

S: N

SIN
curep

Jewons W.

1913

Proc. roy. Soc. (L) A89, 187-93

Rz V-110.

12.9

SiN

R. Mulliken

1928

Phys. Rev. 26, 319

IV Checking SiN

2Be^{IV}-III

Be^{IV} II, 33

SIN

R. Mecke

1927

Z. Physik 42, 380-425

Si N.

Jenkins T, Laszlo H.

1929

Proc. Roy. Soc. (L) A122, 103.

См. также в журнале
Новое Si N.

BelV-112.

Belus T, 29.

Si N
comp

McKellar

1934

Phys. Rev. 45, 761

On the Relative Abundance of
the Silicon Isotopes.

21st paper, para. under Si N.
Unpublished 2 before (3,3) (4,4) (4,5)
none.

$$S_i^{28} : S_i^{29} : S_i^{30} = 89.616, 2$$
$$1.425$$

SiH

~~Синтез~~
4 гр.

2 гр. мн.

Do.

2470
эммен

Черк

1940

Trans. Farad. Soc. 36, 370

V. Взаимодействие между
энергией и равновесием
мелкого. равновесия. Матем.
моделирование основными
свойствами.



S: N

camp

McKellar

11944

Publ. astron. Soc. Pacif.

53, 233

2465104
up - pick.
4582
2465104
2465104
2465104

410

SiN
Camp

Linnett

1942

Trans. Farad. Soc. 38, 1

Измерение между молекулярной энергией
и межатомной. Реакция
в газ. молекулах.

S: N
Cuepp

McKelhar
Publ. Dom. Astroph. Obs.
7,251

19422

таиисс/946
82511111
04H-111

42 55

SiN Spier J.L., Smit-Messen ¹⁹⁴² m.m.

Physica, 1942, 9, 428-32

42.47

S.N

Popper P., Kuddlesden S.N.

1957

Nature, 178, 14570, 1129.

Structure of the Nitrides of Silicon
and Germanium. (p.).

By my. operations cyusefobanne nupugob
Si - Ge b frame.

Si_3N_4 , Si_3N_2 Si_3N_4 , Ge_3N_4 , Ge_3N_2 [23].

1.

(1). Mellor J.W., "A Comprehensive Treatise
on Inorganic and Theoretical Chemistry"

8, 115, 1928.

(2). Johnson W.C., Ridgley C.H.
JACS 52, 5160, 1930
56, 2395, 1934.

SIN

Thrush B. A.

1960

Nature, 186, N4730, 1044

Синтетическое
флуоресцентное
содержащее бор или
кремний

(См. В. Н.) III

5884

1547

1961

Si_3N_4 (re)

Borgen O., Seip H.M.,

Acta chem.Scand., 1961, 15, ~~N 8~~, 1789

The crystal structure of ...

J

~~5877~~

(B90-1532-II)

1962

D₀ (SiN)

Laud B.B.

Indian J. Phys., 1962, 36, N 12,
639-649

On the relation...

M, J

Hyman be $4\frac{2}{2}$

Eg2 p.v

1963

SiN 10 Д128. Фотоэлектрические измерения интенсивности полос в спектре SiN ($B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$). Stevens Anne E., Ferguson H. I. S. Photoelectric intensity measurements upon bands of the SiN ($B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$) spectrum. «Canad. J. Phys.», 1963, 41, № 2, 240—245 (англ.)

На сканирующем фотоэлектрич. спектрометре в области 3800—5200 Å получен спектр молекулы SiN, возбуждаемой при реакции между парами SiCl_4 и активным азотом, получаемым в безэлектродном микроволн. разряде. Относит. интенсивности 21 полосы системы $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ SiN измерены по интегр. интенсивностям для неперекрывающихся полос и по определенным группам вращательных линий в случае наложения полос с точностью 5% для сильных полос и 10% — для слабых. Результаты измерений с помощью факторов Франка — Кондона и рассчитанных графически значений r -центриды представлены в виде зависимости электронного момента перехода R_e (в относит. единицах) от межъядерного расстояния r . В интервале $r = 1,38 - 1,71$ Å эта зависимость описана аналитически $R_e(r) = \text{const} \cdot (1 - 1,27 r + 0,412 r^2)$ с точностью менее 5%. При $r > 1,71$ Å

3XIV-113

ф. 1963.100

эмпирич. значения R_e в несколько раз меньше и могут быть изображены участком прямой. Для полос, расположенных в пределах параболич. зависимости $R_e(r)$, вычислены относит. колебательные вероятности перехода. Вращательная т-ра, измеренная по положению максимума интенсивности в полосах, составила $350 \pm 50^\circ \text{K}$.
Ф. Ортенберг

1963

SiN

Photoelectric intensity measurements on bands on the SiN ($B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$) spectrum. Anne E. Stevens and H. I. S. Ferguson (Univ. Western Ontario, London). *Can. J. Phys.* 41, 240-5(1963). The SiN $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ (3800-5200 Å.) spectrum was excited by continuous introduction of SiCl₄ in trace amt. into the afterglow produced by microwave excitation of N. Relative intensities of 21 bands were measured photoelec. and interpreted with the aid of Franck-Condon factors $q_{r',v''}$ and r -centroids $\bar{r}_{v',v''}$ in terms of the variation of the electronic transition moment $R_e(r)$ with internuclear sepn. r . $R_e(r)$ could be represented empirically by $R_e(r) = \text{const.} (1 - 1.27r + 0.412r^2)$, $1.38 < r < 1.71$ Å.

CA

C.A. 1963.58.7

6330c

1965

SiN
св. 26 $(C_2H_5)_3SiNH$

8 Д133. Колебания Si—N- в N-дейтерированных моно- и дисилиламинах. Bürger Hans. SiN-Schwingungen in N-Deuterierten Mono- und Disilylaminen. «Inorg. and Nucl. Chem. Letters», 1965, 1, № 1, 11—12 (нем.)

Дана интерпретация колебаний N—X (X=H,D) и Si—N для $(C_2H_5)_3SiNH$ (I), $[(CH_3)_3Si]_2NH$ (II), $(C_2H_5)_3SiND_2$ (III) и $[(CH_3)_3Si]_2ND$ (IV). В случае I $\nu_s(N-H) = 3401 \text{ см}^{-1}$, $\nu_{as}(N-H) = 3474 \text{ см}^{-1}$, $\nu(Si-N) = 830 \text{ см}^{-1}$, соответственно для III $\nu_s(N-D) = 2492 \text{ см}^{-1}$, $\nu_{as}(N-D) = 2572 \text{ см}^{-1}$, $\nu(Si-N) = 792 \text{ см}^{-1}$. В случае II $\nu(N-H) = 3375 \text{ см}^{-1}$, $\nu_s(SiNSi) = 566 \text{ см}^{-1}$, $\nu_{as}(SiNSi) = 934 \text{ см}^{-1}$, соответственно для I $\nu(N-D) = 2500 \text{ см}^{-1}$, $\nu_s(SiNSi) = 560 \text{ см}^{-1}$, $\nu_{as}(SiNSi) = 1030 \text{ см}^{-1}$.

Н. Чумаевский

ф. 1966. 82

1966

Si-N
 $\sqrt{1}$

3 Б204. Валентные колебания элемент — азот в диметиламидах 4-й группы. Bürger Hans, Sawodny Wolfgang. Element — Stickstoff — Valenzschwingungen in Dimethylamiden der 4. Gruppe. «Inorgan. and Nucl. Chem. Letters», 1966, 2, № 7, 209 (англ.)

Исследованы ИК и спектры КР соединений строения $\text{Cl}_{4-n}\text{Si}(\text{NR}_2)_n$ (I), $(\text{CH}_3)_{4-n}\text{Si}(\text{NR}_2)_n$ (II) и $\text{Э}(\text{NR}_2)_4$ (III), ($\text{R}=\underline{\text{CH}_3}$; $\text{Э}=\underline{\text{Si}}$, Ge, Sn, Ti). Сделано отнесение колебаний элемент — азот. Для соединений ряда I при изменении n от 1 до 4 симметричные и антисимметричные вал. кол. Si-N лежат в областях, соответственно: 721 см^{-1} ; 741 и 686 см^{-1} ; 731 и 626 см^{-1} ; 710 и 570 см^{-1} . Для соединений ряда II они находятся, соответственно: 585 см^{-1} ; 699 и 580 см^{-1} ; 679 и 575 см^{-1} ; 710 и 570 см^{-1} . В случае соединений III эти полосы наблюдаются при: 710 и 570 см^{-1} (Si); 578 и 551 см^{-1} (Ge); 535 и 516 см^{-1} (Sn); 590/532 см^{-1} (Ti). Н. Чумаевский

X. 1968. 3



Dr N Singh Ran B, Rori D.K.

1366

"Indian J. Pure and Appl. Phys."
4, N 3; 102-105 (1966).

Потенциальные функции нево-
зможны функциональных моде-
лей.

(see P₂).

1366a-III
1366a-III

Рассеяние света (1) Indian J. pure and Appl. Phys., 1965, 2, 475)
 рассеяние света. Круговое движение. излучение. излучение.

Рассеяние (1) (2) - Canad. J. Phys., 1965, 43, 829, Singh R. S., Rai R. C. (3) Steele D.,
 - Spectrochim. Acta, 1963, 19, 111] . Нормализация, излучение.

излучение. Круговое движение. излучение. с учетом излучения. излучение.
 излучение. Круговое движение. излучение. излучение. излучение.

3. Нормализация. излучение. излучение. излучение. излучение. излучение.
 с R K R V излучением. излучение. излучение. излучение. излучение.

[Steele D., Lippincott E. A., Vandervliet J. T., Rev. Mod. Phys.,
 1962, 34, 225].

S. N. [излучение. излучение. излучение. излучение. излучение. излучение.]

$\chi^2 \Sigma^+$ 40500 $3^3P + 2^4S$

$B^2 \Sigma^+$ 15000 $3^3P + 2^4S$

($\lambda_c = 24293 \text{ мкм}$)

Si-N

Май Л. А.

1987

характеристики
связи.

Изв. АН Патб СССР. Сер. химия
1987, N 4, 506.

О коррелирующих некой
характеристик связей Si.

(см. Si-N) III

Si N

BQ-A 1158

1968

Empedocles P.

Theor. chim Acta 1968,

10(4) 331-6.

aut.
noem.

SiN

Jenc F.

I968

Spectrochim. Acta, 24A, 259

Ground state reduced potential curves (RPC) of BeF, CS, SiN, P₂, SiS, and GeO.

18.

SiN

поправка
Вар - 121 - XIV

1969

5Д368. Поправка к статье: «Новый спектр молекулы SiO^+ ». Dunn T. M., Rao K. M., Nagaraj S., Verma R. D. New spectrum of the SiO^+ molecule—a correction. «Canad. J. Phys.», 1969, 47, № 19, 2128 (англ.)

Спектр, ранее (РЖФиз, 1969, 4Д260) приписанный SiO^+ , как показано, принадлежит молекуле SiN. Определен знак спинowego расщепления основного состояния; получены более точные значения констант T_0 , B_0 , D_0 и γ_0 .

м.ч.

09. 1970. 5Д

Si N

красочные
пайетки
жирные

BGP + 1262 - XIII

Szoke S. et al.

1870

Acta Chim. (Budapest),
63 (1), 59.

(coll. CP) III

SiN

138° 3901-XIV

1972

9 Д361. Фиолетовое свечение SiN. Dunn E. M.,
Dunn T. M. Violet electronic emission of SiN. «Can. J.
Phys.», 1972, 50, № 8, 860—861 (англ.; рез. франц.)

Установлено, что фиолетовое свечение в SiN принадле-
жит не SiO^+ , а SiN, что доказывается с помощью анализа
свечения образцов Si^{14}N , обогащенных до 30% изотопом
 ^{15}N .

Г. И. Л.

спектр

р. 1972. 98

[130-3901-XIV] 1982

SiN

19 B172. Электронный спектр испускания SiN в фиолетовой области. Dupin E. M., Dupin T. M. Violet electronic emission of SiN. «Can. J. Phys.», 1972, 50, № 8, 860—861. (англ.; рез. франц.)

Исследован спектр испускания молекулы SiN в фиолетовой области, возбуждавшийся МВ-разрядом, используется образец, обогащенный 30% N¹⁵. В результате вращательного анализа определены следующие молек. постоянные молекулы SiN¹⁵: (состояние X²Σ) $B_0 = 0,6960$, $D_8 = 1,09 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$, постоянная спинового расщепления $\gamma_0 = 0,014 \text{ см}^{-1}$, (состояние A²Σ) $B_0 = 0,6864$, $D_0 = 1,26 \cdot 10^{-6}$, $\gamma_0 = 0,001$, $T_0 = 24237,87$, $T_e = 24299,29 \text{ см}^{-1}$. Определенные постоянные молекулы SiN¹⁵ сопоставлены с соответствующими постоянными молекулы SiN¹⁴.

А. П. Александров

электр.
спект
испуск.

ж. 1982. 19

1972

SiN

м.п.

ОТЧЕТ ПО НАУЧНО-ИССЛ. РАБОТЕ
ИНСТА СССР, 1972 г.

СТРОИТЕЛЬСТВО ИСК. ПОСТ. И ТОРМОЗ
ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВОЗДУХА.

40207.6097

TE, Ph, Ch

XIV-5442
SiN 30063

1973

1695

Singh M., Bredohl H., Remy Fr., Dubois I.
The spectrum of SiO^+ and SiN.

"J. Phys. E: Atom. and Mol. Phys.", 1973, 6,
N12, 2656-2659 (англ.)

(см. SiO^+ ; III)

0039 СИМ

025

026

032

ВИНИТИ

Si N

1974

u. n.
enxmp
zbus

TOVAS P.

ABUZOPAYO. J., 1974, 193(1, 2, 3),
269-72.

(cu SiO₂ III)

NSi

1974

(Di)

9 Д569. Трисилиламин. Определение структуры скелета NSi_3 по спектру комбинационного рассеяния с помощью изотопического замещения азота. Miller Foil A., Perkins James, Gibbon Gerst A., Swisshelm B. A. Trisilylamine: nitrogen isotope effect in the Raman spectrum and planarity of the NSi_3 skeleton. «J. Raman Spectrosc.», 1974, 2, № 1, 93—100 (англ.)

С высоким разрешением исследованы спектры комб. рас. $^{14}\text{N}(\text{SiH}_3)$ и $^{15}\text{N}(\text{SiH}_3)_3$ в области полносимметричного вал. кол. групп $\text{NSi}_3(\nu_1)$. Измерения проведены в кристаллической, жидкой и газообразной фазах. Установлено, что в газовой фазе изотопное замещение азота не сопровождается изменением частоты ν_1 . Отсюда сделан вывод, что скелет тяжелых атомов в этом случае имеет плоскую структуру. В то же время в жидкой и кристаллич. фазах наблюдается незначительное изотопич. расщепление линии ν_1 , что ука-

Ф. 1474. 19

зывает на деформацию скелета NSi_3 в конденсированном состоянии. Однако полученные спектроскопич. данные недостаточны для того, чтобы определить характер этой деформации. Приведены таблицы и спектры. Библ. 9.

*4-9285

1975

SiN

22 Б128. Анализ вращательной структуры некоторых «малликеновых» ($D^2\Pi-A^2\Pi$) полос молекулы SiN. Linton C. Rotational analysis of some «Mulliken» ($D^2\Pi-A^2\Pi$) bands of the SiN molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 55, № 1—3, 108—119 (англ.)

Выполнен анализ вращательной структуры полос (4—3) и (3—3) и одной подполосы (2—2) системы Малликена $D^2\Pi-A^2\Pi$ в спектре высокого разрешения молекулы SiN в области от 3650 до 3800 Å. Для компонент $2F_1$, $3F_1$ и F_2 , $4F_1$ и F_2 верхнего состояния $D^2\Pi$ и компонент $2F_1$, $3F_1$ нижнего состояния $A^2\Pi$ определены эффективные вращательные постоянные. Для полосы 4—3 вычислены уточненные значения вращательных постоянных, к-рые обеспечивают очень хорошее совпадение расчетных и эксперим. частот линий. Для полосы (4—3) определены постоянные спин-орбитального взаимодействия. Структура полосы (3—3) оказалась более сложной, что связано с возмущениями, вызванными состоянием $^2\Sigma$. Из анализа возмущений в спектре полосы (3—3) определена молек. постоянная $B_v = 0,61 \pm 0,02$ см⁻¹ для состояния $^2\Sigma$. С. Н. Мурзин.

(м.н.)

2. 1975
N 22XII
-
6387-
889-
d9

74-9285

1975

SiN

11 Д328. Анализ вращательной структуры некоторых полос Малликена $D^2\Pi-A^2\Pi$ молекулы SiN. Linton C. Rotational analysis of some «Mulliken» ($D^2\Pi-A^2\Pi$) bands of the SiN molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 55, № 1-3, 108—119 (англ.)

Впервые выполнен анализ вращательной структуры полос излучения системы Малликена молекулы SiN, возбуждаемой при смешивании паров SiCl_4 с активным азотом. Изучены полосы 4—3, 3—3 и частично 2—2. Из анализа следует, что полосы обусловлены переходом между состояниями $D^2\Pi$ и $A^2\Pi$ в молекуле SiN. Определены вращательные постоянные состояний и константы спин-орбитальной связи. В структуре полосы 3—3 наблюдаются возмущения, проявляющиеся в расщеплении вращательных линий на 2 компоненты и в сдвиге одной из них. Неоднородный характер возмущений и значение вращательной константы позволяют интерпретировать возмущающее состояние как $B^2\Sigma^+$. Библ. 9.

В. А.

(ш.н.)

ф. 1975 № 11

IX
BP-6387-XIV

SiN

Bp-6387-XIV

X-4-9285

1975

(M.N.)

177619c Rotational analysis of some Mulliken ($D^2\Pi-A^2\Pi$) bands of the silicon nitride molecule. Linton, C. (Ph.D. thesis, Univ. New Brunswick, Fredericton, New Brunswick, Canada). *Mol. Spectrosc.* 1975, 55(1-3), 103-19 (Eng). Three bands of the very weak Mulliken system of SiN, excited in an afterglow source, were photographed at high resolu. A complete rotational analysis was performed on the 4-3 and 3-3 bands and 1 subband of the 2-2 band was analyzed. The transition was $D^2\Pi-A^2\Pi$, with either both states inverted or both states regular. Accurate rotational consts. $B_4' = 0.50576 \pm 0.00051$, $D_4' = (1.03 \pm 0.02) \times 10^{-6}$, $B_3'' = 0.65647 \pm 0.00054$; $D_3'' = (1.02 \pm 0.52) \times 10^{-6}$ cm⁻¹. Spin-orbit coupling consts. were obtained. Perturbations in the upper level of the 3-3 band were obsd., and an approx. analysis shown them to be caused by a $^2\Sigma$ state with $B = 0.61 \pm 0.02$ cm⁻¹.

C.A. 1975. 82. N26

X 4-12845;

1976

XIV-7256

SiN

(SiN).

[85: 11834f The emission spectrum of silicon mononitride. Bredohl, H.; Dubois, I.; Houbrechts, Y.; Singh, M. (Inst. Astrophys., Univ. Liege, Cointe-Ougree, Belg.). Can. J. Phys. 1976, 54(6), 680-8 (Eng). The emission spectrum of SiN was reinvestigated under high resoln. in the spectral region 3100-5600 Å. Besides the well known $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$, 3 new transitions were analyzed, two $^2\Pi-^2\Pi$ and one $^2\Sigma-^2\Pi$. These three transitions have a lower $^2\Pi$ state in common which appears to be the lowest excited $A^2\Pi$ state. The $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ transition was reinvestigated and rotational perturbations were found. The consts. detd. for the various electronic states are given.

Beurs.

C.A. 1976. 85 N2

SiN

4-12845; XIV-7256 1976

9 Д287. Спектр испускания SiN. Bredohl H., Dubois I., Houbrechts Y., Singh M. The emission spectrum of SiN. «Can. J. Phys.», 1976, 54, № 6, 680—688 (англ.; рез. франц.)

Спектр испускания молекулы SiN в области 3100—5600 Å зарегистрирован фотографически с дисперсией 1,2 Å/мм. Наряду с хорошо известным переходом $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^-$ обнаружены еще 2 перехода $^2\Pi - ^2\Pi$ и один $^2\Sigma - ^2\Pi$. Общее нижнее состояние $^2\Pi$ является 1-м возбужденным состоянием $A^2\Pi$ молекулы SiN. Выполнен детальный колебательно-вращательный анализ спектра. Определены спектроскопич. постоянные различных электронных состояний SiN. Обнаружен ряд новых возмущений во вращательной структуре перехода B—X. Библ. 15.

Спектр
испускания.

(м.н.)

Р 1976 №9

43-12845; XIV-7256

1976

SiN
17 B139. Спектр испускания SiN. Bredohl H., Dubois I., Houbrechts Y., Singh M. The emission spectrum of SiN. «Can. J. Phys.», 1976, 54, № 6, 680—688 (англ.; рез. франц.)

(M. N)
Исследован спектр испускания молекулы SiN в области 3100—5600 Å. Выполнен анализ вращательной структуры ряда полос, принадлежащих переходам $D^2\Pi-A^2\Pi$, $L^2\Pi-A^2\Pi$, $K^2\Sigma-A^2\Pi$ и $B^2\Sigma+-X^2\Sigma+$. Получены след. значения молек. постоянных T_e , B_e , α_e , D_e , ω_e , $\omega_e x_e$, $\omega_e y_e$ (в см^{-1}): состояние $X^2\Sigma+-0$, 0,7311, 0,00565, $1,2 \cdot 10^{-6}$, 1151,36, 6,47, -0,007; состояние $B^2\Sigma+-24299,21$, 0,7238, 0,01048, $1,5 \cdot 10^{-6}$, 1031,03, 16,85, 0,15; состояние $A^2\Pi-a \sim 8000$, 0,67516, 0,00538, $1,10 \cdot 10^{-6}$, 1044,41, 6,20, -0,011; состояние $D^2\Pi-a+$ +27865,63, 0,5238, 0,0041, $1,0 \cdot 10^{-6}$, 699,33, 3,48; состояние $K^2\Sigma-T_0=a+25765,7$, $\omega_e=1142$, $\omega_e x_e=11,5$, $B_e=0,6775$, $\alpha_e=0,005$; состояние $L^2\Pi-T_e=a+32508$, $\omega_e=718$, $B_e=0,549$. Обнаружены возмущения в состояниях $B^2\Sigma+$ и $X^2\Sigma+$.
В. М. Ковба

X-1976
NM

SiN

1977

Linton C., et al.

M.N.

J. Mol. Spectrosc.,
1977, 66, 21, 62-68

sem. SiO; 101)

70812.29

CC, Ph, MGU

30063

Si N

1977

075 5324

Murthy N. Sreedhara, Gowda

L. Siddarama: Criterion for judging the influence of vibration-rotation interaction of Franck-Condon factors of diatomic molecules. "J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.", 1977, 10, N 3, 491-494

(2477)

854 859

0940

BMHMTM

SiN

Summer 8904

1979

Ohwada E.

Spectrochim. acta,
1979, 35, 1353-57

Elem. no. 25.

SiN^+

Lommuu 10240 | 1980

Bruna P. J. et al,

попытки
кривые,
кв. мех.
расчет

J. Chem. Phys., 1980,
72 (10), 5437-45.



(см. CN^+ ; III)

SiN Gingerich R. A., 1980

SiN Current Topics in Materials
Science, Volume 6, edited
by Kaldes E.

Do; North-Holland Publishing
Company, 1980.

(есть отклик в коробке откли-
ков Gingerich).

SiN

оч. 13912; 15546 1981

4 Д98. Факторы Франка—Кондона и r -центроиды для систем полос $K^2\Sigma-A^2\Pi$ и $D^2\Pi-A^2\Pi$ молекулы SiN. Franck-Condon factors and r -centroids for the $K^2\Sigma-A^2\Pi$ and $D^2\Pi-A^2\Pi$ band systems of the SiN molecule. Joshi U. C., Joshi Mamta, Singh R. N. «Indian J. Phys.», 1981, В55, № 4, 335—338 (англ.)

С потенциальной ф-цией Морзе вычислены постоянные ангармоничности α_e в состояниях $K^2\Sigma$, $D^2\Pi$ и $A^2\Pi$ молекулы SiN в хорошем согласии с их эксперим. значениями. Эта же ф-ция использована для вычисления факторов Франка—Кондона 10 полос и r -центроид 11 полос систем $K^2\Sigma-A^2$ и $D^2\Pi-A^2\Pi$ спектра SiN; r -центроиды полос (0,0), (1,1), (2,2) и (3,3) сохраняют почти постоянные значения в 1-ой и во 2-ой системе полос, но разбросы r -центроид несколько больше в 1-ой системе. Сделан вывод, что в состоянии K потенц. кривая несколько шире по сравнению с состоянием D . Погрешности в оценке интегралов для 1-ой и 2-ой систем составляют 0,5% и 3%.

М. А. Ковнер

факторы
Франка-Кон-
дона

ср. 1983, 18, №4.

SiN / OMMLUCK 13912 / 1981

OMMLUCK 15546

95: 194542h Franck-Condon factors and r -centroids for the $K^2\Sigma-A^2\pi$ and $D^2\pi-A^2\pi$ band systems of the silicon nitride molecule. Joshi, U. C.; Joshi, Mamta; Singh, R. N. (Dep. Phys., Dayanand Anglo-Vedic Coll., Dehradun, 248 001 India). *Indian J. Phys., [Part] B* 1981, 55B(4), 335-8 (Eng). The approx. anal. method proposed by P. A. Fraser and W. R. Jarman (1953) was used to calc. Franck-Condon factors for the $K^2\Sigma-A^2\pi$ and $D^2\pi-A^2\pi$ band systems of SiN. The r -centroids were evaluated by the method of R. W. Nicholls and W. R. Jarman (1956). The agreement between theor. and exptl. values was satisfactory.

parmonk

P.L.,

2 examples.

C.A. 1981, 95, N22.

SiN

[Dmmuck 14299] 1982

u. n.,
Xenon
CB836

Arco R., Robinson E. A.,
J. Phys. Chem. 1982, 86,
46, 894-899.



SiN

10m. 17658

1983

SiN⁺

Bruna P. F., Peyerimhoff S. A.,

meop.
pacerem

Bull. Soc. Chim. Belg., 1983,

92, n 6-7, 525-546.

SiN

1982

Bruno P.J., Dohrmann H.,
et al.,

Рачен
и. н.,
геоchem.
структ.

J. Mol. Struct., 1983, 93 Suppl:
"Theochem", 10: Theor. Chem,
1982. Proc. 13 Congr. Theor. Chem.
Lat. Expression, Alghero
(Sassari), 5-8 Oct., 1982, 309-
-318.
(cur. @Si⁻; III)

SiN

1982

Рачерѣ
Смрѣк-
ѣмѣ

Sauer J., Čársky R.,
Zabradnik R.

Collect. Czech. Chem.
Commun., 1982, 47, N4,
1149-1168.
(car. SiH₂; III)

SiN

Loxton C. M., Tsong I.S.T., 1983
Lin S.H., ..

$B^2 \cdot \chi^2 \Sigma$

Phys. Rev. Lett., 1983, 50(17),

Comment on ¹³³¹ "molecule formation
during sputtering by two-body
associative ionization with
adiabatic curve  crossing".

CA 1983, 98, ¹¹24, 2068 36j

SiN ($^2\Sigma^+$)

Ом. 17017

1983

12 Д428. Микроволновый спектр радикала SiN ($^2\Sigma^+$)
The microwave spectrum of the SiN ($^2\Sigma^+$) radical. Sai
to Shuji, Endo Yasuki, Hiroto Eizi. «J.
Chem. Phys.», 1983, 78, № 11, 6447—6450 (англ.)

Исследован микроволн. спектр радикала SiN, полу-
ченного из $\text{SiCl}_4 + \text{N}_2$ или $\text{SiH}_4 + \text{N}_2$ в разряде постоян-
ного тока. Идентифицирована сверхтонкая структура
трех вращательных переходов с $N \leq 4$ основного элект-
ронно-колебательного состояния $^2\Sigma^+$ в диапазоне 87—
175 ГГц. Анализ спектра выполнен с учетом электрон-
ного спин-вращательного взаимодействия, взаимодей-
ствия электронного и ядерного спинов и квадрупольно-
го взаимодействия ядра азота. Определены значения
параметров этих взаимодействий. М. Р. Алиев

(м.п.)

ор. 1983, 18, N 12

SiN

(orig. 17017)

1983

99: 13121] The microwave spectrum of the SiN($^2\Sigma^+$) radical. Saito, Shuji; Endo, Yasuki; Hirota, Eizi (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(11), 6447-50 (Eng). The microwave absorption spectrum of the SiN radical was detected in a d.c. glow discharge in a SiCl₄ or SiH₄-N₂ mixt. The 3 rotational transitions $N = 2 \leftarrow 1$, $3 \leftarrow 2$, and $4 \leftarrow 3$, were obsd. at 87-175 GHz by using a source-frequency modulation microwave spectrometer. The rotational const., the centrifugal distortion const., the spin-rotation coupling const., the magnetic hyperfine coupling consts. b and c , and the elec. quadruple coupling const. of the N nucleus were precisely detd. The electronic structure of the SiN mol. is discussed by using the magnetic hyperfine coupling consts. and also the quadruple coupling const. [3.05(23) MHz] of ^{14}N .

(yf crank)

C.A. 1983, 89, N2

SiN

10m. 17017

1983

22 Б176. Микроволновый спектр радикала $\text{SiN}(^2\Sigma^+)$.
The microwave spectrum of the $\text{SiN}(^2\Sigma^+)$ radical. Saito S., Endo Y., Hirota E. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 11, 6447—6450 (англ.)

На МВ-спектрометре с частотной модуляцией измерены в области частот 87—175 ГГц три вращательных перехода $N=2\leftarrow 1$, $3\leftarrow 2$ и $4\leftarrow 3$ в спектре поглощения радикала $\text{SiN}(^2\Sigma^+)$. Радикал генерировали непосредственно в поглощающей ячейке при помощи тлеющего разряда в газ. смесях SiCl_4/N_2 или SiH_4/N_2 . Для каждого вращательного перехода наблюдались две спин-овые компоненты, каждая из которых состояла из сверхтонких компонент из-за ^{14}N -ядерного квадрупольного взаимодействия. Анализ спектра выполнен с учетом зависимости вращательной постоянной и постоянной спин-вращательного взаимодействия от межъядерного расстояния, с учетом центробежного искажения, магнитного сверхтонкого и ^{14}N -ядерного электрич. квадруп.

м.п;

X. 1983, 19, № 22

полного взаимодействий. Определены вращательная
 постоянная $B_0=21827,7987$ (113) МГц, постоянная цен-
 тробежного искажения $D_0=35,77$ (42) кГц, постоян-
 ная спин-вращательного взаимодействия $\gamma_0=$
 $=505,109$ (43) МГц, постоянные магнитного сверхтон-
 кого взаимодействия $b=19,46$ (21) МГц, $c=$
 $=94,47$ (27) МГц и постоянная квадрупольного
 взаимодействия $eQq=3,05$ (23) МГц. На основе полу-
 ченных данных определена электронная структура ра-
 дикала. С использованием молекулярных постоянных
 вычислен вращательный спектр SiN в области частот
 40—450 ГГц, представляющий интерес для астрофиз.
 исследований.

С. Н. Мурзин



SiN Snowdon K, Reiland W., 1983

Phys. Rev. Lett., 1983, 50(18), 1322

Reply to comment on
"Molecular~~az~~ formation..."

CA 1983, 18, 24, 206 837K

SiN

DM. 21249

1984

102: 100996x Multireference (single) and double-excitation - configuration interaction (MRD-CI) study of the radicals CN, SiN, and SiP, and the linear structures of HSiP and SiPH in the electronic ground and various excited states. Bruna, Pablo J.; Dohmann, Helmut; Peyerimhoff, Sigrid D. (Univ. Bonn, D-5300 Bonn, 1 Fed. Rep. Ger.). *Can. J. Phys.* 1984, 62(12), 1508-23 (Eng). The relative stability of the three low-lying doublet states of the isovalent series CN, SiN, and SiP were calcd. with highly correlated MRD-CI wave functions. The low-lying $^4\Sigma^+$, $^4\Delta$, $^4\Sigma^-$, and $^4\Pi$ states were analyzed; their equil. geometries and electronic term values (T_e) are reported. The $^4\Pi$ state of the radical CN was placed at an excitation energy that agreed with exptl. inferences. In SiN, the theor. treatment predicted a very small T_e value for $A^2\Pi_i$, and found no $K^2\Sigma$ state (earlier assumed), in accordance with recent expts. The SiP radical contrasts with the other radicals because it possesses a $X^2\Pi_i$ ground state and an energetically close-lying $A^2\Sigma^+$ state. The HSiP-SiPH species (linear geometry assumed) are reported for the first time. The energy difference was practically zero in the present treatment. The dissociation energies and the vertical ionization potentials of the linear conformations also were calcd. The theor. dipole moments were obtained for various electronic states of the AB radicals as well as for the ground states of the HSiP-SiPH components in $C_{\infty v}$ symmetry.

неопре-
дeлeн
компьютер,
Do, Te;

⊗ (+3)

C.A. 1985, 102, N12

CN, SiP, HSiP, SiPH

SiN

От. 30 249

1984

2 Л549. Система $B^2\Sigma^+ - A^2\Pi$; нитрида кремния SiN. The $B^2\Sigma^+ \rightarrow A^2\Pi$ system of silicon nitride, SiN. Foster Stephen C. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 106, № 2, 369—375 (англ.)

Получены с высоким разрешением спектры флуоресценции SiN $B^2\Sigma^+ - A^2\Pi$ и $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ в области короче 440 нм. Возбужденные радикалы SiN получали добавлением SiN_4 к активному азоту. На основании анализа вращательной структуры спектров, в том числе возмущений вращательных линий полосы 6—8 системы $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$, установлены спектроскопич. постоянные состояния $A^2\Pi$.

Е. Н. Т.

М. П.

ф. 1985, 18, 112

SiN

DM 30 249

1984

1 Б1102. Система $B^2\Sigma^+ - A^2\Pi$; нитрида кремния, SiN. The $B^2\Sigma^+ \rightarrow A^2\Pi$ system of silicon nitride, SiN. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 106, № 2, 369—375 (англ.)

Выполнен повторный анализ системы полос с фиолетовым оттенением в области 440 нм, ранее относившихся к переходу $K^2\Sigma - A^2\Pi$. Согласно новой интерпретации, эта система в действительности является частью системы $B^2\Sigma^+ - A^2\Pi$. Приведены мол. постоянные B_v' , B_v'' , ν_0 для полос секвенции $\Delta v = 0$ ($v' = v'' = 4-7$). Новое значение $T_e(A^2\Pi) = 994,4 \text{ см}^{-1}$, состояние $A^2\Pi$ — инвертированное, $A_v = -88 \text{ см}^{-1}$. Знак A_v и величина $T_e(A^2\Pi)$ подтверждены результатами анализа возмущений уровня $v = 8$ состояния $X^2\Sigma^+$ (с высоким разрешением сфотографирована и проанализирована вращательная структура полосы 6—8 перехода $B-X$ в спектре испускания SiN). Значения мол. постоянных T_e , ω_e , $\omega_e x_e$, $\omega_e y_e$ SiN (в см^{-1}): состояние $A^2\Pi$ — 994,4; 1044,41; 6,20; —0,003; состояние $B^2\Sigma^+$ — 24299,21, 1031,03, 16,85, 0,150, $\omega_e z_e = 0,0117$. Положение (T_e) двух др. возбужденных состояний $^2\Pi$, D и L — 28860,0 и 33502 см^{-1} , соответственно.

В. М. Ковба

М.П.

X. 1985, 19, № 1.

SiN

Om. 30 249

1984

/ 101: 81017q The $B^2\Sigma^+ \rightarrow A^2\Pi_i$ system of silicon nitride, SiN. Foster, Stephen C. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Mol. Spectrosc.* 1984, 106(2), 369-75 (Eng). The 440-nm violet-degraded $2\Sigma \rightarrow \Pi$ bands of SiN, which were previously assigned to a $K \rightarrow A$ system, were reanalyzed. These bands are $\Delta\delta \approx 0, \pm 1$ sequence bands of the $B^2\Sigma^+ \rightarrow A^2\Pi$ system of SiN. The 1st reliable value of $T_e(A^2\Pi) = 994.4(1)$ cm⁻¹ was obtained, and this detcs. the location of the $D^2\Pi$ and $L^2\Pi$ states with respect to the ground state. The $B^2\Sigma^+$, $v = 7$ and $D^2\Pi$, $v = 3$ levels mutually perturbing. A detailed study was made of the perturbed $X^2\Sigma^+$, $v = 8$ level. The 6-8 band of the $B \rightarrow X$ system was photographed at high resolu. A deperturbation of this band confirms $T_e(A^2\Pi)$, and provides the 1st exptl. verification of the inverted nature of the A state.

 $B^2\Sigma^+ \rightarrow A^2\Pi_i$
C.A. 1984, 101, N10

SiN.

[om. 20 054]

1984

Snowdon K. G., Heiland W.,

checkmr Z. Phys., 1984, A318,
N 3, 275-284.

SiN

1984

Страусе Я. У.;
Цыцмбале В.

вероятность Исслед. Солнца и
переход. крас. звёзд (Рига),
1984, N 20, 13-25.

(сер. SiCl; III)

SiN

1984

to measure Si

/ 101: 237691t Laser-induced fluorescence detection of diatomic products of reactive ion etching: SiN, SiO, and SiF. Walkup, R.; Avouris, P.; Dreyfus, R. W.; Jasinski, J. M.; Selwyn, G. S. (Thomas J. Watson Res. Cent., IBM, Yorktown Heights, NY 10598 USA). *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 1984, 29(Laser-Controlled Chem. Process. Surf.), 269-74 (Eng). Laser-induced fluorescence is used to detect a variety of Si-contg. diat. radicals produced by the reactive ion etching and glow discharge sputtering of Si and its oxide and nitride. The products include SiN, SiO, and SiF. Examn. of the concn. of these mols. as a function of plasma conditions provides information about their prodn. mechanisms.

(+2) $\square$ SiO, SiF  me Si

C. A. 1984, 101, N26.

SiN

QCC 34083

1985

($A^2\Pi_i - X^2\Sigma^+$)

102: 122298y The 2-0 band of the $A^2\Pi_i \leftarrow X^2\Sigma^+$ system of silicon nitride (SiN) near $3.3 \mu\text{m}$, Foster, Stephen C.; Lubic, Karen G.; Amano, T. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Council, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Chem. Phys.* 1985, 82(2), 709-13 (Eng). The observation and anal. of 187 lines in the 2-0 band of the $A^2\Pi_i \leftarrow X^2\Sigma^+$ system of the SiN radical are described. The 2-3 band, which lies near $3.3 \mu\text{m}$, was recorded with a tunable difference frequency system and discharge amplitude modulation. The anal. gives improved mol. consts. for the ground and 1st excited states, including the 1st lambda doubling parameters for the $A^2\Pi_i$ state.

M.H.

C. A. 1985, 102, N 14.

SiN

DM 34083

1985

10 Л405. Полоса 2—0 системы $A^2\Pi_i \leftarrow X^2\Sigma^+$ радикала SiN около 3,3 мкм. The 2—0 band of the $A^2\Pi_i \leftarrow X^2\Sigma^+$ system of SiN near 3,3 μm . Foster Stephen C., Lubic Karen G., Amano T. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 2, 709—713 (англ.)

С помощью перестраиваемого ИК-лазера получен с высоким разрешением спектр возбуждения флуоресценции $A^2\Pi$, $v=2 \leftarrow X^2\Sigma^+$, $v=0$ радикала SiN в области 3,3 мкм. Радикалы SiN получали из разряда в смеси SiCl_4/N_2 . На основании анализа вращательной структуры вычислены молекулярные постоянные SiN в состояниях $A^2\Pi$, $v=2$ и $X^2\Sigma^+$, $v=0$, значения которых сопоставлены с данными полученными другими методами. Библ. 25. Е. Н. Т.

М. А.

ср. 1985, 18, N10

SiN

ОМ 310 83

1985

19 Б1208. Полоса 2—0 системы $A^2\Pi_i \leftarrow X^2\Sigma^+$ радикала SiN вблизи 3,3 мкм. The 2—0 band of the $A^2\Pi_i \leftarrow X^2\Sigma^+$ system of SiN near 3,3 μm . Foster Stephen C., Lubic K. G., Amano T. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 2, 709—713 (англ.)

С использованием перестраиваемого лазера с различной частотой (излучения аргонового лазера и лазера на красителе смешиваются в нелинейном кристалле LiNbO_3) исследован ИК-спектр поглощения радикала Si—N в обл. 2400—4400 cm^{-1} , полученного в разряде через газовую смесь $\text{N}_2 + \text{SiCl}_4$. Идентифицирована вращат. структура полосы 2—0 системы электронного перехода $A^2\Pi_i \leftarrow X^2\Sigma^+$. Определены значения вращат. и центробежной постоянных ($B' = 0,661909$, $B'' = 0,728096$, $D' = 1,1308 \cdot 10^{-6}$, $D'' = 1,1807 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$), постоянных спин-орбитального взаимодействия и Λ -удвоения состояния $A^2\Pi$ ($A = -88,8755$, $p = 1,880 \cdot 10^{-3}$, $q = -8,66 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$) и постоянной спин-вращат. взаимодействия ($\gamma' = 2,242 \cdot 10^{-3}$, $\gamma'' = 0,016845 \text{ cm}^{-1}$). Центр полосы 2—0 расположен при $\nu_0 = 2991,355 \text{ cm}^{-1}$. Е. В. Алиева

М.Н.

X. 1985, 19, N 19

Si-N

[23221]

1985

Raabe G., Michtl F.,

Chem. Rev., 1985, 25,

(edrop) N 5, 419 - 509.

SiN

1985

22 Б4496. Изучение перехода $A(^2\Pi_i) \rightarrow X(^2\Sigma^+)$ в радикале SiN методом спектроскопии с использованием инфракрасного диодного лазера. The $A(^2\Pi_i) \rightarrow X(^2\Sigma^+)$ transition of the SiN radical by infrared diode laser spectroscopy. Yamada Chikashi, Hirota Elzi. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 6, 2547—2552 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

М.А.

С использованием ИК диодного лазера в области 1918—2040 см^{-1} зарегистрирован спектр поглощения свободного радикала SiN, к-рый получали в зоне электрич. разряда в смеси 0,2 Торр силана и 1 Торр N_2 . Эффективная длина оптич. пути достигала 8 м. Спектр SiN обнаруживает большие зеемановские эффекты, к-рые были использованы для различения линий этого спектра. Впервые обнаружена полоса (1,0) перехода $\text{SiN}(A^2\Pi_i \rightarrow X^2\Sigma^+)$, в к-рой зарегистрировано 170 линий. На основе анализа этого спектра определены молек. константы SiN ($A^2\Pi_i$, $v=1$) (см^{-1}): $T_{10}=1972,44370$ (24); $B_1=0,6673630$ (16); $D_1=0,0000011342$ (19); константа спин-орбитального взаимодействия $A=89,09657$ (45); $A_D=0,0000044$ (23); $p=0,006261$ (44); $p_J=0,00000152$ (14); $q=0,0000121$ (93). В. Е. Скурят

х. 1986, 19, N 22

SiN

O.M. 31134

1985

/ 102: 211815g The $A(^2\Pi_i)-X(^2\Sigma^+)$ transition of the silicon-nitrogen (SiN) radical by infrared diode laser spectroscopy. Yamada, Chikashi; Hirota, Eizi (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *J. Chem. Phys.* 1985, 82(6), 2547-52 (Eng). The $A(^2\Pi_i)-X(^2\Sigma^+)$ 1,0 band of SiN was obsd. in the 5 μm region by diode laser spectroscopy in a silane/N elec. discharge plasma. A detailed anal. of ~ 170 obsd. lines has led to a $v = 1$ term value for the A state of $1972.443\ 73(24)$ cm^{-1} with 2.5 std. deviations in parentheses, which, when combined with optical data, was converted to the equil. term value of $993.9(2)$ cm^{-1} . The anal. has clearly confirmed that the spin-orbit coupling const. in the A state is neg. The A-type doubling consts. p and q in the A state were detd. for the 1st time, and other parameters including the rotational and spin-orbit coupling consts. were improved in accuracy by a factor of 100.

$(A^2\Pi_i-X^2\Sigma^+)$

C. A. 1985, 102, N24.

Si_3N_4

1986

104: 195918b Infrared studies of silicon nitride. Ermer, E.; Ptak, W. S. (Inst. Mater. Sci., Sch. Min. Metall., 30-059 Krakow, Pol.). *J. Mol. Struct.* 1986, 143, 5-8 (Eng). Measurements of Si_3N_4 at 100-1400 cm^{-1} were made. There are several varieties of IR spectra which were ascribed to $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$. Tentative explanation of this effect suggesting a complex structure of α phase is proposed.

(лек черкны)

C.A. 1986, 104, N 22

SiN

1988

111: 219703a True potential energy curve and dissociation energy of astrophysically significant silicon nitride (SiN) molecule. Rajamanickam, N. (Dep. Phys., Univ. Mysore, Mysore, 570 008 India). *Acta Cienc. Indica, Phys.* 1988, 14(1), 18-22 (Eng). Exptl. known vibrational levels were used to construct the true potential energy curve for the electronic ground state of the SiN mol. by the Rydberg-Klein-Rees method. By curve fitting of the three-parameter Lippincott empirical potential function in the modified form, the dissoen. energy D_0^0 of SiN was found to be 4.83 ± 0.16 eV.

номер
кривой
и энергии
связи, D_0

C.A. 1989, 111, N 24

SiN

отт. 28985

1988

№ 15 Б1266. Отнесение колебательных полос системы $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ радикала SiN: 0—0 полосы ^{29}SiN и ^{30}SiN . The vibrational assignment for the $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ band system of the SiN radical: The 0—0 bands of ^{29}SiN and ^{30}SiN . Yamada C., Hirota E., Yamamoto S., Saito S. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 1, 46—51 (англ.)

На ИК-спектрометре с диодным лазером с использованием зеемановской модуляции в обл. частот 1918—2019 см^{-1} с точностью около 10^{-4} см^{-1} измерены колебательно-вращат. спектры системы $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ изотопич. образцов радикала ^{29}SiN и ^{30}SiN при их естественном присутствии в основном изотопич. образце ^{28}SiN (I). На миллиметровом спектрометре в обл. частот 130—350 ГГц с точностью 0,05 МГц измерен вращат. спектр I в состоянии $X^2\Sigma^+ v=1$. В результате анализа вращат. структуры колебат. спектров с учетом изотопич. соотношений измеренные переходы отнесены к

М.П.

X. 1988, 19, N 15

7 ветвям для ^{29}SiN и 6 ветвям для ^{30}SiN полосы 0—0 системы $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$. Миллиметровые спектры использованы для уточнения вращательных постоянных в $X^2\Sigma^+$ $v=1$ состоянии. Идентификация спектров отличается от ранее данной в работе (Yamada C., Hirota E., «J. Chem. Phys.», 1985, 82, 2547). С. Н. Мүрзин

SiN

07 28985 1988

7 Л204. Отнесение по типам колебаний для системы полос $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ радикала S:N. Полосы 0—0 ^{29}SiN и ^{30}SiN . The vibrational assignment for the $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ band system of the SiN radical: The 0—0 bands of ^{29}SiN and ^{30}SiN . Yamada Chikashi, Hirota Eizi, Yamamoto Satoshi, Saito Shuji. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 1, 46—51 (англ.)

С помощью диодно-лазерного спектрометра исследован ИК-спектр радикалов SiN в области 5 мкм. Зарегистрированы 34 линии радикала ^{29}SiN и 21 линия ^{30}SiN , значения частот линий, измеренные с погрешностью 0,05 МГц, приведены в табл. Проведено отнесение линий по типам колебательно-вращательных переходов полосы 0—0 системы A—Σ. Анализ полученных данных показал, что энергия уровня A равна $2032,4(I) \text{ см}^{-1}$, а равновесное межъядерное расстояние для радикала в состоянии A равно $1,641879(20) \text{ Å}$. Определен ряд других параметров исследованных радикалов.

Н. Н. Ф.

М-П.

Ф. 1988, 18, N 7

SiN

Am. 28985

1988

108: 84439j The vibrational assignment for the A $^2\Pi-X^2\Sigma^+$ band system of the silicon nitride (SiN) radical: the 0-0 bands of ^{29}SiN and ^{30}SiN . Yamada, Chikashi; Hirota, Eizi; Yamamoto, Satoshi; Saito, Shuji (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(1), 46-51 (Eng). The vibrational assignment for the A-X system of the SiN radical was reexamd. by observing the spectra of $\sim 5 \mu\text{m}$ of ^{29}SiN and ^{30}SiN in natural abundance. The original assignment of Mulliken for the A state was correct, rather than the one currently accepted, i.e., the $5 \mu\text{m}$ spectrum was assigned to the 0-0 band of the A-X system. The term value of the A state was modified to $T_e(A) = 2032.4(1) \text{ cm}^{-1}$ and the equil. internuclear distance in the A state was recalcd. at $1.641\ 879(20) \text{ \AA}$, with the uncertainty in parentheses which was primarily due to that in Planck's const. The vibrational and isotope variations obsd. for the A-type doubling and the spin-orbit interaction consts. of the A state and for the spin-rotation interaction consts. in the X state were explained by treating the electronic matrix elements of the spin-orbit interaction and of the orbital angular momentum between the A/X, B/A, and D/X states as parameters.

(A-X)

C.A. 1988, 108, N10.

SiN

Om 32640,
Foster S.C.,

1989

J. Mol. Spectrosc.,
1989, 137 (2), 430-4.

(A²Π, cond.
no cm.)

The vibronic structure
of the SiN radical

C.A. 1989, III, N 18, 163974u

SiN

От 32640

1989

УДК 7 Б1194. Вибронная структура радикала SiN. The vibronic structure of the SiN radical / Foster S. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 137, № 2.— С. 430—431.— Англ.

Выполнена совместная обработка лит. эксперим. данных по электронно-колебат. переходам радикала SiN связанным с состояниями $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$, $B^2\Sigma^+$, $D^2\Pi$ и $L^2\Pi$, в результате к-рой получен след. набор равно-весных молек. постоянных: состояние $X^2\Sigma^+—\omega_e = 1151,30$, $\omega_e x_e = 6,463$, $\omega_e y_e = -6,9 \cdot 10^{-3}$; состояние $A^2\Pi—T_e = 2032,15$, $\omega_e = 1031,65$, $\omega_e x_e = 5,989$, $\omega_e y_e = -3,02 \cdot 10^{-2}$; состояние $B^2\Sigma^+—T_e = 24299,19$, $\omega_e = 1031,02$, $\omega_e x_e = 16,879$, $\omega_e y_e = 1,616 \cdot 10^{-1}$, $\omega_e z_e = 1,046 \cdot 10^{-2}$; состояние $D^2\Pi—T_e = 28859,55$, $\omega_e = 699,32$, $\omega_e x_e = 3,481$; состояние $L^2\Pi—T_e \simeq 33655$, $\omega_e \simeq 718 \text{ см}^{-1}$.

В. М. Ковба

М.П.
X. 1990, N 7

SiN

(OM 34381)

1989

Müller - Plathe F.,
Laksoren L.,

Chem. Phys. Lett., 1989,
160, N2, 175 - 182.

Martree - ● Fock-Limit
Properties for SiC, SiN, Si₂,

$Si_2^{\#}$ and SiS .

SiN⁻

(om 32807)

1989

grasam.
it
koniam.
coometh.
someth.
p-ue
copic
mic

Peterson K.A., Woods R.C.,

J. Chem. Phys. 1989,
90, N12, 7239-7250.

Ground state spectro-
thermodyna-
mic properties of A20⁻

LiN^- , CP^- , BS^- , BO^- and
 CN^- from Møller-Plesset
perturbation theory.

SiN

1989

№ 2 Д99. Правильная кривая потенциальной энергии и энергия диссоциации важной для астрофизики молекулы SiN. True potential energy curve and dissociation energy of astrophysically significant SiN molecule / Rajamanickam N. // Acta Cien. Indica. Phys.— 1989.— 15, № 3.— С. 139—144.— Англ.

Кривая
потенц. энерг.
осн. сост.

Методом Ридберга—Клейна—Риса на основании эксперим. данных по колебательным уровням построена кривая потенц. энергии для основного состояния важной для астрофизики молекулы SiN. Аппроксимация полученной кривой с помощью модифицированной трехпараметрической эмпирической потенц. ф-ции Липпинкотта привела к энергии диссоциации, равной $4,38 \pm 0,16$ эВ.

В. Л.

ср. 1991, № 2

$\text{Si} \text{N}^-$

1990

Мусаев Д.Т., Яковсон В.В.
и др.

и.п. Молекуляр. структура.
(обзор) Иванова, 1990. С. 18-24.

(ср.  CN^- ; III)

SiN^-

1990

Peterson Kirk A.,

Woods R. Claude.

компл.
энергия,
м, раскрей

J. Chem. Phys. 1990. 92,
N 10. С. 6061-6068.

(Сер.  ALF; III)

ННSi

1991

№ 8 Д46. Равновесная геометрия HNSi. The equilibrium geometry of HNSi / Botschwina P., Tommek M., Bogey M., Demuynck C., Destombes J. L., Walters A., Sebald P. // J. Chem. Phys.— 1991.— 95, № 10.— С. 7769—7770.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовых ф-ций $13s9p3d1f/11s6p2d1f/6s2p$, сгруппированном в $9s7p3d1f/8s4p2d1f/4s2p$, с учетом корреляции электронов (только для валентной оболочки) методом связанных электронных пар исследовано электронное строение молекулы HNSi, образующейся при радиочастотном разряде и представляющей интерес для астрохимии. Равновесные длины связей HN и NSi найдены равными 0,999 и 1,551 Å (молекула линейна). Рассчитан колебательно-вращательный спектр, ф-ция потенц. энергии и вращательные постоянные для систем с N^{28} , N^{29} и N^{30} (вариант. методом и по теории возмущений).

М.Л.

Ф. 1992, № 8

SiN

1992

Elhanine M., Farrerq
R. et al.

($A^2\Pi-X^2\Sigma$) Proc. SPIE-Int. Soc.
Opt. Eng. 1992, 1575,
314-15.

(cell. SiNH; iii)

28 Si ¹⁴N

Am 37058

1992

117: 16236b The infrared emission spectrum of silicon mononitride between 2.2 and 4.4 μm . Elhanine, M.; Hanoune, B.; Guelachvili, G.; Amiot, C. (Lab. Phys. Mol. Appl., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.): *J. Phys. II* 1992, 2(4), 931-8 (Eng). The emission spectrum of a plasma of silane and nitrogen, excited by a radio frequency discharge, was recorded with a high resolu. Fourier transform spectrometer. The first observation by IR spectroscopy is reported of the $X^2\Sigma^+$ ($v = 1, 2$) and $A^2\Pi_i$ ($v = 2, 3, 4$) vibrational levels of $^{28}\text{Si}^{14}\text{N}$, through the observation of 724 unperturbed transitions of the (1-0), (2-0), (2-1), (3-1), and (4-2) vibronic bands of the $A^2\Pi_i-X^2\Sigma^+$ system of this radical. The data were analyzed in a least squares fit procedure, with a std. deviation equal to $6 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$.

lek cnekmp,
 $A^2\Pi_i - X^2\Sigma^+$,

de. n.

C. A. 1992, 117, N2

SiN

SiN⁻

1992

Mc Lean A.D., Liu B.,
et al.,

sp-иел
потенц.
энергии,
Fe, Cu,
Y, De,
равен

J. Chem. Phys. 1992,
97(11), 8459-64.

(all.  B₂⁺; III)

SiN

1993

119: 82377r An analysis of the $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ emission of SiN. Dependence of the electronic transition moment on the Si-N internuclear distance. Ito, Haruhiko; Suzuki, Kaezu; Kondow, Tamotsu; Kuchitsu, Kozo (Department of Chemistry, Nagasaki University of Technology, Nagasaki, Japan 940-21). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 206(3-4), 328-34 (Eng). The relative intensity of the SiN($B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$) emission spectrum was analyzed. The relative value of the electronic transition moment, $R_e(R)$, was found to depend linearly on the internuclear distance, R , as $R_e(R) = 1-0.493(12)(R/\text{\AA})$ ($1.055 \leq R \leq 1.835 \text{ \AA}$). The validity of the r -centroid approxn. is discussed on the basis of the Rydberg-Klein-Rees potentials of the $B^2\Sigma^+$ and $X^2\Sigma^+$ states of SiN. This strong R dependence, which is similar to that obsd. for the isovalent CN($B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$) transition, indicates a strong R dependence of the configuration mixing in the $B^2\Sigma^+$ state of SiN.

($B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$)
uncorr./ R_e ²

C.A. 1993, 119, N 8

LiN

(DM. 37773)

1994

Boldyrev A.I., Gonzalez N.,
Simons J.,

25⁺,

g,

Ж. хим. физ.,
мол. физ.
физ.

J. Phys. Chem., 1994,
98, N 40, 9931-44.

1996

Y of Theoretical Chemistry, Chemical Center, P.O. Box 118, S-221 22, Lund, Sweden. *Chem. Phys. Lett.* 1996, 262(1,2), 80-84. The electronic transition dipole moment function, $R_e(R)$, for the $X^2\Sigma^+$ transition has been studied by complete active space self-consistent field (CASSCF) and multireference singles plus doubles (MRCISD) calculations. It has been found that $R_e(R)$ for $2.00 \leq R \leq 3.45$ a.u. can be described by a fourth-order polynomial of orbital occupancy and the nature of the transition process, it has been shown that the reported explanation is only partially correct, i.e. the neg. dependence is attributed to a strong configuration mixing in the $X^2\Sigma^+$ state. It cannot be explained based on the chem. similarity of carbon. Consequently, theor. results for the ionization transition cannot be used to explain the behavior of the ionization cross section. *Chem. Phys. Lett.* 1996, 262(1,2), 85-88. (Eng), Wiley. 1996. The transition dipole moment function between the first σ and π states of AlH_3 , SiH_4 , PH_3 , and AsH_3 has been calculated using the multireference configuration interaction (MRCI) method. The results are interpreted in terms of the molecular orbital structure without electron correlation. The transition dipole moment function within the acid gas region is calculated from the electrostatic potential. The transition dipole moment function is given from the calculated transition dipole moment function. The increased transition dipole moment function is mostly an inherent property of the molecule. Parametrized Model for the Ionization Cross Section Pairwise Description

C.A. 4997, 126, N 5

SiN

1996

19Б123. Неэмпирическое изучение состояний $X^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi$ радикала SiN. Ab initio study of the $X^2\Sigma^+$ and $A^2\Pi$ states of the SiN radical / Cai Z.-L., Martin J. M. L., François J. P., Gijbels R. // Chem. Phys. Lett.— 1996.— 252, № 5-6.— С. 398–404.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП в полном активном пространстве, методами КВ с несколькими исходными конфигурациями и связанных кластеров (с учетом одно-, двух- и частично трехкратных возбуждений) с использованием корреляционно-согласованного базиса Даннинга рассчитаны равновесная длина связи, константы ангармоничности первого и второго порядков, вращательные постоянные, постоянные центробежного искажения и др. спектроскопические постоянные радикала SiN в основном $X^2\Sigma^+$ - и первом возбужденном $A^2\Pi$ -состояниях. Рассчитаны также дипольные моменты радикала в обоих состояниях и энергия возбуждения состояния $A^2\Pi$. Библи. 35.
Н. С.

М.П.

X. 1994, N 19

SiN

$X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$

with

geom. param

Cai Z.L., Martin J.M.L., François 1996
Y.P., Gijbels R.

Chem. Phys. Lett., 1996, 252, 15/6,
p.398-404.

Ab initio study of $X^2\Sigma^+$ and
 $A^2\Pi$ states of the SiN radical.

SiN

1996

124: 327348r Ab initio study of the $X^2\Sigma^+$ and $A^2\Pi$ states of the SiN radical. Cai, Z.-L.; Martin, J. M. L.; Francois, J. P.; Gijbels, R. (Limburgs Universitair Centrum, Institute for Materials Science (IMO), Department SBG, Universitaire Campus, B-3590, Diepenbeek, Belg.), *Chem. Phys. Lett.* 1996, 252(5,6), 398-404 (Eng). The equil. bond length, harmonic frequency, 1st and 2nd order anharmonicity consts., rotational and centrifugal distortion consts., as well as the rotation-vibrational and centrifugal coupling consts. for the ground $X^2\Sigma^+$ and 1st excited $A^2\Pi$ states of the SiN radical were calcd. at the complete active space SCF (CASSCF), multireference CI (MRCI) and coupled cluster (CCSD(T)) levels using Dunning's correlation-consistent basis sets. The excitation energy of the $A^2\Pi$ state also was computed at these theor. levels. Dipole moments of SiN in the $X^2\Sigma^+$ and $A^2\Pi$ states are given. The authors' study shows that core correlation must be considered to obtain satisfactory accuracy for the spectroscopic consts.

($X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$)
ab initio
param

C.A. 1996, 124, N24

SiN

1998

ab initio
 param
 freq.
 chemp, r,
 mu, mu
 M. COCM.
 P.A. 1998,
 128, N19

128: 236435h Ab initio study of the electronic spectrum of the SiN radical. Cai, Z.-L.; Martin, J. M. L.; Francois, J. P. (Dep. SBG, Limburgs Univ. Centrum, Inst. Materials Science, B-3590 Diepenbeek, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1998, 188(1), 27-36 (Eng), Academic Press. The potential energy curves of the SiN radical for the low-lying electronic states correlating up to the 4th dissociation channel were calculated at the

internally contracted multireference CI (CMRCI) level with Dunning's correlation-consistent polarization valence triple zeta (cc-pVTZ) basis set. The equilibrium bond length (r_e), harmonic frequency (ω_e), 1st- and 2nd-order anharmonicity constants ($\omega_e x_e$, $\omega_e y_e$), rotational constant (B_e), centrifugal distortion constant (D_e), and rotation-vibrational and centrifugal coupling constants (α_e and β_e , resp.), as well as the dipole moment (μ_0), excitation (T_e), and dissociation energies (D_0) for the 11 bound doublet states $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Pi$, $D^2\Sigma^-$, $E^2\Delta$, $F^2\Pi$, $G^2\Delta$, $H^2\Sigma^+$, $I^2\Phi$, and $J^2\Pi$ and 10 bound quartet states $a^4\Sigma^+$, $b^4\Pi$, $c^4\Delta$, $d^4\Sigma^-$, $e^4\Sigma^+$, $f^4\Sigma^-$, $h^4\Delta$, $i^4\Sigma^+$, $j^4\Pi$, and $k^4\Delta$ were calculated at the CMRCI level with Dunning's correlation-consistent polarization valence quadruple zeta (cc-pVQZ) basis set. The authors' calculations imply that the $D^2\Pi$ and $L^2\Pi$ states in the literature should be reassigned as $C^2\Pi$ and $F^2\Pi$, resp. Where available, the authors' results are in good agreement with the experimental data.

1998: 236435h: Interaction of linear ...

cm. 40969

2000

F: SiN
P: 3

133:22678 Dissociation energies of astrophysically important MgO, SO, SiN and TiO from spectroscopic data.

Reddy, R. R.; Ahammed, Y. N.; Gopal, K. R.;
Azeem, P. A.; Rao, T. V. R. Department of Physics, Sri
Krishnadevaraya University Anantapur, India J.
Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 66(5), 501-508
(English) 2000.

C.A. 2000

~~Abstract~~ The potential energy curves for the electronic ground states of astrophys. important MgO, SO, SiN and TiO mols. are constructed by the RKR method. The dissocn. energies are detd. by curve-fitting techniques using the 5 parameters Hulburt-Hirschfelder function. The estd. dissocn. energies are 3.674 $\pm$ 0.075, 5.321 $\pm$ 0.113, 4.492 $\pm$ 0.103 and 6.94 $\pm$ 0.16 eV and MgO, SO, SiN and TiO, resp. The estd. D0 values are in reasonably good agreement with literature values. ~~Abstract~~



en. MgO (117)

F: SiN

2000

P: 3

133:22678 Dissociation energies of
astrophysically important MgO, SO, SiN TiO from
spectroscopic data. Reddy, R. R.; Ahammed, Y. N.;
Gopal, K. R.; P. A.; Rao, T. V. R. Department of
Physics, Sri Krishnadevaraya Universit

Anantapur, India

J. Quant.

Spectrosc. Radiat. Transfer, 66(5), 501-508
(English) 2000 The potential energy curves
for the electronic ground states of astroph
important MgO, SO, SiN and TiO mols. are
constructed by the RKR method. dissocn. energies
are detd. by curve-fitting techniques using the 5
param Hulburt-Hirschfelder function. The estd.
dissocn. energies are 3.674 $\pm$ 0.075, 5.321 $\pm$.
0.113, 4.492 $\pm$. 0.103 and 6.94 $\pm$. 0.16 eV and
MgO, and TiO, resp. The estd. D0 values are in
reasonably good agreement with literature values.

C.A. 2000, 133