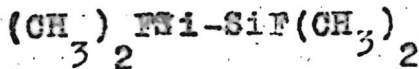


Si-C-F

1987

6073a

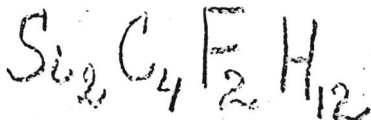


Hayashi M.

J.Chem.Soc.Japan Pure Chem.Sec.,
1957, 78, 10, 1472-1478

- Spectrum...

J



1958

5932

$\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{CH}_3$, $\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{F}$, $\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{Cl}$,
 $\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{Br}$, $\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{I}$, $\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{NC}$, $(\text{CH}_3\text{SiH}_2)_2\text{O}$,
 $(\text{CH}_3\text{SiH}_2)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3\text{SiH}_2)_3\text{N}$ ()

Ebsworth E.A.V., Onyszchuk M.,
 Sheppard N.

J. Chem. Soc., 1958, Apr., 1453-60
 Infrared spectrum...

SiCFH₅

J

1958

6062

$\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{F}$, $\text{CH}_3\text{SiD}_2\text{F}$, $\text{CD}_3\text{SiH}_2\text{F}$,
 CH_3SiHDF , $\text{CH}_2\text{DSiH}_2\text{F}$ (str.)

Pierce L.,

J. Chem. Phys., 1958, 29, # 2, 343-88

Microwave spectrum ...

J

SiCFD_3H_2

6063

1958

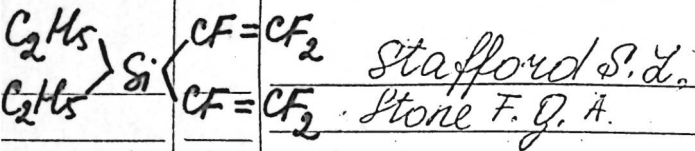
CH_3SiHF_2 (str)

Swalen J.D., Stoicheff B.P.
J.Chem.Phys., 1958, 28, N 4, 671-74

Microwave spectrum of ...

SiCF_2H_4

J



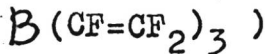
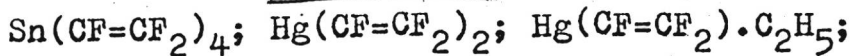
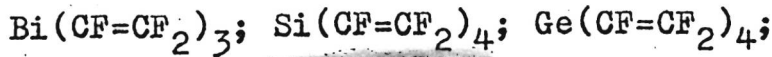
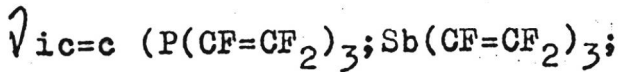
Спектроскоп. акт.,
17, 412

Спектроскопические
исследования органических
соединений.

III. ИК-Спектры

(См. $\text{CF}_2\text{CFBrHal}_2$) III

1962



Стерлин Р.Н., Дубов С.С.

Ж. Всес. хим. о-ва им. Д.И. Менделеева,
1962, 7, № I, II7-II8

РХ., 1962, 22 Б80

$\text{SiC}_8\text{F}_{12}$

ЕСТЬ ОПРИМ.

$(\text{CH}_3)_n\text{SiF}_{4-n}$. Вар-10118-IV 1963

$(n=1-4)$

Ковалев И.Ф.

mol.
post.

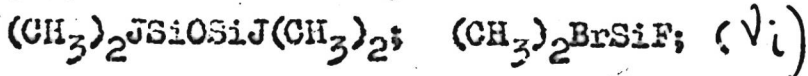
Дока. АН. СССР, 1963,

148, № 3, 569-572.

Потенциальные функции..

1964

M736



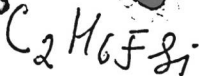
Engelhardt G., Kriegsmann H.

Z. anorgan. und allgem. Chem., 1964,
328, N3-4, 194-200

Spektroskopische Untersuchungen ...

J

PX, 1966, 2 146



orig.

NOT REPRODUCED

10121

1964

CH_3SiF_3 , $(\text{CH}_3)_2\text{SiF}_2$, $(\text{CH}_3)_3\text{SiF}$,
 CH_3SiF , CH_3SiCl , CH_3SiBr (Vi)

Ковалев И.Ф.

Спектроскопия, Методы и Применение,
АН СССР, Сибирск.отд., 1964, 106-10
Колебательные спектры ...

1965

Si(CH₃)₃F
 2.5/3
 C_{3v}

Vibrational spectra of triethylfluorosilane. Toshio Tanaka and Shigezo Murakami (Univ. Osaka). *Bull. Chem. Soc. Japan* 38(9), 1465-8(1965)(Eng). The ir and Raman spectra of triethylfluorosilane were examd. and interpreted by a normal coordinate treatment for skeletal modes by the Wilson FG matrix method, by using a simple Urey-Bradley potential function, and by assuming point group C_{3v} for the mol. symmetry. The results were:

Calc. 4/55.

C.A. 1966. 64.1
 160 abc

dent
 Inoue

Raman	ν . Obs.	Ir	ν . Calcd.	Assignment	Modes of vibration*
131(0)			150	$\nu_8(A_1)$	FSiC ₃ sym. def. + Si-C-C sym. def.
241(3b)			195	$\nu_{11}(E)$	Si-F def. + Si-C-C deg. def.
279(1b)			258	$\nu_{10}(E)$	SiC ₃ deg. def.
297(2b)			286	$\nu_4(A_1)$	Si-C-C sym. def. + FSiC ₃ sym. def.
377(0)			371	$\nu_9(E)$	Si-C-C deg. def. + Si-F def.
571(10)	577(vw)	}	638	$\nu_3(A_1)$	Si-C sym. str. ?
587(9)	587(vw)				
679(1b)	679(w)				
737(3)	742(vs)		752	$\nu_8(E)$	(Si-)CH ₃ rocking
835(1)	834(vs)		849	$\nu_2(A_1)$	Si-C deg. str.
980(3)	984(w)		998	$\nu_1(A_1)$	Si-F str.
991(1)					C-C sym. str.
	1005(sh)				
1011(2)	1016(s)		999	$\nu_7(E)$	C-C deg. str.
1242(3)	1244(m)				(C-)CH ₃ rocking
1304(3)					(Si-)CH ₃ wagging
1380(2)	1383(sh)				(C-)CH ₃ sym. def.
1418(4)	1419(m)				(Si-)CH ₃ scissors
1468(6b)	1467(m)				(C-)CH ₃ deg. def.
2885(10b)					
2912(7)	2913(s)	}			{ (Si-)CH ₃ str. (C-)CH ₃ str.
2940(6)					
2966(7)	2981(sh)				

* (Si-)CH₃ and (C-)CH₃ represent the methylene group attached to Si and Me group attached to C, resp.

William T. Anderson, Jr.

vi $(\text{CH}_3)_3\text{SiF}$, $(\text{CH}_3)_2\text{C}_2\text{H}_5\text{SiF}$ ^v
 $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{CH}_3\text{SiF}$, $(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{SiF}$ 1967

licht K. M108-IV

Z. Chem, 1964, 7, v6, 242-243 (nem).

Спектроскопические исследования на
Si-F соединениях

Есть оригинал.

Pu Xue, 1968, 45185-

10

Si-F

1967

condiment

44412u Spectroscopic studies on Si-F compounds. III.
Kurt Licht (Deut. Akad. Wiss., Berlin). *Z. Chem.* 7(11), 443
(1967)(Ger): The compds. Me_3SiF , Me_2PhSiF , MePh_2SiF , and
 Ph_3SiF were studied by ir and Raman spectra. The Si-F vi-
bration bands decrease with increasing no. of Ph groups.

CJIG

C. A. 1968. 68. 10

01218.1851 *Di, m. n. (CH₂=CHF₃ ; CH₂=CHSiF₃)*
Ex-C, Ph, Ch 40892 XIV 300

Crowder G.A., Smyrl, Norman.

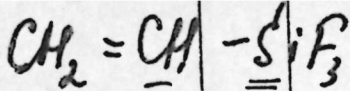
Infrared spectrum of CH₂=CHCF₃ and
CH₂=CHSiF₃.

"J. Chem. Phys.", 1970, 53, N 10, 4102-4103
(англ.)

0261 пик

245 247

ВИНИТИ



XIV - 1384

1970

6 Б310. Колебательные спектры и структура некоторых кремнийсодержащих соединений. III. Винилтрифторсилан. Durig J. R., Hellams K. L. Vibrational spectra and structure of some silicon containing compounds. III. Vinyltrifluorosilane. «J. Mol. Struct.», 1970, 6, № 4, 315—327 (англ.)

Исследован спектр КР (жидкость), ИК-спектр паров $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{SiF}_3$ в области 33—3500 см^{-1} . Проведено отнесение основных колебаний молекулы для симметрии C_s . Наблюдаемые в ИК-спектре полосы 84 и 76 см^{-1} отнесены к 0—1 и 1—2 переходам крутильного колебания группы SiF_3 . Вычислен барьер заторможенного внутреннего вращения $1,7 \pm 0,1$ ккал/моль. Сообщ. II см. РЖХим, 1970, 2Б227.

Я. М. Кимельфельд

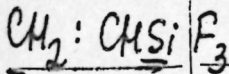
ν_i

ν_o

X. 1971. 6

1970.

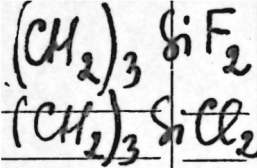
XIV-1384



(103975h) Vibrational spectra and structure of some silicon-containing compounds. III. Vinyltrifluorosilane. Durig, James R.; Hellams, K. Lamar (Dep. of Chem., Univ. of South Carolina, Columbia, S.C.). *J. Mol. Struct.* 1970, 6(4), 315-27 (Eng). The Raman spectrum of liq. $\text{CH}_2:\text{CHSiF}_3$ was recorded with Toronto-arc excitation and quant. depolarization values were measured for all lines of reasonable intensity. The ir spectrum of the vapor was recorded from 33 to 3500 cm^{-1} . The spectra have been interpreted in detail and all 21 normal vibrations have been assigned for a mol. of C_s symmetry. The interesting torsional mode of the SiF_3 moiety was obsd. at 84 cm^{-1} and the 3-fold barrier restricting rotation was calcd. as 1.7 ± 0.1 kcal/mole RCBF

C.A. 1970:73:20

1940

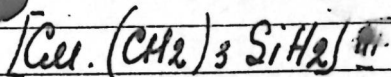


Задача 7.

ИК-спектр

Spectrochim. acta,

1940, A26, n3, 517



SiF₃CO (CO)₄

1970

126367e X Energetics of electron impact reactions. Saalfeld, F. E. (USA). Rep. NRL (Nav. Res. Lab.) Progr. 1970, Feb. 1-7 (Eng). The appearance potential, detd. in a mass spectrometer, can be used to det. thermochem. properties of species that have defied conventional thermal measurement techniques for such reasons as extreme reactivity of the mol., unknown combustion processes, and difficult synthesis. The mass spectrometer technique can be used on <1 µg of material. The method is described, and the assumptions and limitations of the method are given. The appearance potentials and ΔH_f^o are tabulated for ²⁸SiF₃CO(CO)₄ and for 9 ions derived from it by electron bombardment. GXJN

A.P.

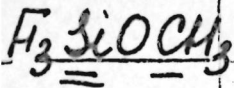
4Mf

(+1)(-1)

C.A. 1980. 72.24



1971

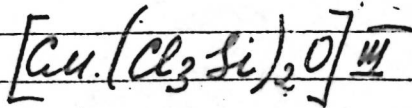


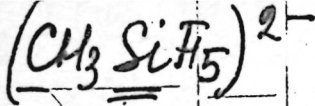
Airey W., et al.

J. Mol. Struct.,

1971, 8, ~ 4, 413.

geom.
ср-ра





1941

117760s Vibrational spectra of methylpentafluorosilicates and normal coordinate analysis of methylpentafluorosilicate ions. Licht, Kurt; Peuker, Christel; Dathe, Christian (Zentralinst. Phys. Chem., Dtsch. Akad. Wiss. Berlin, Berlin/Adlershof, Ger.). *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1971, 380(3), 298-302 (Ger). The ir and Raman spectra of $\text{M}_2[\text{MeSiF}_5]$ ($\text{M} = \text{NH}_4^+, \text{K}^+, \text{Rb}^+, \text{Cs}^+$) were recorded and the bands assigned. The force consts. for $[\text{MeSiF}_5]^{2-}$ were detd. from a normal coordinate anal. The results do not confirm the assumption of F. Klanberg and E. L. Muetterties (1968) of the formation of $[\text{MeSiF}_4]^-$ in aq. soln.

CJJG

C.A. 1971. 74.22

C_2HSiF_3

Pitt C.G.

1971

(Y)

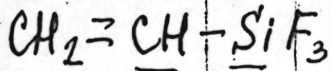
"J. Chem. Soc.", 8,

кв. мех.

1971, (15), 816-18.

нач.

• (см. C_2H_2 ; III).



1972

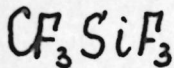
15 B278.) Микроволновый спектр и дипольный момент винилтрифторсилана. Jones Harold, Curl R. F., Jr. Microwave spectrum and dipole moment of vinyltrifluorosilane. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 41, № 1, 226—228 (англ.)

В диапазоне 8—40 ГГц исследован МВ-спектр молекулы винилтрифторсилана. Идентифицированы линии 15 вращательных переходов в основном колебательном состоянии и ряда линий в 5 возбужденных состояниях низкочастотных колебаний группы CF_3 . Определены значения вращательных постоянных для всех колебательных состояний. В частности для основного состояния получено: $A=4044$, $B=2211,85$, $C=2168,54$ МГц. По эффекту Штарка для 4-х линий основного состояния найдены компоненты дипольного момента $\mu_a=2,32\pm 0,05$, $\mu_b=0,52\pm 0,10$ и полный дипольный момент $\mu_t=2,38$ D.

м.н.

X. 1972.

15



1972

158326k Microwave spectrum and barrier to internal rotation in trifluoro(trifluoromethyl)silane. Lide, David R., Jr.; Johnson, Donald R.; Sharp, K. G.; Coyle, T. D. (Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 1972, 57(9), 3699-703 (Eng). The microwave spectrum of CF_3SiF_3 was analyzed. The ground-state consts. are $B_0 = 1328.464 \pm 0.001$ MHz, and $D_J = 0.09 \pm 0.05$ kHz. An extensive series of torsional satellite lines was studied in some detail. The barrier to internal rotation was 489 ± 50 cm^{-1} , corresponding to a torsional frequency of 37.0 ± 2.0 cm^{-1} . The lowest degenerate rocking mode was detd. as 158 ± 12 cm^{-1} . Other vibrational fundamentals are discussed.

 $\nu_i; B_0;$ C.A. 1972. 77. N24.

1972

CF₃SiF₃

2 Д469. Микроволновый спектр и барьер внутреннего вращения в CF₃SiF₃. Lide David R., Jr, Johnson Donald R., Sharp K. G., Goyle T. D. Microwave spectrum and barrier to internal rotation in CF₃SiF₃. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 9, 3699—3703 (англ.)

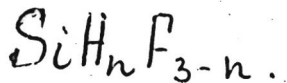
Спектр

С помощью спектрометра со штарковской модуляцией при т-ре сухого льда исследован микроволн. спектр ($J=11 \leftarrow 10$ при 29 Ггц и $J=12 \leftarrow 11$ вблизи 32 Ггц) молекулы CF₃SiF₃ (I) типа симметричного волчка. Оба перехода в основном колебательном состоянии представляют сложную систему полос, простирающуюся на 300 Мгц и более. Для I определены значения вращательной постоянной $B_0 = 1328,464 \pm 0,001$ Мгц и постоянной центробежного искажения $D_J = 0,09 \pm 0,05$ кгц. Вычислено значение барьера внутреннего вращения $V_0 = 489 \pm 50$ см⁻¹. Детально обсуждаются вращательные саллиты линий.

Г. П.

Спектр-73-2

1973

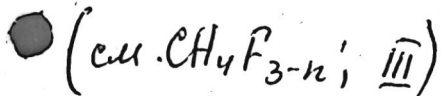


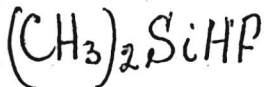
и. н.

раств.

Biddles, Ivan; Hudson, Andrew.

Mol. Phys. 1973, 25(3), 707-12.



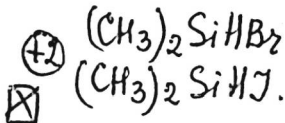


1973

 (V_0)

64541v Vibrational assignments and torsional barrier heights of the dimethylhalosilanes. Durig, J. R.; Hawley, C. W. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, S.C.). *J. Chem. Phys.* 1973, 58(1), 237-48 (Eng). The ir and Raman spectra of Me_2SiHF (I), Me_2SiHBr (II), Me_2SiHI (III), and Me_2SiI_2 were recorded from 4000 to 33 cm^{-1} and assignments are proposed for all the fundamental vibrations. The far ir spectra and low-frequency Raman spectra were recorded from 350 to 33 cm^{-1} for Me_2SiF_2 (IV), Me_2SiHCl (V), Me_2SiCl_2 , Me_2SiBr_2 (VI), Me_2SiH_2 (VII). The Me torsional modes were assigned at 189, 156, 192, 173, 160, 178, 170, and 152 cm^{-1} for I, IV, V, II, VI, III, Me_2SiI_2 , and VII, with corresponding barriers to internal rotation of 2.39, 1.70, 2.56, 2.07, 1.81, 2.18, 2.02, and 1.51 kcal/mole, resp.

C. A. 1973. 78 N10



40319.8747

Ch, TC

 CH_2SiF_3 0534 02 CHSiF_3

1974

2308

Dillard John G.

Reactions of gaseous inorganic negative ions. V. Dissociative electron capture and ion-molecule reactions in methylfluoro-silanes.

"Inorg. Chem.", 1974, 13, N 6, 1491-1495

(англ.)

0170

142 146

ВИНИТИ

40319.8747
Ch, TC

CSiF₃ 40534 02

1974
2308

Dillard John G.
Reactions of gaseous inorganic negative
ions. V. Dissociative electron capture and
ion-molecule reactions in methylfluoro-
silanes.

"Inorg.Chem.", 1974, 13, N 6, 1491-1495

(англ.)

0170 БМН

142 146

ВИНИТИ

40319.8747
Ch, TC

$\text{CH}_3\text{SiF}_2^-$ 40534 02

1974

2308

Dillard John G.

Reactions of gaseous inorganic negative ions. V. Dissociative electron capture and ion-molecule reactions in methylfluoro-silanes.

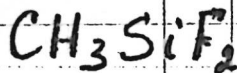
"Inorg.Chem.", 1974, 13, N 6, 1491-1495

(англ.)

0170

142 146

ВИНИТИ

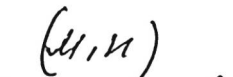
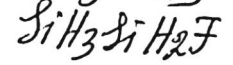
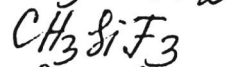
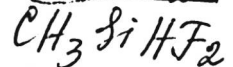
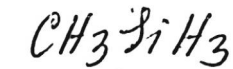


1974

Lombardi J., et al.
J. Chem. Phys., 1974,
61, 15, 397-403.

(40)

(cor. C_2H_6 ; 10)



receptor:

C.A. 1976. 84 N5. 30155

Sierco C; et al. 1975

An. Quim, 1975, 71(5)

462-7.

Valence shell calculation
of the molecular
properties...

Valence shell calculations
of the molecular properties



71227.2580

Ch, Ph, TC, C

43929

 CF_3SiH_3

1976

5903

Dellepiane G., Piseri L., Bosi P.

Improved determination of Barrier heights from self-consistent harmonic approximation. "Spectrosc. Lett.", 1976, 9, N 12, 981-984 (англ.)

0002 пак

839 848

1 0231

ВИНИТИ

$C_2H_5SiH_2F$

1977

16 Б298. Микроволновые спектры этилфторсилана.
Hayashi Michiro, Hikino Hiroaki, Imachi
Misako. Microwave spectra of ethylfluorosilane.
«Chem. Lett.», 1977, № 1, 1—2 (англ.)

(м.п.) Измерены МВ-спектры транс- и гош-изомеров этил-
фторсилана ($CH_3CH_2SiH_2F$) и определены вращатель-
ные постоянные для основного и нескольких возбуж-
денных колебательных состояний. На основании изме-
рений штарковских расщеплений определены дипольные
моменты для транс- ($1,74 \pm 0,2 D$) и гош- ($1,71 \pm 0,17 D$)
изомеров. Из расщеплений для 1-го возбужденного
торсионного колебания метильной группы гош-изомера
установлена величина барьера внутреннего вращения
 2890 ± 60 кал/моль.
О. Г. Гаркуша

Х. 1977. № 16

(CH₃)_nF_{4-n}Si 17 Б119. Фотоионизационная масс-спектрометрия фторометилсиланов (CH₃)_nF_{4-n}Si (n=1—4). Мурга 1977
phy M. K., Beauchamp J. L. Photoionization mass spectrometry of the fluoromethylsilanes (CH₃)_nF_{4-n}Si (n=1—4). «J. Amer. Chem. Soc.», 1977, 99, № 7, 2085—2089 (англ.)

сродства к фтору
Измерены кривые эффективности фотоионизации с появлением молек. ионов M⁺ и осколков с наименьшей энергией (M—CH₃)⁺ для серии метил и фторзамещенных силанов R_nF_{4-n}Si (n=1—4, R=CH₃) в области энергии фотонов от порога ионизации до величины, превышающей порог на 1—2 эв. Для адиабатич. потенциалов ионизации R_{4-n}F_nSi⁺ получены соотв. для n=0—3 значения 9,80±0,03, 10,31±0,04; 11,03±0,03 и 12,48±0,04, а для порогов появления фрагментов R_mF_{3-m}Si⁺, m=3—0, значения 10,03±0,04, 10,70±0,04, 11,70±0,03 и 13,33±0,04 эв. Полученные данные интерпретированы на основании рассмотрения термохимии различ. нейтр. и ионизованных кремнийсодержащих осколков. Для энергии диссоциации гетеролитич. связи (средство к фтору) R_mF_{3-m}Si⁺, m=3—0 получены соотв. значения 219,5, 237,3, 258,4 и 302,0 ккал/моль. Эти величины на 30—50 ккал/моль превышают величины сродства к фтору соотв-щих углеродных соединений. По резюме

л. 1977
N17

50381-574



Om. 6830

1978



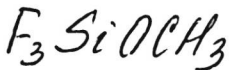
(I_1)

curr. not.

89: 119967y Vibrational spectra and normal mode assignments for methoxytrifluorosilane and methoxytrifluoro-silane- d_3 . Durig, J. R.; Sens, M. A.; Milani-Nejad, F.; Stampf, E. J.; Odom, J. D. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, S. C.). *J. Phys. Chem.* 1978, 82(16), 1836-41 (Eng). The Raman (10-3500 cm^{-1}) and IR (20-3500 cm^{-1}) spectra of gaseous and solid F_3SiOMe and F_3SiOCD_3 were recorded. The spectra were interpreted in detail on the basis of C_s symmetry. Twenty of the 21 normal vibrations were assigned. The Si-O-C skeletal bending mode was obsd. at 145 cm^{-1} (134 cm^{-1} for the $-d_3$ mol.) but no discernable Q branches which could be assigned to vibrationally excited states for this mode were obsd. in the Raman spectrum of the gas. The SiF_3 torsion was obsd. at 44 cm^{-1} in the IR spectrum of the gas and the barrier to internal rotation around the Si-O bond was calcd. to have a value of 395 cal/mol. These results are compared to those recently published on similar mols.



@A, 1978, 89, N14



Am. 6830

1978

Д. Сид. мет.
М. П.

1 Д424. Колебательные спектры и анализ нормальных колебаний F_3SiOCH_3 и F_3SiOCD_3 . Durig J. R., Sens M. A., Milani-nejad F., Stampf E. J., Odom J. D. Vibrational spectra and normal mode assignments for F_3SiOCH_3 and F_3SiOCD_3 . «J. Phys. Chem.», 1978, 82, № 16, 1836—1841 (англ.)

Получены ИК-спектры ($3500—20\text{ см}^{-1}$) газообразных и твердых F_3SiOCH_3 (I) и F_3SiOCD_3 (II), а также спектры комб. рас. I и II при возбуждении лазерной линией $514,5\text{ нм}$ мощностью 3 Вт . Проведен колебательный анализ спектров I и II в группе симметрии C_s с интерпретацией 20 зарегистрированных полос I и II. Определены значения констант валентных силовых полей I и II. Частота скелетного деформационного колебания цепочки $Si—O—C$ в I и II составляет 145 и 134 см^{-1} соответственно, причем разрешение Q -ветвей вращательных подуровней этого колебания в спектрах комб. рас. газообразных I и II отсутствует. ИК-полоса 44 см^{-1} приписана крутильному колебанию группы SiF_3 . Вычислена величина барьера внутреннего вращения вокруг связи $Si—O$, равная 395 кал/моль . Библ. 15. И. В. А.

ср. 1978, № 1

$\text{CH}_2=\text{CHSiH}_2\text{F}$ [XIV - 9893]

1978

$\text{CH}_2=\text{CHSiH}_2\text{F}$ Imachi M.,

нб череп; г. sci. Hiroshima Univ., Ser. A,
м.п.; 1978, 42, N1, p 31-42
н,
структура.

CH_3OSiF_3

XIV-9160

1978

Д462. Спектры и структура кремнийсодержащих соединений. Ч. IX. Микроволновый спектр метокситригторсилана. Odom J. D., Stampf E. J., Li Y. S., Dugig J. R. Spectra and structure of silicon containing compounds. Part IX. Microwave spectrum of methoxytrifluorosilane. «J. Mol. Struct.», 1978, 49, № 1, 1—6 (англ.)

В диапазоне 18,5—40,0 Гц измерены микроволн. спектры молекул CH_3OSiF_3 и CD_3OSiF_3 . Идентифицированы линии вращательных переходов α -типа с $J \leq 9$ R-ветви в основном колебательном состоянии. Определены значения вращательных постоянных и дипольного момента ($\mu_a = 1,67$, $\mu_c = 0,14$ ед. Дебая). Из полученных значений вращательных постоянных при определенных предположениях оценены значения длины связи $(\text{SiO}) = 1,56 \text{ \AA}$ и валентного угла $\angle \text{COSi} = 132^\circ$.

М. Р. Алиев

М. В. Снегирь

М. П.

Геометрия

Ф. 1979.2

CH_3OSiF_3

XIV-9160

1978

24 Б283. Спектры и структура соединений, содержащих кремний. Часть IX. Микроволновый спектр метокситрифторсилана. Odom J. D., Stampf E. J., Li Y. S., Durig J. R. Spectra and structure of silicon containing compounds. Part IX. Microwave spectrum of methoxytrifluorosilane. «J. Mol. Struct.», 1978, 49, № 1, 1—6 (англ.)

м.п.

Измерены в области частот от 18,5 до 40,0 ГГц МВ-спектры двух изотопич. образцов метокситрифторсилана, CH_3OSiF_3 (I) и CD_3OSiF_3 (II), в основном колебательном состоянии. Для I и II, соотв. определены вращательные постоянные (в МГц) $A=4092$ и 3996 , $B=2265,68(7)$ и $2051,17(6)$, $C=2248,71(7)$ и $2034,61(6)$ и главные моменты инерции. Постоянные A вычислены на основе структурных данных. При ряде предположений и с использованием данных по электронной дифракции вычислены структурные параметры I $r(\text{SiO})=1,56(1)$ Å, $\angle\text{COSi}=132(1,5)^\circ$. Величина $\angle\text{COSi}$ хорошо согласуется с лит. данными для родственных соединений. Однако величина $r(\text{SiO})$ значительно меньше известных значений для других родственных соединений кремния.

С. Н. Мурзин

X. 1978, № 24

1981

 $\text{FC}_6\text{H}_4\text{SiH}_3$
 $\text{ClC}_6\text{H}_4\text{SiH}_3$

UK

CNEKMP

(H) A

95: 105691r Spectra and structure of silicon-containing compounds. XIV. Normal vibrations and free rotation in *p*-fluoro- and *p*-chlorophenylsilane. Durig, J. R.; Sullivan, J. F.; Hellams, K. L.; Mulligan, J. H.; Durig, D. T.; Turner, J. B. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, SC 29208 USA). *Chim. Acta Turc.* 1981, 9(1), 59-86 (Eng). The IR spectra of liq. and gaseous *p*- $\text{FC}_6\text{H}_4\text{SiH}_3$, *p*- $\text{ClC}_6\text{H}_4\text{SiH}_3$, and *p*- $\text{ClC}_6\text{H}_4\text{SiD}_3$ were recorded at 33-3200 cm^{-1} . The Raman spectra of the liqs. were also recorded and qual. depolarization measurements were made. The IR spectra of the vapors show that the silyl group is essentially freely rotating in all of these mols. Thus, the local symmetry of the substituted Ph group is C_{2v} , and that of the silyl group is C_{3v} . Vibrational assignments were made according to these local symmetries and all spectra were interpreted in detail. The 39 fundamental vibrations were assigned by the consideration of the previous assignments for some dihalobenzenes, depolarization ratios, and the vapor-phase IR band contours. From the vibrational-rotational structures in the spectra of the vapors, it can be seen that the 6-fold barrier to internal rotation about the Si-C bond is very small but it appears to be significantly larger than the value reported for phenylsilane.

C.A. 1981, 95, V12

 $\text{ClC}_6\text{H}_4\text{SiH}_3$

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SiH}_2\text{F}$

1981

1981. Микроволновый спектр, структура, дипольный момент и внутреннее вращение в этилфторсилане. Hayashi M., Imachi M., Oyama M. Microwave spectrum, structure, dipole moment and internal rotation of ethyl fluorosilane. «J. Mol. Struct.», 1981, 74, № 1, 97—110 (англ.)

Измерены в области частот 8,5—34,0 ГГц МВ-спектры транс- $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SiH}_2\text{F}$ (I) и гош- $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SiH}_2\text{F}$ (II), и одиннадцати их D, ^{13}C , ^{29}Si -изотопозамещенных в основном и трех возбужденных колебательных состояниях. Для всех изотопич. производных обоих изомеров и всех состояний определены вращательные постоянные и кватертичные постоянные центробежного искажения. Для I молек. постоянные в основном состоянии равны (в МГц): $B=2871,63$ (4), $C=2619,48$ (4), $d_J=0,00072$ (38), для II $A=10253,32$ (15), $B=3615,08$ (2), $C=3031,08$ (2), $d_J=0,0052$ (13), $d_{JK}=0-0,098$ (3), $d_K=-0,592$ (30), $d_{ET}=0,075$ (2), $d_{EK}=0,652$ (28). Для всех образцов вычислены главные моменты инерции и дефекты инерции. При ряде допущений для I и II определена возможная структура замещения. По эффекту Штарка для 4 переходов I и II соотв. измерены компоненты дипольных

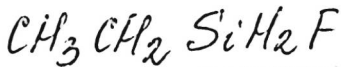
м. в. спектр

м. в.

Х. 1981, N19

моментов $|\mu_a| = 1,785$ (9) и $1,368$ (22) D, $|\mu_b| = 0,070$ (94) и $1,025$ (55) D, только для II компонента $|\mu_c| = 0,066$ (281) D и полные дипольные моменты $|\mu| = 1,787$ (11) и $1,711$ (51) D. Из относит. интенсивности спектров установлено, что II более стабилен, чем I на ~ 55 (50) кал/моль. Из A—E-расщепления MB-переходов II из-за внутреннего вращения метильной группы определена высота потенциального барьера $V_3 = 2775$

(25) кал/моль. Полученные MB-результаты согласуются с известными данными для транс- и гош-изомеров родственных молекул, пропилфторида, -хлорида и -бромиды.
С. Н. Мурзин



1981

10 Д374. Микроволновый спектр, структура, дипольный момент и внутреннее вращение для этилфторсилана. Microwave spectrum, structure, dipole moment and internal rotation of ethyl fluorosilane. Hayashi Michiro, Imachi Misako, Oyamada Mikiya. «J. Mol. Struct.», 1981, 74, № 1, 97—110 (англ.)

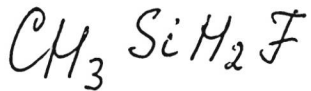
Исследованы микроволн. спектры (область 8,5—34 ГГц) транс-(II) и гош-(II) изомеров этилфторсилана $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SiH}_2\text{F}$, а также одиннадцати его изотопозамещенных (содержащих D, ^{13}C и ^{29}Si) при т-ре сухого льда. Измерения проводились на спектрометре со штарковской модуляцией, что позволило определить значения дипольных моментов. Рассчитаны значения вращательных постоянных (I- и II-молекулы типа асимметричного вытянутого волчка) и постоянных центробежного растяжения, оценены значения моментов инерции, длины связей и углы между ними. По относительной интенсивности спектров I и II разность энергий изомеров оценена в 55 ± 50 кал/моль, а по величине A—E-расщепления полос Q-ветви b-типа для первого возбуж.

Молекулярная геометрия
Э. И. Измайлов
М. В. Смирнов

110

Р. 10. 1981

денного состояния крутильного колебания метильной группы II рассчитана высота барьера заторможенного внутреннего вращения метильной группы V_3 ; она оказалась равной 2775 ± 25 кал/моль. Полученные значения хорошо согласуются с аналогичными величинами для родственных молекул. В. В. Белякова

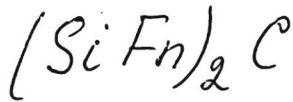


1982

Boggs J. F., et al.

et al. J. Phys. Chem., 1982,
86, N2, 157 - 159.

(see $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{F}$; III)



$n = 1, 2, 3$

раций,
геммер,
структур,
св. ноем.,
 ΔH_f .

1982

Cuthbertson A. F.,
et al.

J. Mol. Struct., 1982,
87, N1, (Theorchem.,
1982, 4 ● N1), 71-79.
(см. $[Be^{2-}Mn]_2 C$; III)



1982

5 Д351. Спектроскопическое исследование антипересечения уровней в CH_3SiF_3 с использованием молекулярных пучков. Avoided-crossing molecular-beam spectroscopy of CH_3SiF_3 . Meerts W. Leo, Ozier Irving. «Chem. Phys.», 1982, 71, № 3, 401—415 (англ.)

Исследованы штарковское, сверхтонкое вращательное и барьерное антипересечения уровней в основном торсионном состоянии молекулы CH_3SiF_3 . Получены вращательные спектры молекулы для $v=0$, $J=12 \rightarrow 13$, $13 \rightarrow 14$ и $0 \rightarrow 1$. Определены: момент инерции метильного волчка I_α (3,170 а. е. м·Å²), эффективная высота барьера $V_3^{\text{эф}}$ (413,979 см⁻¹), эффективная вращательная постоянная $A^{\text{эф}}$ (4059,522 МГц), вращательная постоянная B (3718,042 МГц), g -факторы, электрический дипольный момент и другие молекулярные постоянные. Библ. 26.

А. В. Н.

М.П.

р. 1983, 18, № 5



М.П.

ж. 1983, 19,
N 10

1982

10 Б277. Спектроскопия обойденного пересечения в молекулярном пучке CH_3SiF_3 . Avoided-crossing molecular-beam spectroscopy of CH_3SiF_3 . Meerts W. L., Ozi-
er I. «Chem. Phys.», 1982, 71, № 3, 401—415 (англ.)

Метод обойденного пересечения в молек. пучке, развитый авторами, применен к молекуле метилтрифторсилана, CH_3SiF_3 , для изучения внутреннего вращения. Эта техника позволяет определить энергетич. интервалы между уровнями, не связанными матричными элементами постоянного дипольного момента, но к-рые смешиваются за счет эффектов колебательно-вращательного и ядерного сверхтонкого взаимодействия. Обойденные пересечения классифицируются согласно механизму, к-рый приводит к смещению взаимодействующих уровней. Так в штарковских антипересечениях смещение возникает за счет центробежного дипольного момента. Исследованы штарковские и сверхтонкие вращательные антипересечения, включая штарковские вращательные антипересечения с $K = \pm 3 \leftrightarrow 0$, а также барьеры антипересечения, в к-рых разность энергий в нулевом поле зависит только от торсионных расщеплений. Для $v=0$ чисто вращательные спектры измерены для $J=13 \leftarrow 12$ и $14 \leftarrow 13$ пере-

ходов на МВ спектрометре и для $J=1 \leftarrow 0$ методом электрич. резонанса в молек. пучке (МПЭР). Кроме торсионно-вращательных исследований с помощью соотв-щей техники изучены проявления эффектов Штарка и Зеемана в нормальных МПЭР спектрах. Из совместного анализа существующих МВ данных для $v \geq 2$ и выполненных измерений найдены момент инерции волчка CH_3 $I_a = 3,170(2)$ а. е. м. $\text{\AA}^2$, эффективная вращательная постоянная $A^{\text{эфф}} = 4059,522(22)$ МГц и эффективная высота барьера внутреннего вращения $V_3^{\text{эфф}} = 413,979(14)$ см^{-1} . Из данных для частот чисто вращательных переходов в $v=0, 1, 2$ вычислены вращательная постоянная B и центробежные постоянные $D_J, D_{JK}, D_K, D_{Jm}, D_{Km}, F_{3J}, F_{9J}$, входящие в эффективный центробежный торсионно-вращательный гамильтониан. Из анализа МПЭР спектров определен дипольный момент $\mu(3,2)$, равный $2,33938(14)$ D , и оценен параметр μ_J в $\mu(J,K) = \mu_0 + \mu_J(J+1)J + \mu_K K^2$. По эффекту Зеемана в МПЭР спектре оценены величины молекулярных g -факторов $g_{\parallel} = -0,0252/4/\text{нм}$, $g_{\perp} = -0,0178(2)$ нм.

В. М. Михайлов

CH_3SiF_3

1982

798: 24882p Avoided-crossing molecular-beam spectroscopy of trifluoromethylsilane (CH_3SiF_3). Meerts, W. Leo; Ozier, Irving (Fys. Lab., Katholieke Univ. Nijmegen, 6525 ED Nijmegen, Neth.). *Chem. Phys.* 1982, 71(3), 401-15 (Eng). The avoided-crossing mol.-beam method was applied to CH_3SiF_3 in the ground torsional state. Stark and hyperfine rotational anticrossings were studied, along with barrier anticrossings in which the zero-field energy differences depend only on the torsional splittings. For $\nu = 0$, pure rotational spectra were measured for $J = 13 \leftarrow 12$ and $14 \leftarrow 13$ with a mm-wave spectrometer and for $J = 1 \leftarrow 0$ with the mol.-beam spectrometer. Stark and Zeeman studies were carried out with conventional beam techniques. From a simultaneous anal. of existing microwave data for $\nu \geq 2$ and the current measurements, the moment of inertia of the Me top $I_a = 3.170(2) \text{ amu } \text{\AA}^2$, the effective rotational const. $A_{\text{eff}} = 4059.522(22) \text{ MHz}$, and the effective height of the barrier $V_{3,\text{eff}} = 413.797(14) \text{ cm}^{-1}$. The true values of A and V_3 were obtained with certain approxns. The rotational const. B and several distortion consts. including D_K were evaluated. In addn. to detg. the elec. dipole moment μ to be $2.33938(14) \text{ D}$, the data yielded values for the distortion dipole consts. μ_D and μ_J , and the mol. g -factors $g_{\parallel}$ and $g_{\perp}$.

u.n., 46
C.N.K.M.P.

C.A. 1983, 98, N4.

5

$\text{CH}_3\text{OH} \cdot \text{SiF}_4$

Om. 17784

1983

UK cnekmp

Ault B. S.,

J. Amer. Chem. Soc.,
1983, 105, N18,

5742-46.

$(\text{CH}_3)_2\text{SiHF}$
и др.

1983

8 Д591. Колебательные спектры производных германия и силана. Ч. XII. Новая интерпретация спектра диметилгалосиланов. The vibrational spectra of germane and silane derivatives. XII. A reassignment of the dimethylhalosilanes. Clark Allan J. F., Drake John E., Hemmings Raymond T., Shen Quang. «Spectrochim. acta», 1983, A 39, № 2, 127—136 (англ.)

С помощью Ar^+ -лазера исследованы спектры комб. рас. в области $1000\text{—}3000\text{ см}^{-1}$ диметилсиланов $(\text{CH}_3)_2\text{SiHX}$ и $(\text{CH}_3)_3\text{SiDX}$ ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{J}$) в жидком состоянии. Исследованы также спектры ИК-поглощения в области $400\text{—}3000\text{ см}^{-1}$ жидкой и газообразной фаз. Интерпретация наблюдаемых спектров проведена на основании анализа нормальных координат исследованных молекул. Полученные результаты показали, что интерпретация колебательных спектров диметилсиланов, приведенная ранее в литературе, является ошибочной. Библ. 15. Ч. XI см. Clark A. I. F. et al. «Spectrochim. Acta», 1983, A37, 391. К. Э. М.

(Vi)

Ср. 1983, 18, N 8

CSiF_2

От. 19590

1984

12 Д138. Неэмпирические расчеты наимизших синглетных и триплетных поверхностей для CSiF_2 . Ab initio calculations on the lowest singlet and triplet surfaces for CSiF_2 . Hopkinson A. C., Lien M. H., Csizmadia I. G. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 109, № 3, 246—249 (англ.)

Представлены результаты энергетических и структурных неэмпирических молекулярно-орбитальных расчетов синглетных и триплетных поверхностей изомеров CSiF_2 . Данные сравниваются с подобными результатами, полученными для поверхностей CSiH_2 .

Резюме

теор. расчѐт

ф. 1984, 18, № 12

CSiF_2

Om. 19590

1984

24 Б1041. Неэмпирические расчеты низших синглетной и триплетной поверхностей CSiF_2 . Ab initio calculations on the lowest singlet and triplet surfaces for CSiF_2 . Hopkinson A. C., Lien M. H., Csizmadia I. G. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 109, № 3, 246—249 (англ.)

Ограниченным методом Хартри—Фока в базисе 3—21 ГФ оптимизированы геометрии стац. точек низших синглетной и триплетной потенц. поверхностей CSiF_2 . Уточнение энергий проведено в базисе 6—31 ГФ*. Наиболее стабильный синглет имеет винилиденовую структуру $\text{F}_2\text{Si}=\text{C}$ (I), силилиденевый изомер $\text{F}_2\text{C}=\text{Si}$ (II) менее стабилен на 27, а силаэтиновый FCSiF (III) — на 25 ккал/моль. При этом III имеет нелинейную неплоскую равновесную конфигурацию с диэдрич. углом FCSiF . 96,7°. Наиболее стабильный триплет имеет структуру нелинейного, но плоского транс-силаэтина и на 88 ккал/моль стабильнее I. Цис-силаэтин на

геометр.,
структура,
 ΔH , ΔE ;

X. 1984, 19, 24

8 ккал/моль, а ^3I — всего на 0,7 ккал/моль менее устойчивы по сравнению с транс- ^3III . Наименее стабильный триплет ^3II лежит на 100 ккал/моль выше транс- ^3III . Методом координаты р-ции найдены след. активац. барьеры (ккал/моль): $^1\text{II} \rightarrow ^1\text{III}$, 101; $^1\text{III} \rightarrow ^1\text{I}$, 105; транс- $^3\text{III} \rightarrow$ цис- ^3III , 50; цис- $^3\text{III} \rightarrow ^3\text{I}$, 106. По существу ^3III является триплетным карбеном, а ^1III — одновременно карбеном и силиленом. Вычислены заряды атомов изученных частиц. Замещение атома Н, связанного с Si, на F приводит к стабилизации, так что наименее устойчивым изомером как на синглетной, так и на триплетной Пв оказывается II, в отличие от водородного аналога, где на обеих Пв наиболее стабильным изомером является $\text{H}_2\text{C}=\text{Si}$.

В. Я. Беспалов

$\text{SiF}_4 \cdot (\text{CH}_2)_n \text{O}$

Om. 21605

1985

($n=2-4$)

$\text{SiF}_4 \cdot (\text{CH}_2)_4 \text{O}$

17 Б1237. Изучение методом матричной изоляции комплексов малых гетероциклов. Часть 2. Комплексы SiF_4 и GeF_4 с окисью этилена и родственными молекулами. Matrix isolation study of the complexes of small-ring heterocycles. Part 2. Complexes of SiF_4 and GeF_4

with ethylene oxide and related species. Ault B. S. «J. Mol. Struct.», 1985, 127, № 3—4, 357—367 (англ.)

Измерены ИК-спектры ($1200-200 \text{ см}^{-1}$) продуктов соконденсации к-т Льюиса, SiF_4 и GeF_4 , с кислородсодержащими гетероциклич. основаниями, $(\text{CH}_2)_n \text{O}$ ($n=2-4$) и $(\text{CH})_4 \text{O}$, изолированных в Ag-матрице при $t=14 \text{ K}$. Испарение смесей к-та/Ag и основание/Ag проводили отдельно (метод двойной струи), чтобы взаимодействие в-в проходило на охлаждаемой подложке, что сводило к минимуму образование комплексов состава 2:1. В спектрах наряду с интенсивными полосами непрореагировавших в-в обнаружены полосы, отнесенные к поглощению комплексов состава 1:1. Так, с низкочастотной стороны от полосы трижды вырож-

Ик спектр

(4)

X. 1985, 19, N 17.

$\text{GeF}_4 \cdot (\text{CH}_2)_n \text{O}$; $\text{GeF}_4 \cdot (\text{CH}_2)_4 \text{O}$

денного кол. $\nu(\text{Si}-\text{F})$ при 990 см^{-1} и $\nu(\text{Ge}-\text{F})$ при 800 см^{-1} наблюдаются полосы антисимм. вал. кол. экваториальных связей $\text{Si}(\text{Ge})-\text{F}$ и вал. кол. аксиальной связи $\text{Si}(\text{Ge})-\text{F}$ комплекса. В нек-рых случаях обнаружены полосы координированного основания. Степень возмущения спектра фурана при координации значительно больше, чем для насыщ. гетероциклов, тогда как сдвиг $\nu(\text{Si}-\text{F})$ или $\nu(\text{Ge}-\text{L})$ минимальный. Проведена корреляция между значениями $\nu(\text{Si}-\text{F})$ или $\nu(\text{Ge}-\text{F})$ и сродством к протону основания в газ. фазе. Ч. 1 см. пред. реферат.

И. А. Гарбузова

[Om. 21478]

1985

CF_3SiH_3

Beckers H., Bürger H.,
et al.,

консам.
снхмр,
Vi

J. Fluor. Chem., 1985,
27, N 4, 461-466.

CF_3SiH_3

[Am. 23359]

1986

колебат.
спектр
и нормальн.
координат-
анализ,
молекуляр-
структура

Beckers H., Bürger H.,
Eujen R.,

J. Mol. Struct., 1986,
140, N3-4, 281-301.

$\text{CF}_3\text{SiH}_2\text{D}$

CF_3SiHD_2

Om. 23359

1986

Beckers H., Bürger H.,
Eujen R.

колебат.
спектр.
и нормальн.
координат.
анализ,
молекуляр.
структ.

J. Mol. Struct.,
1986, 140, N3-4,
● 281-301.

CF_3SiD_3

[Om. 23359]

1986

Beckers H., Bürger
H., Eujen R.

J. Mol. Struct.,
1986, 140, N 3-4,
● 281-301.

колебаний.
спектр
и нормальн.
координат.
анализ,
молекуляр.
спектр.

CSiF₂

[деп. 24/95]

1986

растий
Европ. и
барьер
измер.

Чаркем О.П.,
Зюблева Т.С.

Координат. жммы,
1986, 12, №8, 1011-1037.

CH_3SiF_3

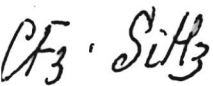
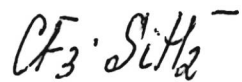
DM-23184 1986
Kochikov I. V.,

Kuramshina G. M.,
et al.,

Uul. noom.

Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2,
- Khim. 1986, 27(1), 25-
33.

P.A. 1986, 104, N 16, 136369a



геометр.,
структ.,
стабильн.
конформация,
теор. расч.

[Om. 23335]

1986

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



SiH_3CF_3

(om. 25343a")

1986

Magnusson E.,

M.N.,
Kb. Mex.
pacrim

Austral. J. Chem., 1986,
39, N5, 747-755.

$\text{SiH}_3\text{CH}_2\text{F}$ [Om. 25343a"]

1986

М.П.,

Magnusson E.,

кв. мех-

раств

Austral. J. Chem., 1986, 39, N 5,

747-755.

CF_3SiF_3

1986

11 Б1107. Влияние фторирования на длину связи Si—C. Экспериментальное и теоретическое структурное исследование CF_3SiF_3 . The effect of fluorination on the Si—C bond length. Experimental and theoretical structural study of CF_3SiF_3 . Rempfer Beate, Pfafferoth Gregor, Oberhammer Heinz, Beckers Helmut, Burger Hans, Eujen Reint, Boggs James E. «Rev. chim. minér.», 1986, 23, № 4—5, 551—564 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена геометрич. структура молекулы CF_3SiF_3 (I). Для нежесткой модели с заторможенным внутр. вращением получены след. значения межъядерных расстояний (r_g , Å) и углов C—F 1,342(2), Si—F 1,557(2), Si—C 1,910(5), $\angle\text{FCF}$ 107,6(3)°, $\angle\text{FSiF}$ 108,9(3)°. Исследованы также

М.А.

X. 1987, 19, 11

ИК-спектр I в газовой фазе и спектр КР в жидкости. Сопоставление длин связей Si—C в CH_3SiH_3 [1,864(1) Å], CH_3SiF_3 [1,825(4) Å], CF_3SiH_3 [1,923(3) Å] и в CF_3SiF_3 [1,910(5) Å], а также соотв. силовых постоянных растяжения показало сильное влияние фторирования на силу связи Si—C. Изменения в длинах связей при фторировании объяснены комбинацией полярных взаимодействий и сокращения валентной оболочки атома Si. Неэмпирич. расчеты исследованного ряда молекул не полностью воспроизводят закономерности в измеренных длинах связей.

В. Спиридонов

$(\text{CH}_3)_3\text{SiF}$ и др.

1986

24 Б1165. Есть ли ($p-d$) π -связь в фторсиланах? Строение молекул $(\text{CH}_3)_{4-n}\text{SiF}_n$ ($n=1-3$) и $(\text{трет-}\text{C}_4\text{H}_9)_2\text{SiF}_2$ в газовой фазе. ($p-d$) π -Bonding in fluorosilanes? Gas-phase structures of $(\text{CH}_3)_{4-n}\text{SiF}_n$ with $n=1-3$ and of $\text{t-Bu}_2\text{SiF}_2$. Rempfer B., Oberhammer H., Auner N. «J. Amer. Chem. Soc.», 1986, 108, № 14, 3893—3897 (англ.)

Методом газовой электронографии изучено строение молекул $(\text{CH}_3)_3\text{SiF}$ (I), $(\text{CH}_3)_2\text{SiF}_2$ (II), $(\text{CH}_3)\text{SiF}_3$ (III) и $(\text{трет-}\text{C}_4\text{H}_9)_2\text{SiF}_2$ (IV). Для молекулы I в структурный анализ включены также вращательные постоянные из микроволновых спектров. Получены след. геометрич. параметры (r_g) для молекул I—IV, соотв.: Si—C 1,848(2), 1,836(2), 1,828(4), 1,869(3), Si—F 1,600(2), 1,586(2), 1,570(2), 1,606(4), C—H 1,110(3), 1,132(6), 1,139(5), 1,102(4) Å, валентные углы CSiC 111,5(2), 116,7(6), —, 125,5(1), FSiF, —, 104,6(4).

(М.П.)

Х. 1986, 19, № 24

106,8(5), 97,7(8), НСН 108,2(4), 111,2(10), 108,6(10),
107,4(8)°. Результаты интерпретированы с учетом уве-
личения вклада полярности связей и сжатия валентной
оболочки кремния, обусловленного увеличением числа
атомов F. Неэмпирич. расчет SiF_4 указывает на нич-
тожный вклад ($p-d$) π -компоненты в хим. связь.

В. С. Мастрюков

$H_2Si(CF_3)_2$
 $H_2Si(CCl_3)_2$
 $H_2Si(CBr_3)_2$
Lr gp.

el. n.

1986

Stølevik Reidar,
Bakken Pirkko.

J. Mol. Struct.,
1986, 145, N3-4,
287-295.

(see $H_2C(CF_3)_2$; 141)

$\text{Si}(\text{CH}_2\text{F})_4$
и гр.

м.п.

1986

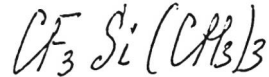
9 Д105. Конформационные энергии, высоты барьеров вращения и структура молекул $\text{Si}(\text{CH}_2\text{X})_4$ ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$). Conformational energies, rotational barrier heights and molecular structures in $\text{Si}(\text{CH}_2\text{X})_4$ molecules ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$). Stølevik Reidar, Bakken Pirkko. «J. Mol. Struct.», 1986, 144, № 3—4, 281—286 (англ.)

Методом молекулярной механики с учетом взаимодействий между несвязанными атомами рассчитаны энергии различных конформаций, силовые постоянные валентных, деформационных и крутильных колебаний и барьеры вращения для $\text{Si}(\text{CH}_2\text{X})_4$, $\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$. Для $\text{X}=\text{F}$ в газовой фазе при комн. т-ре должны существовать все 6 возможных конформеров симметрии D_{2d} , C_1 , C_2 , C_s , C_1^* и S_4 . Для $\text{X}=\text{Cl}$ преобладают конформеры S_4 и D_{2d} с небольшим кол-вом C_1 ; для $\text{X}=\text{Br}$ — только S_4 и D_{2d} . Обнаружено, что в сравнении с молекулами $\text{C}(\text{CH}_2\text{X})_4$ силовые постоянные крутильных колебаний и барьеры вращения сильно уменьшены. Оценены частоты крутильных колебаний.

В. Л. Лебедев

ср. 1986, 18, № 9

1987



107: 245488w Vibrational spectra and normal co-ordinate analysis of trifluoromethyl compounds. Trimethyl(trifluoromethyl)silane, and its deuterated species. Eujen, Reint (Anorg. Chem., Univ.-Gesamthochsch., 5600 Wuppertal, 1 Fed. Rep. Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1987, 43A(9), 1165-9 (Eng). The IR gas and Raman liq. spectra of $\text{CF}_3\text{Si}(\text{CH}_3)_3$ and $\text{CF}_3\text{Si}(\text{CD}_3)_3$ are reported and assigned for C_{3v} symmetry. Force consts. were calcd. by a combined anal. of both isotopomers yielding $f(\text{Si}-\text{CF}_3)$ 2.63, $f(\text{Si}-\text{CH}_3)$ 3.07 and $f(\text{C}-\text{F})$ 5.70 N cm^{-1} . The apparent weakness of the $\text{Si}-\text{CF}_3$ bond confirms the results obtained on other CF_3 silanes and is discussed with respect to related mols.

UK, CKP,

Pi, Chem. NOCM.

C. A. 1987, 107, N 26

SiF_3CH_3

[om. 26745]

1987

Ibuki T., Washida N.,
Itoh U., et al.,

chem
novelizer.

Chem. Phys. Lett., 1987,
136, N5, 447-450.

CF₃SiH₃

1988

108: 139920s Microwave spectra, structure, and dipole moment of (trifluoromethyl)silane. Durig, J. R.; Attia, G.; Groner, P.; Beckers, H.; Buerger, H. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, SC 29208 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(2), 545-52 (Eng). The microwave spectra at 18.5-39.0 GHz were measured and assigned for the isotropic species CF₃²⁸SiH₃, CF₃²⁹SiH₃, CF₃³⁰SiH₃, = CF₃²⁸SiD₃, CF₃²⁹SiD₃, CF₃³⁰SiD₃, CF₃²⁸SiDH₂, CF₃²⁹SiDH₂, CF₃²⁸SiD₂H, and CF₃²⁹SiD₂H. In addn. to the vibrational ground state, 2 torsionally excited states were assigned for some of the asym. substituted mols. whereas ≤13 states involving multiple excitation of the torsional and/or CF₃ rocking modes were assigned for some of the sym. rotor species. From a least squares adjustment to fit 18 rotational consts. for the vibrational ground state, the following *r*₀ structural parameters were obtained: *r*(C-F) = 1.3600 ± 0.0029 Å, *r*(C-Si) = 1.8997 ± 0.0071 Å, *r*(Si-H) = 1.4600 ± 0.0007 Å, *r*(Si-D) = 1.4600 ± 0.0007 Å, ∠ CSiH = 107.15 ± 0.03°, and ∠ FCSi = 113.28 ± 0.30°. The *r*_s structural parameters were obtained for the SiH₃

148 cнeтp, cпpякнeнa

C. A. 1988, 108, n16

moiety and were $r(\text{Si-H}) = 1.4598 \pm 0.0033 \text{ \AA}$ and $\angle \text{CSiH} = 107.17 \pm 0.09^\circ$. The dipole moment was obtained from the ground state Stark effect measurements on $\text{CF}_3^{28}\text{SiDH}_2$ and was $|\mu_a| = 2.32 \pm 0.02 \text{ D}$. The barrier to internal rotation was estd. from relative intensity measurements as $403 \pm 20 \text{ cm}^{-1}$ ($1.15 \pm 0.06 \text{ kcal/mol}$). These results are compared to the corresponding parameters of some similar mols.

$\text{CH}_2\text{ClSiF}_3$

$\text{CHCl}_2\text{SiF}_3$

CCl_3SiF_3

(om. 29276)

1988

Kochikov I.V.

J. Mol. Struct., 1988,

172, 299-308.

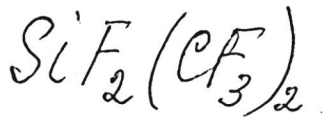
CF₃SiH₃

1988

108: 139932x The millimeter-wave spectrum of trifluoromethylsilane. Smith, John G. (Phys. Chem. Dep., Univ. Newcastle upon Tyne, UK NE1 7RU). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 128(1), 288-95 (Eng). Mm-wave rotational spectra were recorded for CF₃SiH₃ in its ground and some excited vibrational states. The *l* resonance in 2 of the degenerate vibrations was analyzed to yield Coriolis consts. $\xi_{12} = 0.2531(1)$ and $\xi_{11} = -0.6955(46)$. The ¹³C isotopic species was located. These results confirm previous work on the structure and force field of this mol.

MB cncmp

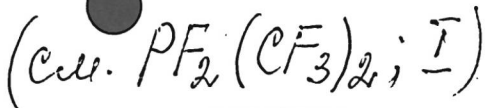
C.A. 1988, 108, N 16



1989

Gel'mbold't V. O.,
D'yachkov P. N.

(Кузовлевская) Zh. Neorg. Khim.
1989, 34 (4), 840-3.



[Om. 31875]

1989

CH_3SiF_3
снрхм.,
консам-раерм
ab initio
раерм

Sakai S., Imoto M.,

J. Mol. Struct.

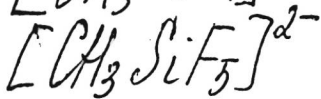
Theochem. 1989, 187,

317-323



[om. 31873]

1989



Sakai S., Imoto M.,

структура,
конфигурация,
расчет,
ab initio
расчет

J. Mol. Struct.
Theorchem. 1989, 187,
317 — 323.

FCSi
CSiF

(om. 31583)

1989

Зюбенева Т.С.,

столбам.
и
струк-
тура

Же. Меорган. Жемесы,
1989, 34, №5, 1340-1342.

FCi

(DM 33896)

1990

Fil

Зюбсена Ф. С.,

оттабильн.

структура,

теор.

рассет.

М. Мейрам. Химия,

1990, 35, N 6, 1393 -

-1396.

CH_3LiF_3

(DM-36010)

1991

Bozek J. D., Bancroft G. M.,
et al.,

Pomo-
mekmp.
enekmp

Phys. Rev. A 1991, 43, N7,
3597-3608.

Vibrational fine structure in
the Si 2p ● photoelectron

CFSiH₃

1992

Irikura Karl K.,
Goddard W. A., (III). et al.

et al. J. Amer. Chem. Soc. 1992.
114, N. P. C. 48-51.

(cur. ● CH₂; III)

CH₃SiHDF

CH₃SiHDCl

1993

119: 169470q Infrared studies of silicon-hydrogen bonds and the structures of methylsilylamines and ethers. McKean, D. C.; Torto, I. (Chem. Dep., Univ. Aberdeen, Aberdeen, UK AB9 2UE). *Spectrochim. Acta, Part A* 1993, 49A(8), 1095-104 (Eng). Gas phase IR spectra have been investigated in a series of methylsilyl compds., including MeSiHDX (X = F, Cl), MeSiHX₂ (X = F, Cl), Me₂SiHCl, (Me₂SiH)₂NH, (MeSiH₂)₃N, (MeSiHD)₃N, (MeSiH₂)₂NMe*, (Me₂SiH)₂NMe*, MeSiH₂NMe₂*, Me₂SiHNMe₂, (MeSiHD)₂O and (Me₂SiH)₂O. In the asterisked mols., pairs of ν SiH bands are seen which confirm the existence of fixed conformations. Amongst the other compds., the single band seen is attributed on the basis of the α -Me substituent effect to a fixed conformation in the cases of Me₂SiHNMe₂ and (Me₂SiH)₂O. In (Me₂SiH)₂NH and (MeSiH₂)₃O, free internal rotation about the SiN and SiO bonds seems likely. Apart from the possible case of (MeSiH₂)₃N, the spectra appear to be compatible with the electron diffraction evidence, and for the most part in broad agreement with the structures found. 2ν SiH bands are in general harder to see in these amines and ethers than in Me₂SiHCl. A likely transition to a (1,1) local mode state is obsd. in (MeSiH₂)₃N. Detn. of barriers to internal rotation in these mols. should be a high priority.

(UK)

C.A. 1993, 119, N 16

SiF₄CO

1994

Urban Rolf-Dieter,
Takami M.

UK Reza Kagaaku Ken-
enckmp кyu 1994, 16, 83-5.

( (SiF₄)₂; III)

$(CH_3)_2 SiF_2$
 $(CH_3)_2 SiCl_2$

1994
Vacek George, Mastroye-
kov V. S., et al.,

J. Phys. Chem., 1994,
98, N 44, 11337 - 341

M. N.

P. M. X. N 7, 1995, 7 51040

CH_3SiF_3

1996

Drean P., Colmont

J.-M. et al.

J. Mol. Spectrosc. 1996,
176 (1), 23-7.

(cell.  AsF_3 ; III)

$\text{LiF}_n(\text{CO}_2)^+$ (Im: 39 000)

1997

$n = 2 \text{ u } 3$

Ketvirtis A.E., Baranov VI.
et al.,

J. Phys. Chem. A 1997, 101,
7258-64.

Experimental

● and Theoretical
Studies of $\text{LiF}_n(\text{CO}_2)^+$ Cations

With $n=2$ and 3: A search for
Pentacoordinate Cationic Silicon.

SiF₄-CO

1997

Urban R-D. et al.,

uk example J. Mol. Struct. 1997,
413-414, 571-579.

(all-SiF₄- N₂; III)

9M 40 405

2000

F: $\text{SiF}_3+(\text{CO})_n$

P: 3

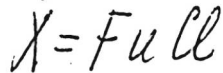
133:272279 On the Structure and Stability of Gas-Phase Cluster Ions $\text{SiF}_3+(\text{CO})_n$, $\text{SiF}_3\text{OH}_2+(\text{SiF}_4)_n$, $\text{SiF}_4\text{H}+(\text{SiF}_4)_n$, and $\text{F}-(\text{SiF}_4)_n$. Hiraoka, Kenzo; Nasu, Masayuki; Minamitsu, Akihito; Shimizu, Akitaka; Yamabe, Shinichi Faculty of Engineering, Yamanashi University Kofu 400- 8511, Japan J. Phys. Chem. A, 104(36), 8353-8359 (English) 2000.

Gas-phase ion/mol. reactions in SiF_4 were measured using a pulsed- electron beam mass spectrometer. The thermochem. stabilities of $\text{SiF}_3+(\text{CO})_n$, $\text{SiF}_3\text{OH}_2+(\text{SiF}_4)_n$, $\text{SiF}_4\text{H}+(\text{SiF}_4)_n$, and $\text{F}-(\text{SiF}_4)_n$ have been studied exptl. and theor. Owing to the serious charging of the ion source, only up to $n = 2$ thermochem. data could be obtained exptl.

The bond energy for SiF_3+CO of 41.6 kcal/mol is found to be much larger than that for CF_3+CO of 16.0 kcal/mol. This indicates that SiF_3+ is a much stronger Lewis acid than CF_3+ . The $\text{SiF}_3+(\text{CO})_2$ cluster has the D_{3h} structure,

$\text{OC} \cdot \text{SiF}_3 \cdot \text{CO}$, which is the core for the larger cluster ions, $[\text{SiF}_3(\text{CO})_2] + (\text{CO})_{n-2}$. In the cluster ion $\text{SiF}_4\text{H} + (\text{SiF}_4)_2$, a C_2 symmetry structure, $(\text{F}_3\text{Si} \cdot \text{F} \cdot \text{H} \cdot \text{SiF}_3)^+$, has been obtained.

In the cluster $\text{F} - (\text{SiF}_4)_2$, the F^- ion is sandwiched by the two SiF_4 mols. equivalently, indicating the charge dispersal in the complex.



(om 41455)

2002

группам.
барьер

Hassan, M. Badawi,
Zaki S. Seddigi,

J. Mol. Struct. (Theochem)
2002, 578, 181-189.