

SiH_2^+
 SiH_2^-

M 1178 - IV - BP

1962

Si_2H_6 , Si_2Cl_6 , SiH_3 , SiH_2^+ , (J, D, ΔH_f)

Skele W.C., Stone F.G.A.

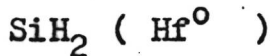
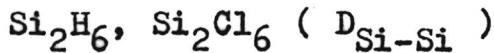
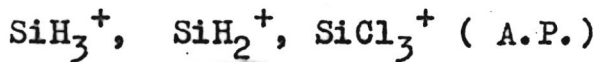
J. Am. Chem. Soc., 1962, 84, N 18,
3599-3600

Silicon-silicon bond dissociation
energies in disilane and hexachloro-
disilane

ARPC, 1965, 69, N93

M

M-387 1962



Steele W.C., Stone F.G.A.

J. Am. Chem. Soc., 1962, 84, 3599-3600

Silicon-silicon bond ...

CA., 1963, 58, N 2,
1002h

M, J

3872

1964

PH_2^- ; PH^- ; P^- ; H^- ; AsH_2^- ; AsH^- ; As^- ;

SiH_3^- ; SiH_2^- ; SiH^- ; Si^- (A.P.)

Ebinghaus H., Kraus K., Mueller-
Duysing W., Neuert H.

Z. Naturforsch., 1964, 19a, 732-6

Negative ions by...

J,M

SiH_3^- ; $\text{SiH}_3\text{SiH}_2^-$; $(\text{SiH}_3)_2\text{SiH}^-$; $(\text{SiH}_3)_3\text{Si}^-$ (суммарно.)

Bürger H, Eujen R, XIV 6383

Z. Naturforsch., 1974, 29b, N9-10, 647-

Die Schwingungsspektren der
Silylanionen $(\text{SiH}_3)_n\text{SiH}_3-n^-$ und
 $(\text{SiD}_3)_n\text{SiD}_3-n^-$ ~~EC 653 (neu.)~~

Rx Num, 1975, 75288

10 (9)

50313.1228

Ph, TC, Ch, MGU

 SiH_2^- 40892 SiH_2 (Aē)

1975

*4-8283

Kasdan A., Herbst E., Lineberger W.C.
 Laser photoelectron spectrometry of the
 negative ions of silicon and its
 hydrides.

(см Si; III)

"J. Chem. Phys.", 1975, 62, N2, 541-548

(АНГЛ.)

0317 пин

ВФ-6243-XIV

302

302

0309

ВИНИТИ

SiH_2^- 523

оттиски 7230

1978

Ball John R., et al

Thomson Colin. Electronic structure of SiH_2 , PH_2 , and their positive and negative ions. «Int. J. Quant. Chem.», 1978, 14, № 1, 39—53 (англ.; рез. франц., нем.)

Методом ССП МО ЛКАО проведена оптимизация геометрии и исследовано электронное строение основных состояний радикала PH_2 и молекулы SiH_2 (2B_1 и 1A_1 , соотв.), а также состояний 3B_1 и 2A_1 катионов и 1A_1 и 2B_1 анионов PH_2 и SiH_2 . Расчеты проводили с использованием сгруппированного базиса гауссовых орбиталей [6,4/2] с добавлением различных поляризац. функций (в максим. базисе учитывались поляризац. p -функции на атомах Н и d -функции на атомах Р и Si). Для всех исследованных состояний проведены анализ заселенностей по Малликену и рассчитаны силовые постоянные, дипольные моменты и другие одноэлектронные св-ва. Для PH_2 равновесная длина связи и угол HPH составили 1,417 А и $93,4^\circ$, соотв. и хорошо согла-

электр.
строение

(+5) X

ж. 1979, № 6

SiH_2^{2-} ommeu 7228 1978

SiH_2^- Takahata Y.

SiH_2 Chem. Phys. Lett

кв. экв.
расчет,
уточнение
1978, 59(3), 472-74

SiH_2^+

1983

Bruna Pablo J., Hirsch G.,
et al.

распредел
Еи, а. н.

Mol. Ions: Geom. and Elect-
ron Struct. Proc. NATO
Adv. Study Inst., Isle of
Kos, Sept. 30-Oct. 10, 1980.
New York; London, 1983,
309-354. (see SH_2^+ ; III)

SiH_2^+ 10m. 17658

1983

Breina P. J., Pejerimhoff S. A.,

теор.
прирѣм

Bull. Soc. Chim. Belg., 1983,
92, n 6-7, 525-546.



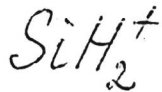
SiH_2^+

DM. 20 033

1984

Melal A.I.; Fahrman N.F.,
et al.,

AP. Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Process., 1984,
61, N2, 247-259.



1984

Power Deirdre, Brint
Paul, et al.

расчёт
геометр.
структ.

J. Mol. Struct., 1984,
108, N 1-2, Suppl.: Theo-
chem, 17, N 1-2, 81-92.

(см. SiH; III)

SiH_2^+

1985

8 Л207. Электронная спектроскопия и вращательно разрешенная преддиссоциация SiH_2^+ по конкурирующим каналам. Electronic spectroscopy and rotationally resolved competitive predissociation of SiH_2^+ . Curtis M. C., Jackson P. A., Sarre P. J., Whitham C. J. «Mol. Phys.», 1985, 56, № 2, 485—488 (англ.)

Методом лазерной фотофрагментарной спектроскопии исследована полоса $A^2B_1(\Pi) \leftarrow \tilde{A}^2A_1$ электронного спектра иона SiH_2^+ . Определена геометрия молекулы в обоих состояниях. Зарегистрирована вращательно разрешенная преддиссоциация по двум различным каналам $\text{Si}^+ + \text{H}_2$ и $\text{SiH}^+ + \text{H}$. В. С. Иванов

(Ze)

ср. 1986, 18, №8

SiH_2^+

Ом. 23148

1985

13 Б1201. Электронная спектроскопия и вращательно разрешенная конкурирующая преддиссоциация SiH_2^+ . Electronic spectroscopy and rotationally resolved competitive predissociation of SiH_2^+ . Curtis M. C., Jackson P. A., Sarre P. J., Whitham C. J. «Mol. Phys.», 1985, 56, № 2, 485—488 (англ.)

Методом лазерной спектроскопии фотофрагментов, с разрешением 20 ГГц исследован переход $\tilde{A}^2B_1(\Pi) \leftarrow \tilde{X}^2A_1$ иона SiH_2^+ . Ионы SiH_2^+ ($\tilde{X}$) образовывались при ионизации молекул SiH_4 электронным ударом. Регистриро-

спектр, м.п.,
номер,
структура,
предиссоц.

Х. 1986, 19, № 13

вали ионы Si^+ и SiH^+ , получающиеся в результате преддиссоциации $\text{SiH}_2^+(\tilde{A})$ по каналам $\text{SiH}_2^+ \rightarrow \text{Si}^+ + \text{H}_2$ и $\text{SiH}^+ + \text{H}$. Определены вращат. постоянные SiH_2^+ : $B'' = 5,094$, $C'' = 3,772$, $B' = 3,956$ см^{-1} . Оценена вращат. постоянная $A'' = 15,75$ см^{-1} . Рассчитаны межъядерное расстояние $R(\text{Si}-\text{H})$ и угол LHSiH в $\text{SiH}_2^+(\tilde{X}^2A_1)$ (соотв., $1,49 \pm 0,01$ А и $119 \pm 5^\circ$). В возбужденном электронном состоянии ион имеет линейную структуру.

SiH_2^+

cm.

23148

1985

104: 26384u Electronic spectroscopy and rotationally resolved competitive predissociation of silyliumyl (SiH_2^+). Curtis, M. C.; Jackson, P. A.; Sarre, P. J.; Whitham, C. J. (Dep. Chem., Univ. Nottingham, University Park/Nottingham, UK NG7 2RD). *Mol. Phys.* 1985, 56(2), 485-8 (Eng). The electronic spectrum of the SiH_2^+ ion arising from the $\tilde{A}^2B_1(\text{II}) \leftarrow X^2A_1$ transition was recorded by laser photofragment spectroscopy. The mol. geometry in both states was detd. Rotationally resolved competitive predissocn. into 2 distinct chem. channels, $\text{Si}^+ + \text{H}_2$ and $\text{SiH}^+ + \text{H}$ was obsd.

(M. Creekmp)
npfucc.

C.A. 1986, 104, NY

SiH_2^+

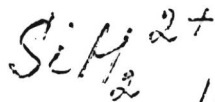
[om. 31072]

1985

DeFrees D.J., McLean A.D.
et al.,

Di;

J. Chem. Phys. 1985, 82,
N1, 333-341.



1985

Koch Wolfram, Frenking
Gernot, et al.,

Рацием
отрыкм.

J. Chem. Soc. Chem.
Commun., 1985, N 16, 1119-
1121.

(cur. SiH_2^{2+} ; III)

SiH₄⁺

[om. 24345]

1985

Perić M., Peyerimhoff S. D.,
et al.,

Int. Rev. Phys. Chem.,

1985, 4, N2, 85-124.

ab initio
расчет
электронно-
рентгено-
Температура.



SiH_2^+

1986

4 Д54. Неэмпирический расчет поверхностей потенциальной энергии для SiH_2^+ . Ab initio potential energy surfaces for SiH_2^+ . Hirst David M., Guest Martyn F. «Mol. Phys.», 1986, 59, № 1, 141—150 (англ.)

Потенциальные поверхности электронных состояний X^2A_1 и A^2B_1 молекулярного иона SiH_2^+ рассчитаны методом конфигурац. взаимодействия с отбором важнейших ф-ций по отношению к набору исходных конфигураций (НИК). Найденные потенц. ф-ции использованы для оценки частот норм. колебаний. Базис АО включал наборы ГФ $(12s9p)[6s5p]$ и $(5s)[3s]$ на Si и H, соответственно, НИК составлялся из 4—15 конфигураций, веса которых в разложении волн. ф-ции превышали 0,1. Расчеты показали, что для обоих изученных состояний минимум потенц. энергии, отделен от области диссоциации иона на $\text{Si}^+(^2P)$ и H_2 существенным барьером. В то же время коллинеарная реакция $\text{Si}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{SiH}^+ + \text{H}$ по данным расчетов характеризуется малой энергией активации и является эндотермичной.

А. И. Дементьев

(М.П.)

ф. 1987, 18, 24

SiH_2^+

1986

8 Б1048. Неэмпирический расчет поверхностей потенциальной энергии SiH_2^+ . Ab initio potential energy surfaces for SiH_2^+ . Hirst David M., Guest Martyn F. «Mol. Phys.», 1986, 59, № 1, 141—150 (англ.)

В рамках неэмпирич. метода с учетом конфигурац. взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями и использованием базисов $(12s9p)/[6s5p]$, дополненного d -ф-циями, для атома Si и $(5s)/[3s]$, дополненного поляризац. р-ф-циями, для H проведены расчеты Пв потенциальной энергии ППЭ для 2A_1 -, 2B_1 - и 2B_2 -состояний катиона SiH_2^+ . Приведены карты ППЭ для 2A_1 - и 2B_1 -состояний, к-рые свидетельствуют, что в каждом случае долина реагентов отделена от равновесной конфигурации значит. энергетич. барьером. Однако для коллинеарных геометрий имеется очень малый активац. барьер для эндотермич. р-ции $\text{Si}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{SiH}^+ + \text{H}$. Получены потенциальные кривые для деформации угла HSiH и растяжения связи $\text{Si}-\text{H}$, к-рые могут быть использованы для расчета колебат. уровней 2A_1 - и 2B_1 -состояний SiH_2^+ . И. Н. Сенченя

М.П.

Х. 1987, 19, № 8

SiH_2^+

[Om. 25 011]

1986

Hirst D.M., Guest M.F.,

поверхн.
поверхн.,
ab initio
расчет

Mol. Phys., 1986, 59,
v1, 141-150.

SiH_2^{2+}

1986

Roch Wolfram,
Frenking G., et al.

meop.
pacrim. J. Chem. Soc. Perkin
Trans., 1986, PT 2, N5,
757-760.

(Cell. SiH_2^{2+} ; III)

SiH_2^+

1987
Berkowitz J., Greene
J.P., et al.

(A.P).

(7)

J. Chem. Phys., 1987,
86, N3, 1235-1248.

(see SiH_4 ; III)

$\text{SiH}_2^+(2)$

(DM. 27430)

1987

Hayaishi T., Koizumi T.,
Matsuo T., et al.,

chemp

Chem. Phys., 1987,
116, No. 151-157.

SiH_2^+

(OM-26387)

1987

Mirst D. cl.,

растет
поверхн.
потенц.
энергии

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt 12, 83,
N1, 61-68.



$\text{SiH}_2^+(2)$

accr. 25904

1987

Pople J. A.

$\Delta_f H^\circ$,
u.n.

J. Phys. Chem.,
1987, 91, N1, 155-
162.

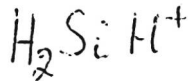
SiH_2^+

1989

Hopkinson A. C.,
Lien M. M.

et. n. Can. J. Chem. 1989. 67,
N6. C. 991-997.

(cat.  SiH^+ ; III)



1989

Hopkinson A.C., dien M.H.

ab initio
pacer
epijayon

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

● (Cer. SiH⁺, III)

$^{28}\text{SiH}_2^+$

Om. 33 492

1989

$^{29}\text{SiH}_2^+$
~~crystal~~

Knight L.B., Jr.,
Winiarski M., et al.,

~~Journal~~ J. Chem. Phys., 1989,

91, No. 3, 3368 - 3377

The generation and trapping

of $^{28}\text{SiH}_2^+$ and $^{29}\text{SiH}_2^+$ in neon
matrices at 4K. Electron spin
resonance and theoretical
investigation.

SiH_2^+

1990

Wright Stuart C.,
Cooper David L. et al.

J. Chem. Soc. Perkin
Trans. Pt. 2. 1990. N3.
C. 369 - 374.

ref. n.

(cell. CH_2 ; III)

SiH_2^+

1992

№12 Б1021. Неэмпирическое исследование некоторых возбужденных электронных состояний иона SiH_2^+ . Ан: ab initio investigation of some excited electronic states of the SiH_2^+ ion / Gu Jian-Ping, Huang Ming-Bao, Kong Fanao, Liu Song-Hao // J. Mol. Struct. Theochem. — 1992. — 253. — С. 217—224. — Англ.

Неограниченным методом ССП рассчитаны девять дублетных электронных состояний иона SiH_2^+ . Геометрич. параметры оптимизированы в рамках группы симметрии C_{2v} . Использован базис сгруппированных гауссовых ф-ций (13s10p1d)/[7s6p1d] на Si и (5s1p)/[3s1p] на H. Три из рассмотренных состояний найдены отталкивательными. Для пяти связанных состояний рассчитаны гармонич. колебат. частоты. Сопоставлены св-ва иона SiH_2^+ и изоэлектронной ему молекулы AlH_2 , ранее исследованной авторами. Отмечено сходство равновесных геометрий соотв. состояний.

А. А. Сафонов

М.П.

X. 1992, N 12

SiH_2^+

1992

/ 116: 136507s An ab initio investigation of some excited electronic states of the silicon hydride (SiH_2^+) ion. Gu, Jianping; Huang, Mingbao; Kong, Fanao; Liu, Songhao (Dep. Mod. Chem., Univ. Sci. Technol. China, Hefei, Peop. Rep. China 230026). *THEOCHEM* 1992, 85, 217-24 (Eng). Ab initio UHF calcns. were done to det. the equil. geometries of the nine doublet electronic states of the SiH_2^+ ion under the C_{2v} symmetry constraint. Among these states, three unstable states and one Rydberg state were found. The vibrational frequencies in the ground state and five excited electronic states were calcd. under the assumptions of valence forces. The properties of eight states of SiH_2^+ were compared with those of the corresponding eight states of AlH_2 which were studied previously, and it was found that the geometries (bent or linear) of these eight states of SiH_2^+ are similar to the corresponding ones of AlH_2 , except for one state.

(ab initio parn
russk. m.
состоянии)
аналогиче с

AlH_2

(теор. парн)

C.A. 1992, 116, N 14

SiH_2^+

1992

2 6 Д135. Неэмпирическое исследование некоторых возбужденных электронных состояний иона SiH_2^+ . An ab initio investigation of some excited electronic states of the SiH_2^+ ion / Gu J.-P., Huang M.-B., Kong F., Liu S.-H. // J. Mol. Struct. Theochem.— 1992.— 253.— С. 217—224.— Англ.

Неэмпирическим неограниченным методом Хартри—Фока рассчитаны равновесные геометрии 9 дублетных электронных состояний иона SiH_2^+ в симметрии C_{2v} . Среди этих состояний обнаружен 3 нестабильных состояния и одно ридбергово состояние. В предположении о валентных силах рассчитаны колебательные частоты в основном состоянии и 5 возбужденных электронных состояниях. Свойства исследованных 8 состояний SiH_2^+ сопоставлены со свойствами соответствующих 8 состояний AlH_2 , изученного ранее. Найдено, что геометрии (изогнутые или линейные) этих 8 состояний SiH_2^+ аналогичны соответствующим состояниям AlH_2 .

М.А.

ф. 1992, № 6

SiH_2^+

[Om. 37292]

1993

Hall D.I., Levick A.P.,
et al.,

предполож.,

$\tilde{A}^2B_1 - \tilde{X}^2A_1$

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. 1993, 89, N1,
177-178. ●

SiH_2^+

1994

120: 227394b Theoretical potential-energy functions and the rovibronic spectrum of the SiH_2^+ ion. Bauer, Cornelia; Hirst, David M.; Hall, David I.; Sarre, Peter J.; Rosmus, Pavel (Fachbereich Chem., Univ. Frankfurt, D-60439 Frankfurt, Germany). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1994, 90(4), 517-21 (Eng). Three-dimensional potential-energy functions for the X^2A_1 and A^2B_1 states of SiH_2^+ have been derived from extensive ab initio MRCI calculations. Spectroscopic constants have been derived from the potential-energy functions by second-order perturbation theory. The calcd. values are in very good agreement with the exptl. data and also provide a secure value for the A_0 rotational const. for the X^2A_1 state. Rovibronic levels were calcd. by a variational method which takes into account Renner-Teller coupling. Theor. derived transition wavenumbers are in good agreement with exptl. results.

X^2A_1, A^2B_1
MCP. Pavel
M. H.

c.A. 1994, 120, v18

SiH_2^+

1994

/121: 164339k A new low-lying potential energy surface for SiH_2^+ . Mort, Steve P.; Jennings, Neville A.; Balint-Kurti, Gabriel G. (School of Chemistry, University of Bristol, Bristol, UK BS8 1TS). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 222(6), 603-7 (Eng). High-resoln. laser photofragmentation spectroscopic studies of SiH_2^+ have stimulated interest in the low-lying potential energy surfaces of the system. DIM, CAS-SCF and multireference CI studies have confirmed the existence of a previously unexplored low-lying potential energy surface which is likely to play an important role in the predissocn. dynamics of the system. At slightly stretched Si-H sepns. the new surface is found to participate in a conical intersection with the ground electronic state of the mol. ion and itself becomes, or correlates with, the ground state of the system in these geometries.

Handwritten notes:
Mort, Steve P.
Jennings, Neville A.
Balint-Kurti, Gabriel G.
Chem. Phys. Lett. 1994, 222(6), 603-7

C.A. 1994, 121, N14