

SiHF

SiHF

Русин А.Д., Контев Г.Р. 1974.
и др.

Отчет Липовского

г-та МГУ за 1973-74
по договору N 74/154
между хим. гр-ком МГУ
и ГИИХ-ом.

м.п.

стр 19.

исследования термодин. св. в
практич. продукты высоко-
темпер. р-ций

HSiF

Офис 14813

1982

3 Б216. Исследования методом матричной изоляции реакций атомов кремния. II. Инфракрасный спектр и структура матрично-изолированного фторсилилена: HSiF. Matrix isolation studies of the reactions of silicon atoms. II. Infrared spectrum and structure of matrix-isolated fluorosilylene: HSiF. Ismail Zaky Kafafi, Fredin Leif, Hauge Robert H., Margrave John L. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 4, 1626—1631 (англ.)

Di, см. лос

Измерены ИК-спектры продуктов р-ции атомов кремния с молекулами HF в матрице из Ar при 15 К. Дана схема эксперим. установки. Методика и условия эксперимента не отличались от используемых ранее (см. пред. реф.). Отнесение полос проводили на основании исследования продуктов реакции $\text{Si} + \text{DF}$ в Ar и аннелирования и фотолиза матриц. В ИК-спектрах матриц непосредственно после формирования кроме полос примесей SiH_2 , SiH_4 , Si_2C и SiF_4 наблюдаются новые полосы 1913,1; 859,0 и 833,7 cm^{-1} , отнесенные к колебаниям $\nu_1(\text{H}-\text{Si})$, $\nu_2(\text{HSiF})$ и $\nu_3(\text{Si}-\text{F})$ соотв. радикала HSiF. При высоких конц-ях атомов Si в матрице в-спектрах обна-

45

X. 1983, 19,
N3

ружены полосы в области 3658 см^{-1} , предположительно связанные с образованием соединений типа $\text{Si}_x(\text{HF})_y$. Показано, что фотолиз матриц как во время, так и после осаждения приводит к повышению выхода HSiF . Новые полосы, появляющиеся после фотолиза уже сформированных матриц ($873,8$ и $914,8\text{ см}^{-1}$), не идентифицированы. Отмечено, что р-ция $\text{Si} + \text{DF}$ протекает медленнее, вероятно, вследствие кинетич. изотопного эффекта. Проведен расчет частот и форм нормальных координат и рассчитано силовое поле HSiF , к-рое хорошо воспроизводит эксперим. частоты. Отмечено подобию силовых полей HSiF и HSiOH . Для валентного угла в HSiF принято значение $100 \pm 3^\circ$. В гармонич. приближении рассчитаны термодинамич. функции идеального газа HSiF в интервале т-р $298,15\text{—}5000\text{ К.}$
С. Б. Осин

HSiF

14813

1982

97: 229124u Matrix isolation studies of the reactions of silicon atoms. II. Infrared spectrum and structure of matrix-isolated fluorosilylene: HSiF. Ismail, Zakya Kafafi; Predin, Leif; Hauge, Robert H.; Margrave, John L. (Rice Quantum Inst., Rice Univ., Houston, TX 77251 USA). *J. Chem. Phys.*, 1982, 77(4), 1626-31 (Eng). Si spontaneously reacts with HF and DF to form the mols. HSiF and DSiF in solid Ar. Photolysis of the matrix during deposition greatly enhances the yield of these products. Frequencies for the 3 IR active modes of HSiF and DSiF were accurately measured. The force field of this triat. mol. was fully detd. through normal coordinate analyses. Thermodyn. functions for the fluorosilylene were calcd.

LLK enekmp
&

Mampuse,

Cmpykyppa

C.A. 1982, 97, N26.

SiHF

N14813 UK в маэру
панеэ экен. не Рад

Ismail Z.K., Fredin-L.,
Haeige R.H., Margrave J.L.,
J. Chem. Phys. 1982, 77 (4), 1626-1631.

UK синар ч огуура HSiF
уокур. в маэру

Si раарууе с HF и DF в маэру.
HSiF D SiF

$\nu_1 = 1913, \text{cm}^{-1}$ 1383 (Si-H, Si-D)

$\nu_2 = 859,0$ 638 ~~X~~ HSiF
~~X~~ D SiF

$\nu_3 = 853,7$ 838, 9 (Si-F).

огуура оуеке. 2(Si-H) и
2(Si-F) принара паллун не поил
в SiH₂ и SiF₂. о как и в TCiF
оуеке сн.
~~X~~ 100 ± 30 носо акеке

$$K_{Si-H} = 2,112 \frac{\text{мгмн} \cdot \text{А}^{-1}}{\text{мгмн} \cdot \text{А}^{-1}}, \quad K_{H-Si-F} = 0,910 \text{ мгмн} \cdot \text{А}^{-1} (100)$$

$$K_{Si-F} = 4,692 \text{ мгмн} \cdot \text{А}^{-1} = 0,916 \text{ мгмн} \cdot \text{А}^{-1} (96,6)$$

$$K_{H-Si-F, Si-F} = 0,243 \text{ мгмн}$$

$$K_{H-Si-Si-F} = K_{H-Si-F, Si-H} = 0.$$

Надл. $\times 100$ $\times 100$ $\times 96,6$

1913,1	200	1920,9	1920,9
859,0	850	859,2	860,2
833,7	900	833,2	833,3.



1387	1383,0	1382,8
638,4	637,2	637,0
833,4	832,8	833,2

Приведены г-мн. (без сравне
с Нави).

Ср.	Ст.	Ф.
208,15	33,492	204,271
	33,1581	198,472
10000	53,167	250,133
	52,5552	244,818
2000	63,399	304,643
3000	57,4128	297,470
	62,069	334,126
5000	57,9107	324,582
	56,510	
	349,285	
	353,131	
	378,761	

Small 48,1
1432

Азия в годы
у-зависимости (~10%)
и при а-зависимости (5000 см-1)

ΔФ 5,8 - 954 ДМ.К. Азия

ΔСр 13,4 - 8 ДМ.К. Азия

ΔС 5 - 14,4 " - "

S.M.F

[Am. 17361]

1983

Структур.
и
колебат.
частоты

Colvin M.E., Grev R. S.,
et al.,

Chem. Phys. Lett.,
1983, 99, 15-6, 399 -
-405.

SiH_2
 SiH_2
 SiF_2

Colvin^{M.E.}, Geer R.S., Schaefer H.F. III 1983
 Chem. Phys. Lett. 1983, 99, 15, 6, 393-405.

X^1A_1 , a^3B_1 and S^1B_1 electronic states of silylenes.
 Structures and vibrational frequencies
 of SiH_2 , SiHF and SiF_2 .

Theo. parv
 frequencies
 compound

SCF CI DZ + P-sizes
 geometry u γ_i b 3^x remainder



Выводы из расч. и др.

$\nu_e(\text{Si-H})$
 $\nu_e(\text{Si-F})$
 $\nu_e(\text{H-Si-F})$
 $\nu_1(\text{Si-H})$
 $\nu_2(\text{H-Si-H})$
 $\nu_3(\text{Si-F})$

$\sim 1 A^\circ$

1.510

1.596

97,6°

2059(193)

961(89,86)

896(834)

$\sim 3 A^\circ$

1.463

1.592

115,2°

2372

764

924

$\sim 1 A^\circ$

1.482

1.594

115,3°

2148

704(~560)

915

и 0,005 Å для Si-H_2

и 0,013 Å для Si-F_2

и 0,013 Å для Si-F_2

↑
разница



HSiF

[Om. 17362]

1983

99: 166310v Laser-induced fluorescence of the fluorosilylene (HSiF) radical. Lee, Henry U.; Deneufville, John P. (Mater. Dev. Lab., Energy Conversion Devices, Inc., North Branch, NJ 08876 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1983, 99(5-6), 394-8 (Eng). HSiF was detected by laser-induced fluorescence, following the formation of the ground-state radical in the flow reaction of SiH₄ with F₂ at a total pressure of 0.05-0.15 torr. The radiative lifetime is given for the 1st vibronic state of HSiF ($\tilde{A}^1A''$), as well as a tentative assignment of the prominent bands of the $\tilde{A}^1A'' - \tilde{X}^1A'$ transition.

layer. loss.
properties.

@. A. 1983, 99, N 20

SiHF

1984

Schlegel H. B.

геометрия,
структура,
 P_i , ΔH_f , ΔS .

J. Phys. Chem., 1984,
88, N 25, 6254-6258.

($\text{C}_{\text{res.}} \text{SiH}_2; \text{III}$)

SiHF

[Am. 20355]

1984

Sosa C., Schlegel H. B.

ab initio F. Amer. Chem. Soc.,
pacrim. 1984, 106, N 20,

● 5847 - 5852.

HSiF

[Om. 21575] 1985

20 Б1201. Анализ вращательной структуры спектра возбуждения флуоресценции перехода $\tilde{A}^1A''-\tilde{X}^1A'$ радикала HSiF вблизи 430 нм с доплеровским разрешением. The rotational analysis of a doppler-limited $\tilde{A}^1A''-\tilde{X}^1A'$ fluorescence excitation spectrum of HSiF at 430 nm. Dixon R. N., Wright N. G. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 117, № 3, 280—285 (англ.)

С использованием лазера на красителе с мощностью 25 мВт с накачкой от аргонового лазера исследован спектр возбуждения флуоресценции радикала HSiF, полученного в МВ — разряде в смеси SiH₄ с CF₄. Идентифицирована вращат. структура 0—0-полосы системы электронного перехода $\tilde{A}^1A''-\tilde{X}^1A'$. Помимо линий разрешенных переходов (всего 514) идентифицировано 150 линий запрещенных переходов, для к-рых изменения обоих квантовых чисел, K_a и K_c , четные. Распределение интенсивности запрещенных переходов удовлетворительно описывается по ф-ле Хюгена—Уотсона, учитываю-

М.П.

X. 1985, 19, № 20

щей поворот осей инерции молекулы при электронном возбуждении. Определены значения вращат. и квартичных центробежных постоянных для основного и возбужденного электронных состояний: валентный угол при возбуждении изменяется от 98 до 115° . Е. В. Алиева



HSiF

DM 21575

1985

11 Л437. Анализ вращательной структуры спектра возбуждения флуоресценции $\tilde{A}^1A''-\tilde{X}^1A'$ HSiF вблизи 430 нм, ограниченного по разрешению доплеровским уширением. The rotational analysis of a doppler-limited $\tilde{A}^1A''-\tilde{X}^1A'$ fluorescence excitation spectrum of HSiF at 430 nm. Dixon R. N., Wright N. G. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 117, № 3, 280—285 (англ.)

С помощью перестраиваемого лазера получен с высоким разрешением спектр возбуждения флуоресценции $\tilde{A}^1A''-\tilde{X}^1A'$ радикала HSiF. Радикалы HSiF получали МВ разрядом смеси $CF_4/SiH_4/N_2$. Показано, что в спектре наряду с вращательными полосами типа с наблюдаются запрещенные подполосы с необычными значениями ΔK , возникающие вследствие различия геометрии HSiF в основном и возбужденном состояниях (т. наз. случай поворота осей). Из анализа вращательной структуры вычислены спектроскопич. постоянные и геометрич. параметры HSiF в состояниях $\tilde{A}^1A''$ и $\tilde{X}^1A'$. Е. Н. Т.

М. П., геометр.
структура

ср. 1985, 18, № 11

HSiF

[Dm. 21575.]

1985

103: 45269f The rotational analysis of a Doppler-limited $\tilde{A}^1A''-\tilde{X}^1A'$ fluorescence excitation spectrum of fluorosilylene (HSiF) at 430 nm. Dixon, R. N.; Wright, N. G. (Sch. Chem., Univ. Bristol, Bristol, UK BS8 1TS). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 117(3), 280-5 (Eng). A rotational anal. is presented for the type-c origin band of an $\tilde{A}^1A''-\tilde{X}^1A'$ electronic transition of HSiF, recorded at Doppler-limited resolu. using laser-induced fluorescence. An extension of the equations of J. T. Hougen and J. K. G. Watson (1965) quant. accounts for the intensity of many axis-tilting branches, and the corresponding depletion of the regular type-c branches, with a tilting angle of 2.3° . The bond angle increases from about 98 to 115° on excitation.

$(\tilde{A}^1A''-\tilde{X}^1A')$

fluorescence
analysis

C. A. 1985, 103, N 6

SiHF

Dixon R.N., Wright N.G. 1985

Chem. Phys. Lett., 1985, 117, 13, 280-285

The rotational analysis of a Doppler-limited $\tilde{A}^1A'' - \tilde{X}^1A'$ fluorescence excitation spectrum of SiHF at 430nm.

Исследованы центральная область
характеристики
($\sim 155 \text{ cm}^{-1}$) и вблизи
23225-23380 cm^{-1} .
 $\tilde{A}^1A''(\text{vib}) - \tilde{X}^1A'(\text{vib})$
вращательный анализ

H SiF конденсира при малкият силен со горен ароматен H_2SiF_2
 Етоки при мб разпада с CF_4 . (с H SiF сожен симетрич).
 Киселовна ко Fe . As^+ + две лажер H_2SiW (~~тока 2 си~~)?
 Уел. 8 когнотел $\text{K}^+ \leq 5$, $\text{K}'' \leq 4$. P , Q & R лажер. (горн. ил. коа. метер + 9005)

$\chi^2 A' A^{-1}$ (5.11) (min)
 $A^T A$
 A_0 7.5828(10) 5.3197(8)
 B_0 0.56429(8) 0.54897(8)
 C_0 0.52371(8) 0.51617(8).
 $10^3 \Delta_{JK}$ 9855(88) 3880(10)
 $10^6 \Delta_{JK}$ 22(2) 37.0(14)
 $10^3 \Delta_{JK}$ 0.92(10) 0.86(10)
 $10^3 \Delta_{JK}$ 22
 $10^3 \Delta_{JK}$ 23.262025(2).

Coef. $\alpha_0(Si-H)$ $\alpha_0(Si-X)$ δ
 HSiF $\tilde{X}^1 A'$ 1.510 1.596 97.6
 1.534 1.604 (97.6) -
 $\tilde{A}^1 A''$ 1.482 1.594 115.3 (9)
 1.543 1.593 (115.3) -
 HSiCl $\tilde{X}^3 A'$ 1.561 2.064 102.8 (4)
 $\tilde{A}^1 A''$ 1.433 2.047 116.1 (4)
 HSiBr $\tilde{X}^3 A'$ (1.561) 2.231 102.9 (4)
 $\tilde{A}^1 A''$ (1.494) 2.208 116.6 (4)

SiHF

1985

Kobayashi Hisayoshi,
Koga Toshikatsu.

Theor. chim. acta, 1985,
67, N1, 1-10.

(cell. SiH₂; III)

HSiF

OM 31115

1985

102: 228788y Doppler-limited dye laser excitation spectroscopy of the $A^1A''(000)-X^1A'(000)$ band of fluorosilylene (HSiF). Suzuki, Tetsuo; Hakuta, Kohzo; Saito, Shuji; Hirota, Eizi (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *J. Chem. Phys.* 1985, 82(8), 3580-3 (Eng). The $A^1A''(000)-X^1A'(000)$ band of HSiF was obsd. by Doppler-limited dye laser excitation spectroscopy. The HSiF mol. was produced by the reaction of SiH_3F with microwave discharge products of CF_4 . The obsd. spectrum was almost free of perturbations and was readily assigned to ~ 1300 transitions of $K'_a-K''_a = 5-6, 4-5, 3-4, 2-3, 1-2, 0-1, 1-0, 2-1, 3-2, 4-3, 5-4, 0-0, 1-1, \text{ and } 2-0$. A least-squares anal. of the obsd. spectrum yielded the rotational consts. and the centrifugal distortion consts. for both the A and X states. The mol. structure was discussed using the obsd. rotational consts.

($A^1A''-X^1A'$)
bp. neg.

C. A. 1985, 102, N26

4988a

HSiF

DM 31115

1985

22 Б1254. Спектроскопия возбуждения лазером на красителе полосы $\tilde{A}^1A''(000) - \tilde{X}^1A'(000)$ HSiF с разрешением ограниченным доплеровским уширением. Doppler-limited dye laser excitation spectroscopy of the $\tilde{A}^1A''(000) - \tilde{X}^1A'(000)$ band of HSiF. Suzuki Tetsuo, Nakuta Kohzo, Saito Shuji, Hirota Eizi. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 8, 3580—3583 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

С высоким разрешением ($\sim 1,3$ ГГц) измерен спектр возбуждения полосы $\tilde{A}^1A''(000) - \tilde{X}^1A'(000)$ молекул HSiF образующихся при взаимодействии SiH_4 или SiH_3F с продуктами МВ-разряда через CF_4 . Спектры возбуждались перестраиваемым (415—445 нм) лазером на красителе непрерывного действия. Идентифицировано около 1300 переходов. Возмущений во вращат. структуре практически не наблюдалось. Получены след. зна-

(м.п.)

х. 1986, 19, № 22

чения вращат. молек. постоянных $A, B, C, \Delta_J, \Delta_{JK}, \Delta_K, \delta_J, \delta_K$ (в МГц) состояние $\tilde{A}^1A''(000)$ — 2793,67; 16457,6; 15471,5; 0,0240; 1,090; 116,2; 0,00166; 1,12; $\Phi_J = -4,4 \cdot 10^{-7}$, $\Phi_{JK} = 1,3 \cdot 10^{-5}$, $\Phi_{KJ} = -5,9 \cdot 10^{-4}$, $\Phi_K = 0,157$; состояние $\tilde{X}^1A'(000)$ — 227217,9; 16915,93; 15698,7 0,02562; 0,6737; 14,40; 0,00171; 0,415, $\nu_0 = 23260,0223 \text{ см}^{-1}$. Геометрич. параметры молекулы $R(\text{Si—H}), R(\text{Si—F})$ (А), ΔHSiF (град): состояние $\tilde{A}^1A''(000)$ — 1,484; 1,609; 111; состояние $\tilde{X}^1A'(000)$ — 1; 53; 1,605; 97. В. М. Ковба

HSiF (OM. 26204) 1986

Suzuki T., Hirota E.,

($\tilde{A}^1A'' - \tilde{X}^1A'$) J. Chem. Phys., 1986,
u.n. 85, N10, 5541-5546.

(Sec. HClF;  III)

HFSi

1986

/ 104: 95919j A theoretical study of difluorosilylborane. Bock, Charles W.; Trachtman, Mendel; Mains, Gilbert J. (Dep. Chem., Philadelphia Coll. Text. Sci., Philadelphia, PA 19144 USA). *J. Phys. Chem.* 1986, 90(1), 51-3 (Eng). The interactions were studied of singlet HFSi with BFH_2 and singlet F_2Si with BH_3 to produce F_2HSiBH_2 by using ab initio calens. F_2Si forms an adduct with BH_3 which leads to a transition state for the 1,2 H shift. The equil. geometries were calcd. for the adduct, the transition state, and the "stable" F_2HSiBH_2 at HF/3-21G and HF/6-31G*(5D) levels. The interaction of HFSi with BFH_2 (a 1,2 fluorine shift to form difluorosilylborane) of leads directly to difluorosilylborane without the formation of an adduct and transition state. The deviation from planarity for the bonds emanating from the B atom are attributed to valence shell electron pair attraction.

meop. pac
rem

~~12~~(13) BFH_2 , F_2Si , BH_3

C.A. 1986, 104, 412

H_3SiF

1987

3 J221. ИК-спектр H_3SiF вблизи 2200 см^{-1} , полученный методом фурье-спектроскопии высокого разрешения: колебательно-вращательный анализ основных полос ν_1 и ν_4 и находящихся с ними во взаимодействии полос $3\nu_6^{\pm 1}$ и $3\nu_6^{\pm 3}$. The high-resolution Fourier transform infrared spectrum of H_3SiF near 2200 см^{-1} : Rovibrational analysis of the fundamentals ν_1 and ν_4 and their perturbors $3\nu_6^{\pm 1}$ and $3\nu_6^{\pm 3}$. Bürger Hans, Schulz Petra. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 125, № 1, 140—153

М.П.

С помощью фурье-спектрометра изучена структура колебательно-вращательных полос ν_1 и ν_4 , наблюдаемых в ИК-спектре поглощения H_3SiF . С разрешением $\sim 0,006\text{ см}^{-1}$ определены положения 2066 линий вращательной структуры полос. Колебательно-вращательный анализ наблюдаемых структур выполнен с учетом взаимодействия Кориолиса между $\nu_1 (A_1)$ и $\nu_4 (E)$ с постоянной взаимодействия Кориолиса $\zeta_{1,4} \approx 0,01\text{ см}^{-1}$.

ф. 1988, 18, N3

колебательных резонансов типа Ферми между $\nu_1 (A_1)$, $\nu_4(E)$ и ангармонически расщепленными компонентами $3\nu_6^{\pm 3}(A_1)$, $3\nu_6^{\pm 1}(E)$, соответственно, с постоянными взаимодействия $F_{1666} \simeq 0,61 \text{ см}^{-1}$ и $F_{4666} \simeq 1,48 \text{ см}^{-1}$, а также с учетом ряда локальных возмущений, наблюдаемых в колебательно-вращательных структурах. В результате анализа определены молекулярные постоянные H_3SiF для основного и возбужденных колебательных состояний.

В. К.

FHSi
(HSiF)

om. 30490

1988

Jacox di. E.,

Ti;
Di; j. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 299.



СИМФ

130353

1988

Краснов К. С.,
Рыжикова М. В.,

М. П.

ОНИИТЭХИМ.

(обзор)

Деп. № 378-АП-86,
Черкассы, 1988.



HSiF^+

1989

Hopkinson A.C., *dien M.M.*

ab initio
parameter
estimation

Can. J. Chem. - 1989 - 67 (6) -
991-7

● (*Calc. SiH⁺, III*)

1990

SiHF

Shin S. K., Goddard W. A.
et al.,

M.N.

J. Chem. Phys. 1990. 93,
N^o. C. 4986-4993.

(Cur. ● CH₂; III)

SiHF

1993

Spoliti M., Ramondo F.,
et al.

теорет.
расчет
структ.,
Vi, ста-
бильн.

THEOCHEM 1993, 102,
73-83

(Calc. SiF_2 ● III)

HSiF

1995

123: 125953c Chemical reaction jet spectroscopy, molecular structure, and the bending potential of the A^1A'' state of monofluorosilylene (HSiF). Harper, Warren W.; Karolczak, J.; Clouthier, Dennis J.; Ross, Stephen C. (Dep. Chemistry, Univ. Kentucky, Lexington, KY 40506-0055 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 103(3), 883-91 (Eng). The jet-cooled laser induced fluorescence excitation spectrum of the $A^1A''-X^1A'$ band system of HSiF was obsd. with the chem. reaction jet technique. Vibrational anal. of the spectrum gave upper state fundamental vibrational frequencies of $\nu_1 = 1547 \text{ cm}^{-1}$, $\nu_2 = 558 \text{ cm}^{-1}$, and $\nu_3 = 857 \text{ cm}^{-1}$. Seven bands in the spectrum were recorded at high resolu. and rotationally analyzed, providing excited state mol. consts. The upper state vibrational and rotational bending levels were fitted to a semirigid bender model to obtain the equil. geometry and the potential energy barrier to linearity. Due to correlations in the parameters, it was necessary to fix the bond angle at the ab initio value of 114.5° . The resulting fitted model yielded $r_e(\text{Si-F}) = 1.602 \text{ \AA}$, $r_e(\text{Si-H}) = 1.548 \text{ \AA}$ with a potential energy barrier to linearity of 9130 cm^{-1} .

Lapbert-
CERNP

M.A.

C.A. 1995, 123, N10

HSiF
DSiF

1997

126: 322655v Pulsed discharge jet spectroscopy of DSiF and the equilibrium molecular structure of monofluorosilylene. Harper, Warren W.; Hostutler, David A.; Clouthier, Dennis J. (Dep. of Chemistry, University of Kentucky, Lexington, KY 40506-0055 USA). *J. Chem. Phys.* 1997, 106(11), 4367-4375 (Eng), American Institute of Physics. The jet-cooled laser-induced fluorescence excitation spectrum of the $\tilde{A}^1A'' - \tilde{X}^1A'$ band system of DSiF was obsd. using the pulsed discharge jet technique. Vibrational anal. of the spectrum yielded upper state harmonic vibrational frequencies of $\omega_1 = 1322$, $\omega_2 = 444$, and $\omega_3 = 867$ cm^{-1} . Vibronic bands involving all of the upper state fundamentals of HSiF and DSiF have now been rotationally analyzed, allowing a detn. of the excited state equil. structure as $r'_e(\text{SiH}) = 1.526 \pm 0.014$ Å, $r'_e(\text{SiF}) = 1.597 \pm 0.003$ Å, and $\theta'_e(\text{HSiF}) = 115.0 \pm 0.6^\circ$. The harmonic frequencies and centrifugal distortion consts. were used to obtain harmonic force fields and av. (r_2) structures for the ground and excited states. The ground state av. structure was used to est. the equil. structure of $r_e(\text{SiH}) = 1.528 \pm 0.005$ Å, $r_e(\text{SiF}) = 1.603 \pm 0.003$ Å, and $\theta_e(\text{HSiF}) = 96.9 \pm 0.5^\circ$.

(u.n.)

C.A. 1997, 126, N24

2001

135: 202107g Single vibronic level emission spectroscopy of jet-cooled HSiF and DSiF. Hostutler, David A.; Clouthier, Dennis J.; Judge, R. H. (Department of Chemistry, University of Kentucky, Lexington, KY 40506-0055 USA). *J. Chem. Phys.* 2001, 114(24), 10728-10732 (Eng), American Institute of Physics. Using the technique of single vibronic level emission spectroscopy, the ground state vibrational manifolds of jet-cooled HSiF and DSiF have been studied. The radicals were produced in a pulsed elec. discharge jet using trifluorosilane (HSiF₃ or DSiF₃) as the precursor. The gas phase ground state harmonic vibrational frequencies of both isotopomers have been detd. for the first time. A normal coordinate anal. using the vibrational frequencies and literature values for the centrifugal distortion consts. allowed the detn. of all six ground state force consts. Our previous ground state rotational consts. have been combined with the calcd. harmonic contributions to the α consts. to obtain an av. (r_e) structure and an est. of the equil. (r_e^*) structure. The reliability of the force consts. has been evaluated by Franck-Condon simulations of the emission spectra and comparisons of the calcd. and exptl. detd. inertial defects.



HSiF
DSiF

check,
Franck-Condon,
2e,
vib. rocm

C.A. 2001, 135, N9