

SiBrH

1963

9667

HSIO1, DSIO1, HSIBr, (sol.post.)

Herzberg G., Verma R.D.  
Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc.,  
Columbus, 1962, Columbus, Ohio, S.A.  
49-50

Spectra of the free...

J



I962

HSiBr

1008  
mmck

Herzberg G.

Internat. Sympos. Molec. Struct. and  
Spectrosc. Tokyo, 1962. S. I., s. a.,  
G3/I-G3/II

Последние работы по спектрам сво-  
бодных радикалов.

м. SiC<sub>2</sub>

HSiCl

Оттиск 461 | 1964

HSiBr

✓ 9 Б82. Спектры свободных радикалов HSiCl и HSiBr.  
Herzberg G., Verma R. D. Spectra and structures  
of the free HSiCl and HSiBr radicals. «Canad. J. Phys.»,  
1964, 42, № 3, 395—432 (англ.)  
См. РЖХим, 1965, 1Б66.

1960-1910-IV

SiCl.

(см. HSiCl) III

x. 1965. 9

HSiBe

A. D. Walsh.

1964

Ann. Rept. Progr. Chem./Chem.  
Soc. London/61, 8-26.

Electronic spectra of polyatomic  
molecules.

50325.3509

Ph, Ch

ВФ-3509а-IV

НСiBr (сирфур.)

1965

Hougen J.T., Watson J.K.G. *обтисн 1278*

Anomalous rotational line intensities in  
electronic transitions of polyatomic molecu-  
les: axis-switching. "Canad. J. Phys.", 1965,  
43, N2, 298-320

Есть оригинал.

/англ./

ВИНИТИ 757

HSiBr

1971

1) 12 Б73. Модель переменной приведенной массы для квазилинейных молекул и ее применение к молекуле HSiBr. Shinkle Norman L., Coop J. B. A variable reduced mass model for quasi-linear molecules with application to HSiBr. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 40, № 2, 217—227 (англ.)

Предложена упрощенная модель вычислений колебательно-вращательной энергии трехатомной квазилинейной молекулы, в к-рой учитываются только две степени свободы — деф. кол. и вращение вокруг оси  $a$ , соотв-щей наименьшему моменту инерции. Получено выражение для классич. кинетич. энергии и квантово-

8.  
2/

и.и.

X. 1972. 12

механич. гамильтониана. Потенциальная кривая выбрана в виде параболы, возмущенной гауссовым барьером. Зависимость момента инерции  $J_a$  и приведенной массы для деф. кол. учитывается в явной форме. Вычислены матричные элементы гамильтониана в базисе волновых функций двухмерного изотропного гармонич. осциллятора. Результаты использованы для анализа системы полос в области 4100—6000А свободного радикала  $\text{HSiBr}$ . Вычисленные значения энергии уровней и эффективной вращательной постоянной согласуются с их эксперим. значениями.

М. Р. Алиев



HSiBr<sub>2</sub>

наі. ел.

шпр.

бозб. еел.

8308w Variable reduced mass model for quasilinear molecules with application to HSiBr. Shinkle, Norman L.; Coon, J. B. (Dep. Phys., Texas A and M Univ., College Station, Tex.). *J. Mol. Spectrosc.* 1971, 40(2), 217-27 (Eng). A Hamiltonian for large amplitude bending and *K*-type rotation of triat. mols. is introduced. The complete dependence of the kinetic energy on the bending angle is included. The Hamiltonian contains terms in addn. to the usual 2-dimensional harmonic oscillator Hamiltonian with a potential barrier. Calcns. show that these large amplitude terms have a significant effect on higher rotational energy levels. The bending potential function for an upper electronic state of the HSiBr radical was detd. by comparing exptl. rotation-vibration energy levels with those calcd. by using this Hamiltonian.

HSiBr<sub>2</sub>

Nakatsueji Hiroshi

1973

"J. Am. Chem. Soc."

1973, 95, №2, 354-61.

кон.

структ.

"Форма молекулы в основном  
и возбужден. состояниях"

(см. Bell<sub>2</sub>; III)

HSiBr<sub>2</sub>

1973

ссылка.  
номера

by  
Schidt K.H., Muller A.,  
J. Mol. Struct., 1973,  
18, No 1, 135-151.

● (ссылка CH<sub>3</sub>F; III)

SiHBr

1976

SiHCl

PH<sub>2</sub>

85: 167015a Bending potentials and geometrical structures for hydrogen silicon bromide (HSiBr), hydrogen silicon chloride (HSiCl), and phosphino (PH<sub>2</sub>). Gilchrist, Willis A., Jr. (Texas A and M Univ., College Station, Tex.). 1976. 52 pp. (Eng). Avail. Xerox Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 76-20,587. From *Diss. Abstr. Int. B* 1976, 37(7), 1306.

Vi, emprik, kapam.

C.A. 1976 85 N22



HSiBr  
HSiCl  
DSiCl

$\nu_1$  м. н.  
гемисфера



2. 1979, № 1

21 Б92. Геометрические структуры, деформационные потенциалы и колебательные частоты  $\nu_1$  для состояний  $^1A''$  HSiBr, HSiCl и DSiCl. Gilchrist W. A., Reyna E., Coon J. B. Geometrical structures, bending potentials, and vibrational frequencies  $\nu_1$  for  $^1A''$  states of HSiBr, HSiCl, and DSiCl. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 74, № 3, 345—360 (англ.)

Предложенный ранее (Shinkee N., Cook J. B., «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 40, 217) деформационно-вращательный гамильтониан для трехатомных молекул применен к описанию возбужденных электронных состояний молекул HSiBr, HSiCl и DSiCl. Эффект центробежного искажения валентных связей учтен посредством введения зависимости длины связи HSi от вращательного состояния. Деформац. потенциал представлен в виде суперпозиции параболоида вращения и барьера лоренцевой формы. Параметры модели определены по эксперим. данным для колебательных полос  $(0\nu_20) \leftarrow (000)$  электронного перехода  $^1A'' \leftarrow ^1A'$ . Частота валентного колебания HSi,  $\nu_1$ , найдена равной  $1756 \text{ см}^{-1}$ ; предложенное ранее Герцбергом и Верма значение,  $\nu_1 = 1250 \text{ см}^{-1}$ , не позволяет объяснить эффекты центробежного искажения. Величина потенциального барьера, отвечающего линейной конформации, получена равной  $8700 \text{ см}^{-1}$  для HSiBr и  $12400 \text{ см}^{-1}$  для HSiCl и DSiCl.

1979

4994  
Linnich

HSiBr

HSiCl

DSiCl

м.п.;  $\nu_1$   
колебания

(+1)  $\boxtimes$

фр. 1979, 111

ММММ 7994

1979

11 Д475. Геометрия, деформационные потенциалы и колебательные частоты  $\nu_1$  для состояний  $^1A''$  молекул HSiBr, HSiCl и DSiCl. Gilchrist W. A. Jr., Reyna E., Coon J. B. Geometrical structures, bending potentials, and vibrational frequencies  $\nu_1$  for  $^1A''$  states of HSiBr, HSiCl and DSiCl. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 74, № 3, 345—360 (англ.)

Выполнены расчеты геометрич. структуры и деформационного потенциала в возбужденном состоянии  $^1A''$  молекул HSiBr, HSiCl и DSiCl. Гамильтониан для деформационных колебаний с большой амплитудой и вращения К-типа содержит параметры, которые определены на основании приведения в соответствие расчетных и определенных спектроскопически энергий уровней. Эффект центробежного растяжения связи HSi учтен с помощью простого полуклассич. метода. На основании расчетов сделан выбор между двумя альтернативными значениями частоты валентного колебания HSi. Определены потенциальные барьеры перехода к линейной конфигурации, равные  $\sim 8700 \text{ см}^{-1}$  для HSiBr,  $12400 \text{ см}^{-1}$  для HSiCl и DSiCl.

MSIBz

децималек 12815 1981

обзор,  
теории.  
расшир.  
молекулы.  
орбитали,  
коэффициент

Bohm M. C., Gleiter R.

Theor. chim. acta, 1981,  
59 (2), 153-179.

BrHSi  
(HSiBr)

[om. 30490]

1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi;

J. Phys. and Chem. Ref.  
Data, 1988, 17, N2, 300.



1996

F: HSiBr

P: 3

20B193. Колебательные частоты галогенсилиленов HSiX (X=F, Cl, Br). The vibrational frequencies of halosilylenes HSiX (X=F, Cl, Br) / Gregory K. J., Grev R. S. // WATOC'96: 4{ th} Word Congr. Theor. Orient. Chem., Jerusalem, July 7-12, 1996: Program and Abstr. - [Tel Aviv], 1996. - С. 56. - Англ.

С целью уточнения колебательных частот HSiF, HSiCl и HSiBr в основных и возбужденных электронных состояниях проведено исследование этих молекул в приближениях ССП, ССП в полном активном пространстве, КВ (CISDT, MRCI).

РЖХ, 1998, №20

HSiBr

1996

126: 137017a Resolution of anomalies in the geometry and vibrational frequencies of monobromosilylene (HSiBr) by pulsed discharge jet spectroscopy. Harjanto, H.; Harper, Warren W.; Clouthier, Dennis J. (Dep. Chem., Univ. Kentucky, Lexington, KY 40506-0055 USA). *J. Chem. Phys.* 1996, 105(23), 10189-10200 (Eng), American Institute of Physics. A detailed examn. of the ground and 1st excited singlet electronic states of HSiBr was carried out through anal. of the 500-400 nm band system, using pulsed discharge jet and laser-induced fluorescence techniques. HSiBr and DSiBr were produced by an elec. discharge through SiHBr<sub>3</sub> and SiDBr<sub>3</sub> vapor in Ar. Rotational anal. of the O<sub>0</sub><sup>0</sup> bands yielded the structural parameters  $r_0^{\text{SiH}} = 1.518(1) \text{ \AA}$ ,  $r_0^{\text{SiBr}} = 2.237(1) \text{ \AA}$ ,  $\theta_0^{\text{SiH}} = 93.4(3)^\circ$ ,  $r_0^{\text{SiH}} = 1.497(10) \text{ \AA}$ ,  $r_0^{\text{SiBr}} = 2.208(2) \text{ \AA}$ , and  $\theta_0^{\text{SiH}} = 116.4(7)^\circ$ . Previous anomalies in the geometric parameters and vibrational frequencies were resolved and the ground state bond lengths and vibrational frequencies are comparable to those of SiH and SiBr. Harmonic force fields were detd. for the ground and excited states and the radiative lifetime of HSiBr is  $598 \pm 18 \text{ ns}$ .

См. также,  
Di.

C.A. 1997, 126, N 10

Hsibz

2001

Hosuttler D.A. et al.,

( $\tilde{A}^{1A''} - \tilde{X}^{1A_1}$ )  
M.A., Pi

J. Chem. Phys. 2001,  
115(12), 5485-91

(all. ●, Hsibz; III)