ с аналогичной структурой для фторидов CF_4 , SiF_4 , SF_6 и SeF_6 , свидетельствует о преобладающей зависимости интенсивности этих резонансов от симметрии поля лигандов, а не от конкретного молекулярного потенциала. Библ. 59. М. Т.

$H_3SiC:CH$

(Om. 27171) 1987

/ 107: 66939x Microwave spectrum of silylacetylene in the $4\nu_{10}$ state. Carlier, J.; Bauer, A.; Van Eijck, B. P. (Lab. Spectrosc. Hertziennne, Univ. Lille I, 59655 Villeneuve d'Ascq, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 124(1), 162-71 (Eng). The microwave spectrum of $H_3SiC:CH$ in the $4\nu_{10}$ state was investigated at 29-79 GHz. After assignment by graphical methods deduced from approx. anal. formulas, mol. consts. were detd. through an anal. by direct diagonalization. Some slight anomalies appeared. A comparison was made between the consts. of the different $n\nu_{10}$ states.

(YB cnekm)

C.A. 1987, 107, N8

$\text{CH}(\text{SiH}_3)$

[om. 27760a"]

1987

Carter E. A., Godclard W. A. III,

суммар-
ный
расчет,
теорет.
расчет.

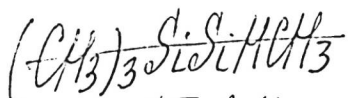
J. Phys. Chem., 1987,
91, n 18, 4651-4652.



(см. CH_2 ; III)

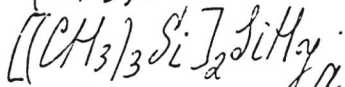
$(SiH_2)_nX$ [Om. 28 177] $(SiH_2)_nCH_2$ 1987
(X = CH₂, NH, O,
PHuS)
n = 2 u 3

Грев R.S., Schaefer H.F., III
Y. Amer. Chem. Soc., 1987,
смыкнута 109, N 22, 6577-6585.



(DM 28116)

1987

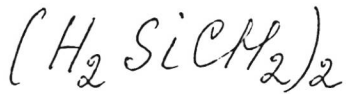


Jackson R.A., Rhodes Ch. J.,

chem.

Organomet. Chem., 1987,

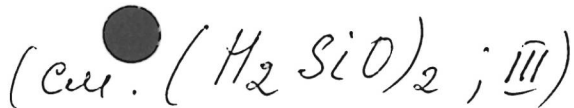
335, N 2, 45-48.



1987

Jemmis Euvathingal
D., et al.

empyrm. J. Chem. Soc., Dalton
Trans. 1987, (1), 271-3.



Si-отак-
соединения:

(от. 27688)

1987

Мастюков В.С., Стрелков С.А.,
строение Голубинский А.В. и др.,
(Электро-
нография) Я. структур. Химии,
1987, 28, N 5, 49-55.

Строение молекулы 3,3-диметил-
3-сильвестрана по данным
двойной электронографии с учетом

- Колебательных факторов.

CH_3SiH_3

1987

№ 20 Б1253. Исследование обертона торсионного колебания молекулы CH_3SiH_3 с использованием диодного лазера. Diode-laser study of the torsional overtone in CH_3SiH_3 . Moazzen-Ahmadi N., Ozier I. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 123, № 1, 26—36 (англ.)

На диодном лазерном спектрометре в области $330\text{--}380\text{ см}^{-1}$ исследован ИК-спектр поглощения молекулы CH_3SiH_3 при длине оптич. пути 64 м. Идентифицировано 87 линий вращат. структуры обертона торсионного колебания $2\text{--}0$. Анализ спектра выполнен с использованием торсионно-вращат. гамильтониана, полученного авторами ранее, с 21 параметром. Определены значения вращат. постоянных, постоянных квартичного и секстичного центробежного искажения и параметров торсионного потенциала и торсионно-вращат. взаимодействия. Для барьера внутреннего вращения вокруг связи C--Si получена величина $V_3 = 591,37\text{ см}^{-1}$.
Е. В. Алнева

М.П.

X. 1987, 19, N 20

CH_3SiH_3

1987

107: 245309p Application of the contact transformation method to torsional problems in methylsilane. Moazzen-Ahmadi, N.; Ozier, I. (Dep. Phys., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 2A6). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 126(1), 99-112 (Eng). The effect of the torsional degree of freedom on redundancies in the Hamiltonian and on the dipole operator was investigated for methylsilane-like mols. By applying a rotational contact transformation on the torsion-rotation Hamiltonian H_{TR} for the ground vibrational state, a systematic method is demonstrated for treating the redundancies that relate different terms in H_{TR} . In general, with this method, the exptl. accessible mol. parameters in the reduced Hamiltonian can be related to the phys. significant mol. parameters in the untransformed Hamiltonian. H_{TR} Contains a new term which has matrix elements with selection rules ($\Delta K = \pm 3$), ($\Delta \sigma = 0$), and $\Delta \nu_{\text{T}}$ arbitrary, where ν_{T} and σ label the torsional levels and sublevels, resp. As a result of this term, the distortion dipole const. μ_D which characterizes ($\Delta K = \pm 3$) matrix elements in C_{3v} mols. cannot, in systems like MeSiH_3 , be ascribed entirely to centrifugal distortion, but can contain a significant contribution from torsional effects. Furthermore, new transitions can appear in the pure torsional bands which may be strong enough to observe in low barrier mols. By applying a

морзи онни
колебание

С.А. 1987, 107, N 26

vibrational contact transformation, the form is derived of the leading torsional terms in the dipole moment expansion. The four dipole distortion consts. μ_0^T , μ_2^T , μ_1^T , and $\mu_{\perp}^T$ which characterize these terms are related to the mol. parameters that enter the Coriolis, centrifugal distortion, and anharmonicity contributions to the vibration-torsion-rotation Hamiltonian.



$\text{CH}_3\text{SiH}-\text{H}$

1987

5 Б4088. Механизм газофазного термоллиза монометилсилана. Mechanism of the gas-phase thermolysis of monomethylsilane. Neudorfl P. S., Lown E. M., Safarik I., Jodhan A., Strausz O. P. «J. Amer. Chem. Soc.», 1987, 109, № 19, 5780—5789 (англ.)

В статистическом кварцевом реакторе с помощью методов ГХ, ГЖХ и МС исследовано влияние давл. (33—400 Торр), т-ры (340—440° С) и степени конверсии (0,1—20,5%) на термоллиз CH_3SiH_3 (I). При малых степенях конверсии (~0,5%) перв. р-цией термоллиза является молек. элиминирование $\text{H}_2: \text{I} \rightarrow \text{CH}_3\ddot{\text{Si}}\text{H} + \text{H}_2$ (1). Разл. CH_3SiD_3 дает только D_2 . Др. основным наряду с H_2 продуктом является симм. диметилдисилан (II), образующийся по р-ции $\text{I} + \text{CH}_3\ddot{\text{Si}}\text{H} \rightarrow \text{II}$ (2). В малых кол-вах образуется $(\text{CH}_3)_2\text{SiH}_2$ (III). Из эксперим. с добавкой 10% C_2H_4 , резко снижающего (в кач-ве ловушки

Д_c

(41) X

X. 1988, 19, 15

J., №

$\text{CH}_3\text{SiH} (\Delta\text{H}^\ddagger)$

радикалов) выходы H_2 и II и полностью подавляющего выход III, следует, что дополнит. кол-ва H_2 могут образовываться вследствие протекания катализируемой на Пв реактора р-ции $\text{I} \rightarrow \text{CH}_3\text{SiH}_2^\bullet + \text{H}^\bullet$ (3) и след. за ней радикальных р-ций $\text{CH}_3\text{SiH}_2^\bullet + \text{I} \rightarrow \text{II} + \text{H}$ и $\text{H} + \text{I} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3\text{SiH}_2^\bullet$. Оценка из кинетич. данных, указывающих на линейный обрыв на Пв реактора цепи радикальных р-ций, дает для длины цепи величину 4,5—5,5. По скоростям р-ций (1) и (2) получены выражения для константы скорости р-ции (1): $\lg k_1^{(1)} = (15,02 \pm 0,10) - (63\,270 \pm 310)/2,3 \text{ RT}$ и $\lg k_1^{(2)} = (14,87 \pm 0,12) - (63\,150 \pm 350)/2,3 \text{ RT}$, при этом значение $k_1^{(1)}$ содержит небольшой вклад от радикальных процессов. Для константы скорости р-ции (3) получено выражение $\lg k_3 = 12,7 - 57\,900/2,3 \text{ RT}$. Оценка из кинетич. данных величин $D(\text{CH}_3\text{SiH}-\text{H})$ и $\Delta H_f(\text{CH}_3\text{SiH})$ дает для них значения соотв. 73,5 и 51,9 ккал/моль. Библ. 31.

А. М. Сахаров

$\text{Si}_2(\text{CH}_3)_2$

[Ом. 27694]

1987

4 Б1083. Является ли диметилдисилин короткоживущей частицей с тройной связью? Dimethyldisilyne: a fleetingly observed species incorporating a triple bond? Thies B. S., Grev R. S., Schaefer H. F. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 140, № 4. 355—361 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП в двухэкспонентных базисах Хузинаги — Даннинга, дополненных поляризац. d -ф-циями на атомах Si (базис А) и Si и C (базис Б) изучена синглетная Пв потенциальной энергии системы $\text{Si}_2(\text{CH}_3)_2$. Энергии стационарных точек уточнены расчетами с учетом электронной корреляции по методу конфигурац. взаимодействия. На уровне ССП в обоих базисах найдено, что глобальному минимуму на ППЭ отвечает силилиден, а твист-конформер диметилдисилина отвечает локальному минимуму, лежащему на ~15 ккал/моль выше по энергии. Линейная, димостиковая и транс-конформации диметилдисилина отвечают

М.П.

Х. 1988, 19, № 4

переходным состояниям и лежат выше по энергии. Учет электронной корреляции заметно стабилизирует транс-структуру, на основании чего сделан вывод, что она возможно соответствует наблюдаемой экспериментально частице (см. Sekiguchi A., Zigler S., West R., «J. Amer. Chem. Soc.», 1986, 108, 4241) в р-ции термоллиза комплексов.

И. Сенченя



$\text{Si}_2(\text{CH}_3)_2$ [om. 27694]

1987

108: 82326w Dimethyldisilyne: a fleetingly observed species incorporating a triple bond? Thies, Brenda S.; Grev, Roger S.; Schaefer, Henry F., III (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 140(4), 355-61 (Eng). The singlet, potential-energy surface of $\text{Si}_2(\text{CH}_3)_2$ was studied by using ab-initio SCF methods and CI for energy comparisons. At the SCF level, the global min. was silylidene; the twist structure was also a min. Linear, dibridged, and trans structures were found to be transition states, and lie higher in energy. Higher levels of theory are necessary for a quant. description of the energy hypersurface. Specifically, the trans structure was stabilized greatly when the effects of electron correlation were included. The trans structure, incorporating a Si-Si bond order of roughly 2.5, is the most logical candidate for the species obsd. in the lab. by A. Sekiguchi, et al., (1986).

теорет. рас-
чет потенци-
альной поверх-
ности
структур.

C.A. 1988, 108, N 10.

HCSiH_3^{2+}

(DM. 26829)

1987

Wong M. W., Yates B. F.,
Nobes R. H., et al.

эмпык-
мүрө,
ab initio
парчем

J. Amer. Chem. Soc., 1987,
109, 11, 3181-3187.

$[\text{Si}(\text{CH}_3)_3]_4$ [am. 29940]

1988

Beagley B., Pritchard R.G.
et al.,

монокри-
сталлическая

(структурно
исследована) 7. Mol. 176,

Struct., 1988,
81-87

$\text{SiH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2$ [om. 31403] 1988

Bernardi F., Fossey J.,
J. Mol. Struct. (Theochem),
1988, 180, 79-93.

смысл,
ab initio
расчет.

CSiCH⁺

1988

Cabrero A.,

Chem. Phys. Lett., 1988,

u. n.

145, N2, 128-133.

(, Si₂C; III)

М.В.В.В.

Si-C-H соединения

1988

6 Б4015. Кинетика образования диметилсиландиила (диметилсилилена) при пиролизе пентаметилдисилана и гептаметилтрисилана. Kinetics of the formation of dimethylsilanediyl (dimethylsilylene) in the pyrolysis of pentamethyldisilane and heptamethyltrisilane / Clarke M. P., Davidson I. M., Dillon M. P. // J. Chem. Soc. Chem. Commun.— 1988.— № 18.— С. 1251—1252.— Англ.

В проточном реакторе с перемешиванием с применением метода ГХ—МС изучена кинетика пиролиза $\text{Me}_3\text{SiSiMe}_2\text{SiMe}_2\text{H}$ (I) при $394\text{—}450^\circ\text{C}$ в присутствии 5-кратного избытка 2,3-диметилбутадиена-1,3 (II) в кач-ве ловушки образующегося Me_2Si . Предложена стадийная схема механизма пиролиза I в присутствии II. Получены след. значения аррениусовских параметров р-ции $\text{I} \rightarrow \text{Me}_3\text{SiSiMe}_2\text{H}$ (III) + Me_2Si : (1): $\lg A$ (с^{-1}) = $11,8 \pm 0,4$, $E = 175 \pm 5$ кДж/моль. Методом компьютерного моделирования показано, что при пи-

Х. 1989, N 6

ролизе I и III в присутствии избытка II скорость образования силациклопентенового продукта захвата Me_2Si : определяется скоростью перв. стадии пиролиза I и III. Обсуждается значение полученных результатов для термодим. оценок р-ций (I) и $\text{III} \rightarrow \text{Me}_3\text{SiH} + \text{MeSi}$.

А. М. Сахаров



$\text{Si}_2\text{H}_4\text{CH}_2$ [DM. 30547] 1988

Cremer D., Gauss J.,

Cremer E.,

J. Mol. Struct. Theorchem.

1988, 169, 531-561.

неоп. пакет
смысл,
неприм.

16 Б4046. Сравнение C—H- и Si—H-кислотностей метилсиланов в газовой фазе. Gas-phase acidities of methylsilanes: C—H versus Si—H. Damrauer R., Kass S. R., DePuy C. H. «Organometallics», 1988, 7, № 3, 637—640 (англ.)

На струевой установке с масс-спектрометрич. детектированием продуктов изучены газофазные процессы депротонирования силана, метилсилана, диметилсилана, триметилсилана, тетраметилсилана и фенилсилана рядом орг. и неорг. анионов в атмосфере He при 298 К. Для определения природы анионов, образующихся из изученных замещ. силанов (карбанион или силильный

анион) использована р-ция анионов с N_2O , приводящая к разным по массе и хим. природе продуктам. Энтальпии отрыва ионов H^+ от связей $C-H$ в молекулах замещ. силанов составляют $387-391$ ккал/моль, а от связей $Si-H$ 383 ± 3 ккал/моль ($370-371$ ккал/моль в случае силана и фенилсилана). Вычисленное сродство к электрону образующихся из силанов анионов изменяется в диапазоне $20-33$ ккал/моль. Констатируется, что в процессе депротонирования более термодинамически устойчивые продукты разрыва связей $Si-H$, как правило, не являются перв. продуктами р-ции; продукты разрыва связей $C-H$ являются кинетически более вероятными.

А. Б. Мазалецкий

C_2H_5SiH

om, 31859

1988

$C_2H_5SiH^+$

110: 160562c Low-lying electronic states ionization potential for ethylisilylene. Francisco, Joseph S. (Dep. Chem., Wayne State Univ., Detroit, MI 48202 USA). *Mol. Phys.* 1988, 65(5), 1257-61 (Eng). The equil. geometries were optimized for ground and low-lying excited states of $EtSiH$ and for the ground state of $EtSiH^+$ using UHF/3-21G and UHF/6-31G* levels of theory. Electronic excitation energies and the adiabatic ionization potential for $EtSiH$ were calcd. at the PUMP4/6-31G* (pure unrestricted Uoeller-Plesset) level of theory.

сруктура,
моп. расч

C.A. 1989, 110, N18

$H_2Si=CH_2$ (Um. 31012)

1988

Brev R.S., Scuseria G.E.
et al.,

J. Amer. Chem. Soc.,
1988, 110, ^{N22}, 7337-7339

Relative Energy • ies of Sila-
ethylene and Methylsilylene.

$C_2Si(BiCC)$ [om. 30490] 1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N 2,

309.

CH_4Si
 (CH_3SiH)

com. 30490 1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi ; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 971.

CH_2Si
 (H_2CSi)

[om. 30490] 1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, n2, 359.

CSiH₃
SiCH₃

OM, 31146

1988

109: 237429d Electron affinities of the carbon and silicon hydride XYH₃ systems (X, Y = carbon, silicon). Kalcher, Josef; Sax, Alexander F. (Inst. Theor. Chem., Karl-Franzens Univ. Graz, A-8010 Graz, Austria). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 150(1-2), 99-104 (Eng). Electron affinities (EA) of the title compds. are investigated. The CCH₃⁻ anion turns out to be unstable, whereas pos. EAs are predicted for CSiH₃, SiCH₃, and SiSiH₃. For CSiH₃⁻ as well as SiSiH₃⁻ there should exist at least one stable excited state. Pronounced influence of the YH₃ substituent on the adiabatic electron affinities and thus on the stabilities of the anions is obsd.

(Ae)

(+) ~~Si~~ SiSiH₃

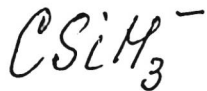
C.A. 1988, 109, N 26

$\text{Si}(\text{CH}_3)_4^+$ (om. 29700) 1988

Kudo T., Nagase S.

Chem. Phys., 1988, 122,
N2, 233-245.

Jahn-Teller Distortions
of SiH_4^+ and $\text{Si}(\text{CH}_3)_4^+$;



1988

Kalcher Josef, Sax
Alexander F.

m.n.

Chem. Phys. Lett. 1988.

150, N1-2. C. 99-104.

(see  CCH₃⁻; III)

SiC₂H

(Om. 29961)

1988

ab initio
pacem

109: 156704n A preliminary theoretical study of the ethynyl=silyldiyne (SiC₂H) radical: implications in astrophysics. Largo-Cabrerizo, A.; Flores, J. R. (Univ. Chem. Lab., Canterbury/Kent, UK CT2 7NH). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 147(1), 90-4 (Eng). An ab-initio study of the low-lying states of SiC₂H was carried out at the UHF level. A linear SiCCH species (²Π) was found to be the ground state, with a cyclic ²A' state lying about 4.5 kcal/mol higher at correlated levels. A ²A (C_i symmetry) state was found to be the lowest-lying state of HSiCC. In view of the predicted rotational consts. and dipole moments, the possibility of any of these SiC₂H species being the new radical recently detected in space is discussed.

C. A. 1988, 109, N 18

SiCCN

(DM-29961)

1988

22 Б1037. Предварительное теоретическое исследование радикала SiC_2H : выводы для астрофизики. A preliminary theoretical study of the SiC_2H radical: implications in astrophysics. Largo-Cabrerizo A., Flores J. R. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 147, № 1, 90—94 (англ.)

Проведены неэмпирич. расчеты низколежащих состояний радикала SiCCN . Для 6 возможных конфигураций радикала проведена оптимизация геометрии в базисе 6-31 ГФ** в рамках неограниченного метода ССП. Для полученных дублетных и квартетных состояний рассчитаны колебат. спектры (в базисе 6-31 ГФ**) и полные энергии (в базисе 6-31 ГФ** с учетом поправок 4-го порядка теории возмущений). Наиболее низким по энергии найдено $^2\Pi$ состояние с линейным строением радикала. Состояние $^2A'$ с циклич. структурой радикала лежит на 4,5 ккал/моль выше с учетом корреляции. Анализ вращат. постоянных и дипольных моментов показал, что различные формы радикала SiC_2H , по-видимому, не соответствуют наблюдаемым в звездном спектре линиям частицы с $^2\Sigma$ основным состоянием. В. Б. Лужков.

М.А.

X. 1988, 19, N22.

CH_4Si

[om. 30490]

1988

$(\text{CH}_2=\text{SiH}_2)$

Jacox M.E.,

Ti, Vi;

J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 470.



Si_2CH^+

(DM-29099)

1988

uomemp.

KORSAM.

12 cm mkr

Largo - Cabrero VA,
Flores I.R.,

Chem. Phys. Lett.,
1988, 145, N. 2,
128 - ● 133.

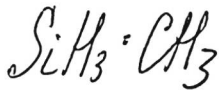
$\text{SiH}_3\text{C}\equiv\text{CH}$ (Om. 30964) 1988

Mohan S., Payami F.,
et al.,

(Vi, DjK) Proc. Indian Nat. Sci.
Acad. A 1988, 54, N2,
315-319 ●

(м. 30899)

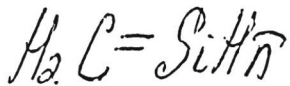
1988



Щербаев Б.Ф.,

теорет.
расчет

дл. структур. химии,
1988, 29, №6, 128-130



[OM 29187] 1988

Von Rague Schleyer P,
Kost D.

Do(Si=C) J. Amer. Chem. Soc.,
1988, 110, N7, 2105-
● — 2109.

$H_2Si = CH_2$ (DM-29187) 1988

Von Rague' Schleyer P,
Kost D.

($d_0(C=Si)$) J. Amer. Chem. Soc.,
1988, 110, N 7, 2105-
2109.



1988

Wiberg K.B., Мурко М.А.

и.п.

J. Mol. Struct. Theochem.

1988, 169, c. 355-365.

(см. CH_3NH_3^+ ; III)



1989

12 Б1051. Электронное строение и динамическая структура кремнийорганических ионов в газовой фазе / Абронин И. А., Щеголева Л. Н., Слюсаренко Т. Ф., Бочкарев В. И. // Металлоорг. химия.— 1989.— 2, № 2.— С. 419—421.— Рус.

Неэмпирическим методом ССП в базисе 3-21 ГФ с оптимизацией геометрич. параметров проведены расчеты катион-радикалов $C_2H_4SiX_2^+$, где $X=H, Cl$. Для этих систем наиболее устойчива искаженная треугольная структура симметрии C_s , стабилизированная псевдоэф-фектом Яна—Теллера. Резюме

М.П.

(4) ☒



X. 1989, N 12.

$C(SiMe_3)_4$

1989

8 Б1119. О тетраэдрической симметрии молекулы тетракис(триметилсилл)метана в газовой фазе. On the T symmetry of the molecule tetrakis(trimethylsilyl)methane in the gas phase / Beagley B., Pritchard R. G., Titiloye J. O. // J. Mol. Struct.— 1989.— 212.— С. 323—324.— Англ.

Сделан вывод о необходимости понизить ошибочно указанную авторами ранее симметрию T_d молекулы $C(SiMe_3)_4$ (// J. Mol. Struct.— 1988.— 176.— С. 81) до T . Такой симметрии соответствуют любые кооперативные изменения торсионных углов $XSiCSi$ относительно шахматных конформаций. Это соображение подтверждается расчетами на основе молек. механики.

В. С. Мاستрюков

М.П.

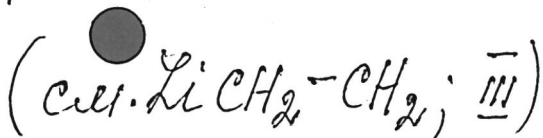
х. 1990, N 8

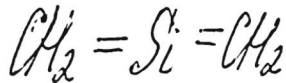


1989

Bernardi F., Bottoni A.
et al.

n.n. *J. Mol. Struct. Theochem.*
1989. 183, N 3-4. C. 301-
-309.





1989

24 Б1076. Молекулярная и электронная структура силадиимина и других алленовых соединений состава $\text{X}=\text{Y}=\text{X}$. Molecular and electronic structure of siladiimide and other allenic $\text{X}=\text{Y}=\text{X}$ compounds / Gordon M. S., Schmidt M. W., Koseki S. // Inorg. Chem.— 1989.— 28, № 11.— С. 2161—2163.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП с использованием базисного набора 6—31 ГФ, дополненного поляризац. функциями d -типа, проведены расчеты электронного и геометрич. строения алленовых аналогов $\text{X}=\text{Y}=\text{X}$: 2-силааллена $\text{CH}_2=\text{Si}=\text{CH}_2$ (I), силадиимида $\text{NH}=\text{Si}=\text{NH}$ (II), его фосфорного аналога $\text{PH}=\text{Si}=\text{PH}$ (III), карбодиимида $\text{NH}=\text{C}=\text{NH}$ (IV) и смешанного соединения $\text{NH}=\text{Si}=\text{CH}_2$ (V). Геометрич. параметры II уточнены с учетом электронной корреляции в рамках теории возмущения Меллера — Плессета 2-го по-

М.А.

(74) 2

X. 1989, № 24

рядка в том же базисе. Наиболее предпочтит. для I, III—V на уровне ССП найдены ортогон. алленоподобная геометрия, в то время как для II предпочтительна плоская структура. Для I—V построены локализованные МО и оценены энергии электронной корреляции. Для II выполнен детальный анализ Пв потенциальной энергии (ППЭ). Показано, что ППЭ II очень пологая, и на уровне MP2 найдено, что II неплоский с нелинейным фрагментом N—Si—N. И. Н. Сенченя



$\text{CH}_2 : \text{Si} : \text{CH}_2$

1989

110: 219306c Molecular and electronic structure of siladiimide and other allenic $\text{X}=\text{Y}=\text{X}$ compounds. Gordon, Mark S.; Schmidt, Michael W.; Koseki, S. (Dep. Chem., North Dakota State Univ., Fargo, ND 58105 USA). *Inorg. Chem.* 1989, 28(11), 2161-3 (Eng). The preferred geometric structures mol. analogous to allene $\text{CH}_2:\text{Si}:\text{CH}_2$ (1), $\text{NH}:\text{Si}:\text{NH}$ (2), $\text{Ph}:\text{Si}:\text{Ph}$ (3), $\text{NH}:\text{C}:\text{NH}$ (4), and $\text{NH}:\text{Si}:\text{CH}_2$ (5) are examd. at the RHF/6-31G(d) level of theory, and that of 2 is further examd. at the MP2/6-31G(d) computational level. The prediction that at the SCF level compds. 1, 3, 4, and 5 prefer orthogonal geometries like allene, while 2 prefers a planar structure, is examd. with the aid of localized MOs, correlated energies, and, in the case of 2, a detailed anal. of the potential energy surface. The latter is very flat; and at the highest level of theory this mol. is predicted to be nonplanar with a nonlinear N-Si-N angle.

110: 219307d Generation process of EL2 centers in gallium arsenide. Suezawa, Masashi; Sumino, Koji; Orito, Fumio (Inst. Mater. Res., Tohoku Univ., Sendai, Japan 980). *Mater. Sci. Forum* 1989, 38-41(Proc. Int. Conf. Defects Semicond., 15th, 1988, Pt. 1), 129-33 (Eng). The generation of EL2 centers was investigated with GaAs crystals grown by the liq.-encapsulated Czochralski technique from the melt of various Ga/As comp. by using optical absorption

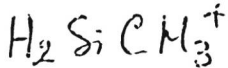
моном.
расем
структур

(43)

110

C.A. 1989, 110, v24

measurements at ~ 5 K. Grown-in EL2 centers in the crystals were previously eliminated by annealing at 1200° . Exptl. results are analyzed in terms of clustering of elementary defects to det. the nature of the essential constituent of an EL2 center. The concn. of 1 constituent of an EL2 center increases while that of the other constituent decreases with increasing at. fraction of As in the melt from which the GaAs crystal is grown.



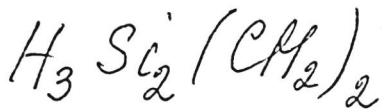
1989

Hopkinson A C, Lien M.H.

ab initio
calculations
открытия

Can. J. Chem. - 1989. - 67 (6).
997-7.

● (Cur. SiH⁺, III)



1989

Pavan Kumar P.N.V.

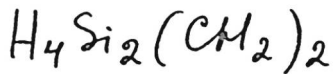
Wang D. X. et al.

u.n.

J. Mol. Struct. 1989.

194. C. 183-190.

(cell. $H_3C_2O_2$; III)



1989

Pavan Kumar P. N. V.,
Wang Dao-Xin, et. al.

monom.
racem

J. Mol. Struct. - 1989. - 194.
c. 183-90

(Cu. $\text{H}_4\text{C}_2\text{O}_2$, III)

$CH_3SiH_2SiH_2CH_3$ | Om. 31891

1989

U gp.

Prodet a s., Z.,

структура,
барьер
гаузера

J. Comput. Chem; 1989,
10, N 1, 99-103.

Simple Alkylsilanes: MM2 and
Ab Initio Studies of Their

Structures and Barriers to
Rotation.