

Si S

Sis

Barrow R.F., Gervous W., 1938

Proc. Roy. Soc., London A, 1938,
169, 45-65

be II-100

~~38.102~~

38.102

(80)

Исходные - разр. грунты Реарка и Гаукоиса (длина 2 км)
 Равнины на зная. расч. от координат. града разреза) Канованем. 3
 Так 3А. Большая кварц. слепящая с диаметрами 2,4-8,5А
 в обл. 2570-3877А и в 1^{ой} и 2^{ой} передних 2,4 м вост. решен
 слепящая по селу Игга (длин. в 1^{ой} и 2^{ой} 7,4 м/м).

Слеп. поглещ. Сильная на слепя. Минимуме
 груда $l=10\text{ см}$, $\varnothing=2,5\text{ см}$ кварц. окис. 1000°C

Сильнейшие каня, красное огуен, обдато
 в 2585-3359А. $\delta' \leq 15$ $\nu'' \geq 20$

У.р.
 Сильная

$$V_k = 35028,8 + (512,0u' - 2,384u'^2 - 0,045u'^3) - (474,5u'' - 2,56u''^2)$$

$$u = \sqrt{u'}/2$$

коэф. гаше близкая у.ф. и видны. шумов полас. (3)

Лин. шум. сен. соф. (у ф. шума).

$$D'' = \frac{(\omega_e - \chi_e \omega_e)^2}{4 \omega_e \chi_e \cdot 8106} \quad \text{Хорошо ука. в}$$

схеме Shaw 1937

$$\delta b = 6,72 \delta b.$$

Авторы принимают $D'' = 6,2 \pm 0,5 \delta b$.

Оценки D' в соф. соф. невозможны, г.к. пред. 3-ий раз для

описания уровня. δ' должно быть меньше $3,37 \delta b$ (Лин. шум)

и значе. выше чем поед.

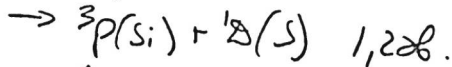
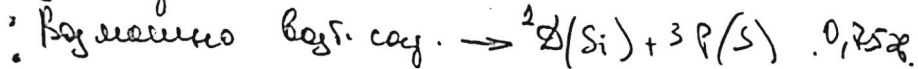
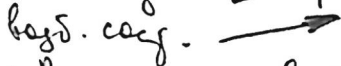
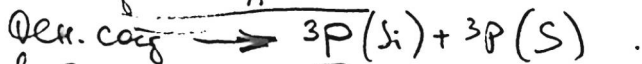
коэф. уровень $G(15) = 0,85 \delta b$.

г.к. $\delta' = 2,1 \pm 0,5 \delta b$.

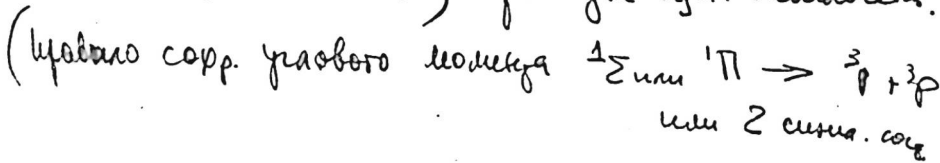
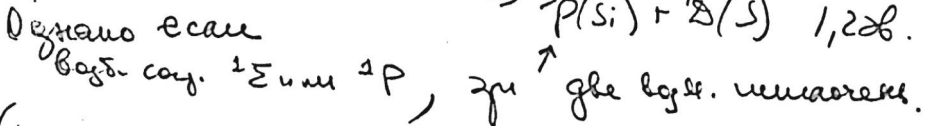
г.к. $\delta' < 2,1$

$$E_A = \nu^{00}/8106 + D^1 - D^4 = 4,32 + (2,1 \pm 0,5) - (6,2 \pm 0,5) = 0,2 \pm 1,0 \text{ эВ} \quad (4)$$

г.е. $E_A \approx 0.$



Означает если



На сеп. сравнения с контрольными
группа моа-1 можно описать след.
серия с $\theta=0$ при λ 3210 и 3370 соотв.

→ да
$$SiSe = 31300 + (350u' - 1,5u'^2) - (550u'' - 1,7u''^2)$$

$$GeSe = 29700 + (250u' - 0,8u'^2) - (390u'' - 1,0u''^2)$$

SS Barrow R.F. 1864

Nabeuse, 1964, 154, 364.

Beit. 107

S: \$
Camp

Burrow R.F.

11946

Proc. Phys. Soc. 65, 606

122-122

Trans. Am. Soc. X-ray

~~122-122~~

OXH
122

S/S
S/S
S/S

Vago E. E., Barrow P.F.,
Wadue, 1946, 157, 77

1946

Be IV - 116
(узел. coords.),



SiS
Cueyp.
SiSe
SiTe

Vago, Barrow. 11946
Brce, Phys. Soc. London
58, 538
JΦ Cuyenne noise
Koracienne. SiS, SiSe,
SiTe.

BeW. 101
46. 43

☒. ✓

mod.	Coef.	ν_e	ω_e	$\chi_{e\omega_e}$	$\gamma_{e\omega_e}$	D_e
SiS	$\bar{E}$	423221	402.3	-1.74	-0.023	1.2
	D	35028.8	512.0	-2.38	-0.045	2.3
	$X(\Sigma)$	0	749.5	-2.56	—	6.6
SiSe	$\bar{E}$	38595.9	308.8	-1.95	-0.032	1.3
	D	32450.3	399.8	-1.93	—	2.0
	$X(\Sigma)$	0	580.0	-1.78	—	6.0
SiTe	$\bar{E}$	33931	242	(-3.63)	(+0.13)	(1.4)
	D	28661.8	338.6	-1.70	—	2.0
	$X(\Sigma)$	0	481.2	-1.30	—	5.6

$\bar{E} \leftrightarrow X$ в нормаль.

$D \leftrightarrow X$ в неустойч. в норм.



1) Срединный хвост

2) Горизонтальная линия 2.4 Å/м

3) Кб. Литров 2.4 Å/м

S: S

Thomas
Oxford

1998

Theses

 $\mathbb{Z} \leftarrow X$

BeW. 105

Кумарасингх Бабо и Баттоу 1998
убеждена на 1.

$$v_e = 41923,5 \text{ cm}^{-1}$$

$$C_w' = 403,54u' - 1,40u'^2 - 0,0329u'^3 - 2,15 \cdot 10^{-5}u'^5$$

$$u = v + 1/2$$

$$\delta \leq 18$$

47.46

SiS

G. Kovera Nuovo
cemento 9, 541-3 (итальян)

1952

Колебательные частоты
2^я атомных молекул.
образ. атомами 4, 5, 6 и 7 групп

см 92.

S.S.
Cueypp

Lagerqvist, Nilheden 1952

Barrow

Proc. Phys. Soc. A 65, 16, 419.

Angular wave S.S. 6 8. 90.

21.11.1952
1.25 A/cm

$\sigma'_{\pi} - \chi' \Sigma^+$ 12 wave

no. 0.0000 σ'_{π} calc: $B'_j = 0.26647 - 0.0021_6 (j' + 1/2)$

$B'_j = [2.91 - 0.05(j' + 1/2)] \cdot 10^{-7}$

$G'_j = 513.1_2 (j' + 1/2)^2 + 2.9_3 (j' + 1/2)^2$

$\nu_e = 35026_3 \text{ cm}^{-1}$

$\lambda_e = 2858_3 \text{ Å}$

OKH
1952

$$B_j'' = 0.30363 - 0.00149 (V'' + 1/2)$$

$$D_j'' = [2.015 - 0.01 (V'' + 1/2)] \cdot 10^{-7} \text{ (Barrow 1946)}$$

$$\omega_e'' = 249.69 \quad \omega_e' = 513.12$$

$$x_e'' \omega_e'' = 2.58 \quad x_e' \omega_e' = 2.93 \quad \nu_e = 35026.86$$

$$e^3 \Sigma^+ : \omega_e \geq 415 \quad x_e \omega_e \geq 1.9$$

$$f : \omega \sim 450 \text{ cm}^{-1}$$

Экспериментальная
уровней Е сдвигания и
уменьшения, что $x_e' \delta''$ и Е сдвигания



Упрощение
номера связи
используя S_2S

$D_0 = 642 \pm 9$
 $S_2(3P) + S(3P)$

SiS'

Langer Nist A., Nilhden B., Barrow R.C. 1952

Proc. Phys. Soc. A65, 419, 1952

Выводы у.р. смеси SiS (D-хлорид)

Проведен вращ. анализ смеси полев
в π - χ^2 молекулы SiS в с.у.р.

Анализировано 12 полев (7,1) (6,0) (6,1)
(5,0) (5,1) (4,0) (4,1) (3,0) (2,0) (1,0) (1,1) и (0,0)



Beitrag 102

В состоянии $D^1\Pi$:

$$B_2' = 0,26647 - 0,00216(J'+1/2); D_1' = [2,91 - 0,03(J'+1/2)] \cdot 10^{-4};$$
$$F_2' = 513,12(J'+1/2) - 2,93(J'+1/2)^2;$$

$$\nu_2 = 35026,86 \text{ см}^{-1} \quad \tau' = 2,058 \text{ пс}.$$

Наблюдения возбуждения вызванные $^3\Sigma^+$ соот.
и соот. $^1\Pi$ или $^1\Delta$. Возбуждения аксадины
возм. чужеродны в смеси СО. Проводим
эксперимент между дифракционными слоями
групп 24 и 25.

SiS

1390 - 5863 - IV

Robinson S.Y.G., Barrow R.F. Pr.Ph.S. 1954, 67, 95

E-X System of SiS in Emission
and the Do (SiS)

Ученые обнаружили линии в $v' = 28$
и в $v'' = 28$ в спектре звезды
в направлении SiCl₄ + CS₂. Температура
составляет около 52000 K



Найден Do (SiS) = $147_{11} \pm 3,0 \text{ K}$

В.В. 103

во хорошо сохранены с гемматом Lagerqvist, a
(Pz. Pls, 1952 A, 65, 119)

g

SiS

Vareshni Y.P.,
Majumdar K.

1955

Секундомер. посто-
янное дел-е.

(см. SiO) III



SiS'
сущр

G. Nilheden

[P 90-5862-IV]

1. 1956

Ark. f. Fysik Band 10, Nr 2, 1956,
ср. 19.

Возмущена в бачной у-г.
суща (А-х) SiS.

$D^{11} - X^1 \Sigma^+$ Аннотировано 8
кварт поле. и вновь проан.
9 поле.

5862

Зеркало

Матричные элементы связаны со
взаимор. с $3\Sigma^-$, 1Π или 1Δ и $1\Sigma^-$ состояниями.

Для $3\Sigma^-$ соэф. $B_{e+J} = 0.2216 - 0.0025J$
 $\omega_e' \approx 407.2$ $\omega_e x_e' = 1.77$

Для 1Π или 1Δ : $B_{v'} = 0.2269 - 0.0028(v' + 1/2)$
 $\omega_e' = 439.9$ $x_e \omega_e' = 3.97$

Для $1\Sigma^-$ соэф. $B_{e+J} = 0.2133 - 0.0018J$
 $\omega_e' \approx 404.9$ $\omega_e x_e' = 1.18$

Для $1\Sigma^+$: $B_{v'} = 0.26647 - 0.00216(v' + 1/2)$

Sis

Omaha 3171 1957

G. Herzberg.

Mem. Soc. Roy. Sci. Liege
1957, 18, 397-418

(No)

1961

11-1985-065

20Б120. Анализ вращательной структуры системы полос $E-X$ моносulfида кремния. Barrow R. F., Deutsch J. L., Lagerqvist A., Westerlund B. Rotational analysis of the $E-X$ system of silicon monosulphide. «Proc. Phys. Soc.», 1961, 78, № 6, Part 2, 1307—1309 (англ.).—Произведен анализ вращательной структуры двадцати полос системы $E-X$, лежащей в УФ-области. Все полосы имеют простую структуру, состоящую из R - и P -ветвей, не было замечено никаких возмущений. Появление системы полос вызвано переходом $^1\Sigma^+ - ^1\Sigma^+$. Определены вращательные постоянные для состояния $E'\Sigma^+$, $T_0 = 41743,8_6 \text{ см}^{-1}$, $G_v = 406,8_3(v + 1/2) - 1,95_2(v + 1/2)^2$, $B_v = 0,2213_7 - 0,0013_9(v + 1/2) - 1,7_5 \cdot 10^{-5}(v + 1/2)^2$ для $0 \leq v \leq 7$. Авторы считают вероятным, что состояние E есть состояние $^1\Sigma^+$ конфигурации $\pi^3\sigma^2\pi^*$, аналогичное состоянию $B^1\Sigma_u^+$ изоэлектронной молекулы P_2 . И. Милевская

SiS

крас. и
брыз. нел.

Beit. 106



х. 1962. (20.

SiS

$E^+ \Sigma^+ - X^+ \Sigma^+$

Bqp - 5861-IV

Barrow R.F., Deutsch J.L., 1961

Lagerqvist A., Westerlund B.

Proc. Phys. Soc. 78, N505, 1307

Анализ вращательной структуры спектров
 $E-X$ переходов SiS

Эксперимент не обнаружил, что
спектр имеет сложную структуру, зависящую от
анализа вращательных переходов
в спектре и Оссерфорд.

Барков

Выводим аналог 20 волн, переход $1^1\Sigma^+ - 1^1\Sigma^+$
 Константы $T_0 = 41743,49$, $B_v = 0,22137 - 0,0013(v+1/2) -$
 $- 1,75 \cdot 10^{-5}(v+1/2)^2$, $\omega_c = 406,83$, $\omega_{ex} = 1,952$ см⁻¹
 Принимаем $G_v'' = 749,69(v+1/2) - 2,58(v+1/2)^2$,
 $B_v'' = 0,30363 - 0,00149(v+1/2)$ и $D' = 2,6 \cdot 10^{-7}$.

Дано сравнение T_0 , ω/ω_x и B/B_x газ
 ртуть с соответствующим CO и SiS. Сравнив соответ-
 ствующие волновые $E^1\Sigma^+$ возбужденных конфигура-
 ций $\sigma^2\pi^3\pi^*$. Предполагая, что соответствующие
 $E^1\Sigma$ и $D^1\Pi$ у SiS (●) аналогичны соответствующим
 $B^1\Sigma_u$ и $A^1\Pi$ у P_2 .

Анализ гр. 4 гр. E-X см. анализ. Сумма. Р и R в гр. 4. Водородный

Поэтому показывая, что сущ. $E^1 \Sigma^+$ возникает из комбинации $\dots \delta^3 \kappa^3 \kappa^*$. Возможно сущ. $E(\delta^1 \delta^1)$ аналогично

Взято $B' \Sigma_u^+$ 43021. Атом-ы Р.

Иса. си. пош. в вездѣх. адт. с Таврск.
данное изъи пошлени. пошлени одкаруши

- записуем. переход ${}^3P - X'\Sigma$.

В шлудре СО нег сасг. акаашитского
до не ява. сбиринса до ро, зодт
Сасг. СО и SiS разлорны.

Есуг-дзс, однако
судај, зр' минимално

SiS

1961

Rotational analysis of the E-X system of silicon monosulfide. R. F. Barrow, J. L. Deutsch, A. Lagerqvist, and B. Westerlund (Univ. Oxford, Engl.). *Proc. Phys. Soc.* (London) 78, 1307-9(1961). The rotational analysis of twenty bands of the E-X system of SiS was carried out. The system arises from a transition $^1\Sigma^+ - ^1\Sigma^+$, and, unexpectedly, no perturbations have been detected in $E^1\Sigma^+$. Consts. (in cm^{-1}) for the state $E^1\Sigma^+$, valid for $0 \leq v \leq 7$ are as follows: $T_0 = 41,743.8$, $G_v = 406.8(v + 1/2) - 1.95(v + 1/2)^2$, $B_v = 0.2213 - 0.0013(v + 1/2) - 1.7 \times 10^{-5}(v + 1/2)^2$. It seems probable that the state E is the $^1\Sigma^+$ state arising from the configuration $\dots\pi^3\sigma^2\pi^*$, analogous to the state $B^1\Sigma^+_u$ of the isoelectronic mol., P_2 . CA

C.A. 1962. 57. 1
282 fg

Si S

Drowart y.

Ommen

Do

(81)

522, ~ 1963-642).

SiS

B92 - M 851 - IV

1968

3 Д359. Микроволновый вращательный спектр молекулы SiS. Hoeft J. Das Mikrowellenrotationsspektrum des SiS. «Z. Naturforsch.», 1965, 20a, № 10, 1327—1329 (нем.)

При т-рах 700—730° С в областях частот 17,5—18,2 и 35,3—36,4 ГГц наблюдается 12 линий вращательных переходов $J=0 \rightarrow 1$ и $1 \rightarrow 2$ молекулы SiS. Для 4 изотопич. комбинаций молекулы найдены вращательные константы ($B_0=9030,3$, $B_e=9102,6$ и $\alpha_e=44,7$ МГц), межъядерные расстояния ($r_e=1,929322$ Å) и соотношения масс изотопов S и Si.

и. - в.
вращат.
спектр

SiS

ф. 1966. 370

1965

SiS
MB

Microwave spectrum of SiS. J. Hoeft (Freie Univ., Berlin). *Z. Naturforsch.* 20a(10), 1327-9(1965)(Ger). The rotation transitions $J = 0 \rightarrow 1$ and $J = 1 \rightarrow 2$ of SiS have been observed, 700-730°. Twelve lines have been measured of these transitions in the frequency ranges 17.5-18.2 and 35.3-36.4 Gc. The rotation consts. of the 4 most abundant isotope combination, the nuclear distances, and mass ratios of the isotopes of S and Si are given.

F. Schossberger

B90 - M851 - IV

C.A. 1966. 64.4
4468 ef

1965

IN 1184 - IV - BP

Do, J. Chem. Phys. (CS, SiS, SiO, GeO, SnS, SnO, PbS, PbO)
1965, 43, N 10, Part. I, 3570-3574

Nair K.P.R., Singh Ran B., Rai D.K.

J. Chem. Phys., 1965, 43, N 10, Part. I,

Potential-energies curve and disso-
ciation of oxydes and sulfides of Group
IV A elements

J

F

PX., 1966, 17627

Sis

BQ - A 1158

1968

Empedocles P.

cu. n. cem.

Thor. chim Acta 1968, 10(4)

33-1-6

SiS

Генч Р.

1968

Spectrochim. Acta, A24,
N 3, 259.

Приведенные наименования
и их привязки для основных
соединений BeF, Cs, SiN, P₂,
SiS и C₆₀. (см. BeF) III

SiS

Вф-1624-XIV

1969

2 Д406. Электрический дипольный момент и микроволновый вращательный спектр SiS. Hoefl J., Lovas F. J., Tiemann E., Törring T. Elektrisches Dipolmoment und Mikrowellenrotationsspektrum von SiS. «Z. Naturforsch.», 1969, 24a, № 9, 1422—1423 (нем.; рез. англ.)

дип. момент
м.в. - вращ.
момент

Из измерений эффекта Штарка на чисто вращательных переходах молекулы $\text{Si}^{28}\text{S}^{32}$ в основном колебательном состоянии установлена величина электрич. дипольного момента $\mu_0 = 1,73 \pm 0,06$ ед. Дебая. Определены вращательные постоянные и коэф. Данхема Y_{01} , Y_{11} , Y_{21} и Y_{02} .

9. 1970. 28

SiS

Bp - 1624 - XIV

1969

118126q Electrical dipole moment and microwave rotational spectrum of silicon sulfide. Hoeft, J.; Lovas, F. J.; Tiemann, E.; Toerring, Thomas (Freie Univ. Berlin, Berlin, Ger.). *Z. Naturforsch. A* 1969, 24(9), 1422-3 (Ger). The Stark component $J, |M| = 0, 0 \rightarrow 1, 1$ of the vibrational ground state of $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$ was measured. Potentials between 540 and 720 v. produced line shifts of 0.54 to 1.05 MHz. relative to the unperturbed transition. The elec. dipole moment was 1.73 D. Line frequencies of the rotational transitions $0 \rightarrow 1, 1 \rightarrow 2$, and $2 \rightarrow 3$ with $v = 0, 1, 2, 3, 4$ were measured at 660° and are closer to calcd. values than line frequencies measured by J. Hoeft (1965) as a result of higher resolu. and greater instrumental sensitivity. Rotational consts. Y_{01}, Y_{11}, Y_{21} , and Y_{02} were 9099.5294, -44.1587, -0.0031, and -0.00549, resp. FBIG

copy, not

H. B. Cline

C. A.

SiS

Murty A. W.
Curl R. F.

1969

gun.
mallet

J. Molec. Spectrosc.
1969, 30, No. 1, 102-110



(Gen. P&S) IV

Sis

Крестовое
попечен.
железны

III

1262

890

Szoke S. et al.

1970

Acta Chim. (Buda-
pest), 63 (1), 59.

(ср. ср) III

Sis

BQ-5915-VIII

1971

Larrow R.F., Caroline C.,

Adv. High Sch. Chem. Vol. 4

1971, 161-170.

(ex. HS; III)

SiS

1972

64580g Isotopic effects in the rotational spectrum of silicon sulfide [SiS]. Tiemann, E.; Renwanz, E.; Hoefft, J.; Toerring, T. (Inst. Molekuelphys., Freie Univ. Berlin, Berlin, Ger.). *Z. Naturforsch. A* 1972, 27(11), 1566-70 (Ger). The Dunham, adiabatic, and nonadiabatic corrections for the rotational const. Y_{01} , due to higher order isotopic effects in the Born-Oppenheimer approxn. were derived. From these and measurements of the rotational spectrum $\Delta J = +1$, $\Delta \nu = 0$ for the isotopic combinations, the signs of the elec. dipole moment and of the mol. g_J value were detd. to be pos. and neg., resp. The rotational const. of $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$ is $B_e = 9100.078(28)$ MHz and the equil. nuclear distance for all isotopic combinations $R_e = 1.929254(3) \pm 0.000020$ Å. The adiabatic correction is of the magnitude 10^{-5} .

(m.h.)

C.A. 1973. 78 v10

1972

SiS

5 Д443. Изотопический эффект во вращательном спектре молекулы SiS. Tiemann E., Renwanz E., Hoeft J., Törring T. Isotopiceffekte im Rotationsspektrum des SiS. «Z. Naturforsch.», 1972, 27a, № 11, 1566—1570 (нем.; рез. англ.)

(м.п.)

В диапазоне 17—54 ГГц исследованы микроволн. спектры четырех изотопич. разновидностей молекулы SiS в их естественном содержании. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J=0-1$, $1-2$ и $2-3$ в основном и некоторых низких возбужденных колебательных состояниях. Определены значения спектроскопич. постоянных Y_{01} , Y_{11} , Y_{21} и Y_{02} . Из полученных значений Y_{01} по ф-лам, учитывающим отклонения от приближения Борна — Оппенгеймера, оценено значение вращательного g -фактора ($g_J = -0,0923$ для $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$). Установлен знак дипольного момента ($+\text{SiS}-$) по величине g_J . Вычислены значения первых четырех коэф. Данхема a_i и равновесное межъядерное расстояние (1,929254 Å).

М. Р. Алиев

ф. 1973 № 5

SiS

1972.

10 Б246. Изотопный эффект во вращательном спектре SiS. Tiemann E., Renwanz E., Hoeft J., Törring T. Isotopieeffekte im Rotationsspektrum des SiS. «Z. Naturforsch.», 1972, 27a, № 11, 1566—1570 (нем., рез. англ.)

(м.н.)
Получен вращательный спектр четырех изотопных молекул SiS (переходы 0—1, 1—2, 2—3; $v=0, 1, 2, 3, 4$). Определен дипольный момент: $D(v=0)=1,73$ D. Детальным исследованием изотопного эффекта во вращательной постоянной V_0 установлено положит. направление дипольного момента ($+SiS^-$) и определены поправки к приближению Борна — Оппенгеймера. Д. И. К.

X. 1973. № 10

Sis

1973

Дектр.Empoerue

Forkins Peter G.

Nov. Town. chin. 1973, 18, 18, 1289-1294.

● (cu. CO; III)

SiS

1973

Torrington Thoms.
J. Mol. Spektrosk.
1973, 48, 148-156.

crenna

● (cm. BaO; III)

SiS

bcp - 1 - $\bar{x}$

1974.

Anderson A.B., Hoffman R.,

J. Chem. Phys., 1974, 60, 4271-3

номены. Кривые

N II,

(cur. LiF; III)

SiS

1974

M. N.

Lovas F.J., et al.
J. Phys. and Chem. Ref. Data,
1974, 3, 609-769.

(see BaO; u)

SiS

*4-9754

1975

1 Д386. Идентификация неотнесенной электронной системы радикала SiS. Bredohl H., Cornet R., Dubois I., Wildéria D. Identification of a non-assigned electronic system of the SiS radical. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1975, 8, № 11, L259—L261 (англ.)

Исследован эмиссионный спектр радикала SiS, образованного в микроволн. разряде через смесь SiH₄ (или SiCl₄), He и паров серы. Идентифицирована колебательно-вращательная структура системы полос электронного перехода $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ в области 1970—2600 Å. Показано, что неидентифицированные полосы Барроу—Джеванса относятся к длинноволн. переходам системы $E - X$. Определены значения молекулярных констант для состояний E и X : $T_e = 41915,8$; $\omega_e' = 405,6$; $\omega_e X_e' = 1,60$; $\omega_e'' = 749,64$; $\omega_e'' X_e'' = 2,577$ см⁻¹,
М. Р. Алиев

Ф 1976 N 1

SiS

* 45 - 9754

1975

m.n.

 $E'\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$

39278d Identification of a nonassigned electronic system of the silicon monosulfide radical. Bredohl, H.; Cornet, R.; Dubois, I.; Wilderia, D. (Inst. Astrophys., Univ. Liege, Cointe-Ougree, Belg.). *J. Phys. B* 1975, 8(11), L259-L261 (Eng). In 1938 a band system was obsd. by R. F. Barrow and W. Jevons and assigned by them to the SiS radical, but the nature of the 2 electronic states involved remained unknown. Using high resolution spectra, it was possible to show that these bands represent the longer wavelength end of a well known system of SiS: the $E'\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ transition.

C.A. 1975. 83 N16

SiS

1975

2 Д158. Кривая потенциальной энергии РКРВ, факторы Франка — Кондона и r -центроиды для системы полос $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ молекулы SiS. Katti P. H., Kogwar V. M. RKR potential energy curve, Franck — Condon factors and r -centroids for $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ system of SiS molecule. «Acta phys. Acad. sci. hung.», 1975, 39, № 3, 145—148 (англ.)

Методом Ридберга — Клейна — Риса — Вандерслайна по эксперим. данным для спектроскопич. постоянных вычислена ф-ция потенц. энергии для электронного состояния $E^1\Sigma^+$ молекулы SiS, которая использована при вычислении факторов Франка — Кондона и r -центроид для системы полос перехода $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ с $v, v'' \leq 5$. Вычисленные факторы Франка — Кондона дают правильное распределение интенсивности наблюдаемых полос.

М. Р. Алиев

потенц.
энергия
fin;

р. 1977. N2

SiS

1975

J 85: 84839w R-K-R-V potential energy curve, Franck-Condon factors and r -centroids for $E^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ system of silicon monosulfide molecule. Katti, P. H.; Korwar, V. M. (Dep. Phys., Karnatak Univ., Dharwar, India). *Acta Phys. Acad. Sci. Hung.* 1975, 39(3), 145-8. (Eng). The potential energy curve for the $E^1\Sigma^+$ state of SiS mol. was evaluated by the R-K-R-V method. The Franck-Condon factors are computed by Fraser and Jarman's method with r_c -shift corrections. r -Centroids were detd. by both quadratic equation method and graphical method as suggested by Nicholls and Jarman. The intensity distribution in the band system under consideration is explained on the basis of F-C factors. Calcn. of r -centroids shows that the sequence difference i.e. $\Delta r = \bar{r}_{v',v''} - \bar{r}_{v'+1,v''+1}$ remains const.

к р у б а л
н о м е н т
з а п р у к а

⊗ (+1) SiS (fun)
C.A. 1976 85 N12 ⊗

Bi-S

Q75 4824

1975

Kerr J. A., et al.

(Do)

Handbook Chem Phys,
55th Ed., 1974-75.

Si, S'

1976

Бондаренко К. В. и др.

рук. геол. в ВУНУТ
№ 3687 - 76 ДЕН.

(расчет
эл. сур.
вонк. у-гил)

(сис. Вет) III

SiS

* U-14201

1976

3 ? 1
a Π - $X\Sigma$

86: 23789d The a $^3\Pi_u$ - $x^1\Sigma^+$ transition of silicon monosulfide. Bredohl, H.; Cornet, R.; Dubois, I. (Inst. Astrophys., Univ. Liege, Cointe-Ougree, Belg.). *J. Phys. B* 1976, 9(8), 1207-1209 (Eng). The a $^3\Pi_r(\Omega = 1)$ - $x^1\Sigma^+$ transition of SiS was obsd. in emission by high-resolution photog. at 3000-4100 Å. A v^* progression ($v = 0$ assumed) of 5 bands was obsd. and the 0-6 bands were analyzed to give the rotational const. for the $v = 0$ level of the $^3\Pi_r$ state. The position of the $^3\Pi_r(\Omega = 1)$ state relative to the ground state ($v=0$) was calcd. SiS was prepd. by microwave discharge through a He-SiCl₄ mixt. flowing over S.

C.H. 1977. 86 N4

SiS

* G-14201

1976

1 Б148. Переход $a^3\Pi_r - X^1\Sigma^+$ SiS. Bredohl H., Cornet R., Dubois I. The $a^3\Pi_r - X^1\Sigma^+$ transition of SiS. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1976, 9, № 8, 1207—1209 (англ.)

С высоким разрешением измерен спектр испускания молекулы SiS в области 3000—4100 Å. Спектр возбуждали МВ разрядом при пропускании смеси паров SiCl₄ с гелием над расплавленной серой. Обнаружена прогрессия из пяти полос отнесенная к спин-запрещенному переходу $a^3\Pi_r (\Omega=1) - X^1\Sigma^+ (v'=0, v''=2-6)$ SiS. Выполнен анализ вращательной структуры для полосы 0—6. С учетом известных значений B_e'' , α_e'' и γ_e'' рассчитаны $B_0'=0,28180 \text{ см}^{-1}$ и $\nu_{00}=29865 \text{ см}^{-1}$.
В. М. Ковба

М.Н.

α. 1977 №1

SiS

* 13-14201

1976

1 Д361. Переход $a^3\Pi_r - x^1\Sigma^+$ в SiS. Bredohl H., Cornet R., Dubois I. The $a^3\Pi_r - x^1\Sigma^+$ transition of SiS. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1976, 9, № 8, 1207—1209 (англ.)

(м.н.)
Спектр испускания молекулы SiS в области 3000—4100 Å сфотографирован в 1-м порядке 6,65-м спектрографа Иглы с обратной дисперсией 1,16 Å/мм. В спектре обнаружена прогрессия из пяти полос $0 - v''$, принадлежащая запрещенному спиновым правилом отбора переходу $a^3\Pi_r (\Omega=1) - x^1\Sigma^+$. Переход аналогичен недавно обнаруженным в изовалентных молекулах SiO и SiSe. В результате анализа полосы $0-6$ определены вращательные постоянные состояния $a^3\Pi_r, v'=0$ молекулы SiS. Рассчитано взаимное расположение состояний $a^3\Pi_r - x^1\Sigma^+$ ($\nu_{00}=29\,865\text{ см}^{-1}$). Библ. 12.



Р. 1977. № 1

Si S

Lakshman S. V. J. 1976

потенц.
кристаллы
(до)

" Pramanā 1976, 7 (6)
369-77 (eng)

(см SiO₂; III)

SiS

49-17513

1976

7 Д515. Микроволновые спектры молекул, представляющих астрофизический интерес. XI. Сульфид кремния. Tieman Eberhard. Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XI. Silicon sulfide. «J. Phys. and Chem. Ref. Data», 1976, 5, № 4, 1147—1156 (англ.)

Представлены наблюдаемые и вычисленные вращательные переходы для всех измеренных изотопов сульфид кремния: $^{23}\text{Si}^{32}\text{S}$, $^{29}\text{Si}^{32}\text{S}$, $^{30}\text{Si}^{32}\text{S}$, $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$, $^{28}\text{Si}^{33}\text{S}$. Для $^{28}\text{Si}^{33}\text{S}$ приведена квадрупольная сверхтонкая структура. Спектры обрабатывались методом наименьших квадратов для получения вращательных постоянных. Приведены следующие молекулярные данные: вращательные постоянные, электрический дипольный мо-



М. П.

07.58-85.70
39-111-68

Ф. 1972. № 2

мент и постоянная сверхтонкой структуры. Измерения проводились методами микроволн. спектроскопии в лабор. условиях. Представленные данные анализировались для предсказания вращательных переходов основного колебательного состояния до 300 Ггц, что более чем достаточно покрывает частотный диапазон радиотелескопов. Вычислены частоты переходов в возбужденные колебательные состояния из представленных вращательных постоянных. Вычисления ограничены переходами, для которых относит. интенсивность больше чем 0,05. Предсказанные частоты переходов даны с неопределенностью, представляющей 90%-ный доверительный предел.

В. В. Строгонов

#4-17513

1976

SiS

of 58-111-85-40
m.m
BB-XIV-85-68

14 Б239. Микроволновые спектры молекул, представляющих астрофизический интерес. XI. Сульфид кремния. Tiemann Eberhard. Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XI. Silicon sulfide. «J. Phys. and Chem. Ref. Data», 1976, 5, № 4, 1147—1156 (англ.)

Проведен крит. анализ имеющихся данных по вращательным спектрам моносulfида кремния. Приведены значения электрич. дипольного момента, постоянной сверхтонкого взаимодействия и вращательных постоянных молекул $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$, $^{29}\text{Si}^{32}\text{S}$, $^{30}\text{Si}^{32}\text{S}$, $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$, $^{28}\text{Si}^{33}\text{S}$. Табулированы рассчитанные частоты вращательных переходов с энергией до 300 гГц указанных изотопозамещенных молекул сульфида кремния в основном и возбужденных колебательных состояниях. Даны также эксперим. данные по частотам вращательных переходов и энергиям верхних колебательно-вращательных состояний. Сообщ. X. см. РЖХим, 1977, 1Б274.

В. М. Ковба

X. 1977. №14

Sips

BP-4-17513
BP-XIV-8570

1976

86: 62771m Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XI. Silicon sulfide. Tiemann, Eberhard (Inst. Molekuelphys., Freie Univ. Berlin, Berlin, Ger.). J. Phys. Chem. Ref. Data 1976, 5(4), 1147-56 (Eng). The available data on the microwave spectrum of silicon sulfide are critically reviewed for information applicable to radio astronomy with 11 refs.

u-b.
cncuip.

c. A. 1977. 86. N16

Si S

1977

Asthana B.P. et al

Acta Phys. Pol. A, 452(5),
729-36 (Eng.)

(De)

coll. CS - III

SiS

оттиски 5758

1977

3 Б226. Инфракрасный спектр PN и SiS изолированных в матрице. Atkins Robert M., Timms Peter L. The matrix infrared spectrum of PN and SiS. «Spectrochim. acta», 1977, A 33, № 9, 853—857 (англ.)

Измерены ИК-спектры моонитрида фосфора и моносulfида кремния изолированных в криптоновой матрице ($T=10-50^{\circ}\text{K}$, разбавление 1:500 и 1:1000, соотв.). Молекулы PN получали при испарении P_3N_5 ($800-900^{\circ}$), молекулы SiS — при прохождении паров сероуглерода над нагретым (1000°) кремнием. В спектре PN наблюдается полоса 1323 см^{-1} , исчезающая после нагревания матрицы до 35°K , при этом появляются полосы 1137 и 718 см^{-1} , интенсивность к-рых остается постоянной вплоть до t -ры 50°K , соотв-щей началу испарения матрицы. В спектре изотопозамещенного образца ($50\% \text{ }^{15}\text{N}$) наблюдаются полосы 1323 и 1295 см^{-1} (P^{15}N), а после нагрева матрицы — полосы 1137 , 1127 , 1117 , 1107 см^{-1} (отношение интенсивностей $5:3:3:5$) и полосы 720 ,

И. М. М.

Ⓢ Ⓢ

Х. 1978 №3

718, 714, 710 см^{-1} . Полосы, появляющиеся при отжиге матрицы, отнесены на основании анализа изотопных сдвигов к тримеру P_3N_3 . Предполагается, что отсутствие полос димера может быть связано с более высокой энергией активации для процесса димеризации. В спектре моносulfида кремния наблюдается интенсивная полоса 736,0 см^{-1} ($^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$), слабые полосы 729,5 см^{-1} ($^{29}\text{Si}^{32}\text{S}$), 726 см^{-1} ($^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$), 723 см^{-1} ($^{30}\text{Si}^{32}\text{S}$) и полосы (500 и 456 см^{-1}), отнесенные к колебаниям $\nu(B_{2u})$ и $\nu(B_{3u})$ циклич. димера. При отжиге матрицы интенсивность всех перечисленных полос уменьшается, однако новые полосы в спектре не появляются. Присутствие полос димерных молекул до отжига объясняют либо наличием их в газовой фазе, либо образованием из мономерных молекул в процессе напыления матрицы. Каких либо доказательств, свидетельствующих о димеризации SiS за счет диффузии в матрице ниже 40° К, не обнаружено. Полученные значения частот колебаний SiS, Si_2S_2 , силовые постоянные связи этих молекул и величина SSiS сопоставляются с данными по моносulfидам германия, олова и свинца.

В. М. Ковба

SiS

Боженко К. В. 1977

"Ж. структ. химии",
1977, 18, № 2, 285-288.

божн.
физм

III
(см. Вет⁴)

SiS

O₂

1944

88: 43371f Parity nonconservation effects in electron spectra of molecules. Labzovskii, L. N. (Leningr. Gos. Univ., Leningrad, USSR). *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 1977, 73(5), 1623-33

(Russ). Parity nonconservation effects are considered for forbidden magnetic transitions in diat. mols. and in particular for the exptl. well studied atm. absorption bands of O₂ $b^1\Sigma_g^+ \leftarrow X^3\Sigma_g^-$. The degree of circular polarization in this transition due to weak electron-electron neutral currents should be of the order of 10^{-9} . Possible expts. with solar light or lasers are discussed. The magnitude of the effect becomes appreciable in the radiation from diat. mols. involving transitions between Π and Σ states with allowance for Λ -doubling. In particular, the degree of circular polarization in the forbidden transition $a^3\Pi_2 \rightarrow X^1\Sigma^+$ in the SiS mol. may reach unity, providing the Λ -doublet ($\Delta E \sim 10$ Hz) is resolved, and is $\sim 10^{-4}$ if the doublet is not resolved.

секрет.
члени

(+) $\boxtimes$

C.A. 1948, 88, 16

SiS

1977

4 Д148. Вычисление факторов Франка—Кондона и r -центроид для перехода $D^1\Pi-X^1\Sigma^+$ молекулы SiS с использованием потенциала РКРВ. Mummigatti V. M., Jyoti B. G. Franck—Condon factors and r -centroids for the ($D_1\Pi-X_1\Sigma^+$) transition of SiS molecule using R-K-R-V potential. «Phys. Lett.», 1977, A63, № 2, 88—90 (англ.)

По эксперим. данным для спектроскопич. постоянных построены потенц. кривые Ридберга—Клейна—Риса—Вандерслайса для электронных состояний $D^1\Pi$ и $X^1\Sigma^+$ молекулы SiS. Полученные потенциалы использованы для расчета факторов Франка—Кондона и r -центроид переходов $D^1\Pi-X^1\Sigma^+$ с $v' \leq 7$, $v'' \leq 15$. Вычисленные факторы Франка—Кондона удовлетворительно описывают распределение интенсивности колебательной структуры системы $D-X$ SiS.

М. Р. Алиев

получено,
правильно

Ф. № 1978

SiS

Ryabov M. A.

1977

Zh. Fiz. Khim 1977, 51/3)

470 (russ)

кб. мес.

присет

дипломат.

супружн.



(см BeF, III)

Si^①

ammuc 7755

1978

Si S

CS

CO

Nagy-Melsohuki E. et al.

J. Chem. Soc. Faraday Trans.,
1978, Part 2, v 12, 2204-2209.

кв. мех.
парем



кв. CS; $\overline{12}$)

SiS

[ommu 7755]

1978

Nagy-Felsobuki, G. L. et al.

no. 1111,
1978,
75

J. Chem. Soc. Soc. Faraday
Trans. 2. 1978, 74(12)
2204-9

cur. 10 - 11

Si 5

1979

Бонсенко К. В.
Автореферат
Диссертации на соиск.

кв. мех.
расчет

ученой степени к т. н.
М., ЦОИХ, 1979

теоретическое исследование
вакциновых состояний амёб
в мифр. ● манкулах
методом Харрис-Фогса - Рутана.

Si 5x [цитируется] 1979

Торш А.З., Воленико Т.Н.

группы
спектров. Изв. АН СССР. Неорг. мат.,
1979, 15 (9), 1521-23.

идентификации продуктов
взаимодействия Si с
полисило рентг. группами,
спектральными.

SiS

~~Number~~ 8901

1979

Ohwada K.

Chem. Ref.

Spectrochim. acta;
1979, A35, I353-57

SiS

omnua 8511

1979.

Harris S.M., Barrow R.F.
et al.

2 (unpublished)

Interactions between the
excited electronic states of SiS.



SiS

Gingerich K. A.,

1980

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

Do; North-Holland Publishing
Company, 1980.

(есть отклик в коробке отклик-
ков Gingerich).

SiS

оттиск 10530

1980

м.н.

4 Д482. Изучение изотопических сдвигов систем $E-X$ и $D-X$ молекулы SiS. Isotope shift studies of the $E-X$ and $D-X$ systems of the SiS molecule. Gopal Sheila, Lakshminarayana G., Narasimham N. A. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1980, 13, № 19, 3781—3782 (англ.)

Для изотопомеров $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$ и $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$ получены полосы в ультрафиолетовой (2100—2600 Å) и в видимой (3500—6200 Å) частях спектра испускания. Сравнение расчетных и наблюдаемых изотопических сдвигов полос подтверждает колебательное отнесение спектра, сделанное ранее, а также показывает, что обе части спектра относятся к электронному переходу $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ молекулы SiS. Проведено также колебательное отнесение полос в области 2500—3900 Å системы $D^1\Pi - X^1\Sigma^+$. А. Дементьев

Ф. 1981 № 4

SiS

спектр
Шенгук.

2.1981.16

1980
6 Б147. Исследование изотопного сдвига в системах E—X и D—X молекулы SiS. Gopal Sheila, Lakshminarayana G., Narasimham N. A. Isotope shift studies of the E—X and D—X systems of the SiS molecule. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1980, 13, № 19, 3781—3782 (англ.)

Измерены спектры испускания изотопных модификаций $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$ и $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$ в области 1970—2600 Å и 3500—6200 Å. Спектры возбуждали МВ-разрядом (2450 МГц) в изолированной разрядной трубке, содержащей металлический кремний, ^{32}S или ^{34}S и Ne (2 мм). Измерены изотопные сдвиги по сере для групп полос в указанных областях. По колебательным постоянным, полученным Бредолом и др. («J. Phys. B. Atom. Mol. Phys.», 1975, 8, L259) рассчитаны соотв. значения сдвигов. Измеренные и расчетные изотопные сдвиги находятся в хорошем согласии, что подтверждает предложенное ранее колебательное отнесение и доказывает, что полосы как в УФ-, так и в видимой области принадлежат одной и той же системе $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$. Измерены также изотопные сдвиги полос известной системы D $\Pi - X^1\Sigma^+$ в области 2600—3900 Å и подтвержден проведенный ранее анализ колебательной структуры.

С. Б. Осин

Всичен 10532

SiS

Ommeu 10530

1980

+94:55087c Isotope shift studies of the E-X and D-X systems of the silicon sulfide molecule. Gopal, Sheila; Lakshminarayana, G.; Narasimham, N. A. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400 085 India). *J. Phys. B* 1980, 13(19), 3781-2 (Eng). Isotope shift data of the visible and UV bands of $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$ and $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$ confirm the vibrational assignments suggested by D. M. Thomas (1947) and H. Bredohl et al. (1975). The results show that the bands belong to the $\text{E}^{1}\Sigma^{+} - \text{X}^{1}\Sigma^{+}$ system of SiS. Results at 2500-3900 Å also confirm the vibrational assignments of the $\text{D}^{1}\pi - \text{X}^{1}\Sigma^{+}$ system (Barrow, R. F.; Devons, W., 1938).

M.N.

C.A. 1981, 24, 18

ОГНЕЧ 9149

1980

SiS

GeS

13 Б939. Исследование хемилюминесценции при однократных и многократных столкновениях в реакциях Si—OCS и Ge—OCS. Исследование SiS и GeS $a^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ и SiS $b^3\Pi - X^1\Sigma^+$ интеркомбинационных систем и природы SiS* столкновительного тушения. Green Gary J., Gole James L. Single and multiple collision chemiluminescent studies of the Si—OCS and Ge—OCS reaction. A study of the SiS and GeS $a^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ and SiS $b^3\Pi - X^1\Sigma^+$ intercombination systems and the nature of SiS* collisional quenching. «Chem. Phys.», 1980, 46, № 1—2, 67—85 (англ.)

Исследованы спектры хемилюминесценции в области длин волн 6500—3400 Å, возникающей в области пересечения молек. пучков металлов Si и Ge с—OCS в условиях одно- и многократных столкновений в р-ционной зоне, при т-ре ~1000—2300° K. Обнаружено, что хемилюминесценция для SiS* в области давл., обеспечивающих однократное столкновение, обусловлено радиац. переходами $a^3\Sigma_1^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ и $b^3\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ в электронно-возбужденных молекулах SiS*, возникающих в,

Спектр
Хемилюминесценции

A

(71)

№ 1980 N 13

р-ции $\text{Si} + \text{OCS} \rightarrow \text{SiS} + \text{CO}$; при давл., обеспечивающих многократные столкновения, наблюдается только полоса $a^3\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$. В случае Ge для всех областей давл. зарегистрирована только одна полоса перехода $a^3\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$, связанная с радиац. переходами в GeS^* (р-ция $\text{Ge} + \text{OCS} \rightarrow \text{GeS}^* + \text{CO}$). В спектрах хемилюминесценции идентифицированы электронно-колебательные переходы молекул GeSi и SiS . Из зависимостей интенсивностей хемилюминесценции на частотах различных электронно-колебательных переходов от температуры определения энергии активации образования GeS ($a^3\Sigma^+$) и SiS ($a^3\Sigma^+$ и $b^3\Pi$), к-рые лежат в пределах 4—6 ккал/моль. По эксперим. данным определены энергии диссоциации SiS и GeS в основном состоянии, составляющие $143,7 \pm 1,6$ и $132,2 \pm 1,0$ ккал/моль соотв. Предложены механизмы, объясняющие механизм возникновения хемилюминесценции и зависимость интенсивности хемилюминесценции от давл. в реакционной зоне: обсуждены величины энергии активации образования электронно-возбужденных состояний. Предполагается, что столкновительное тушение SiS ($b^3\Pi$) связано с термализацией атомов Si в реакционной зоне: поскольку р-ция образования SiS ($b^3\Pi$) экзотермична, термализация поступательной энергии Si препятствует процессу образования SiS ($b^3\Pi$).

В. И. Лесин

Оттиск 10041

1980

SiS₂

2 Б1393. Исследование двух новых низших электронных состояний SiS, наблюдаемых в хемилюминесцентном спектре-пламени. Linton C. Examination of two new low-lying electronic states of SiS observed in chemiluminescent flame spectra. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 279—290 (англ.)

Методом оптич. спектроскопии в области 200—650 нм изучен хемилюминесцентный спектр SiC, образующегося в р-ции $\text{Si}(^3P) + \text{OCS}(^1\Sigma) \rightarrow \text{SiS}^* + \text{CO}(^1\Sigma)$. Спектр пламени состоит из двух систем полос (СП). Более интенсивная СП ($\lambda\lambda$ 385—600 нм) характеризуется спадом интенсивности в длинноволновую сторону и имеет прогрессию с $v'=0$ (v' — колебательное квантовое число). Эта СП обусловлена переходом $^3\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$. Менее интенсивная СП ($\lambda\lambda$ 350—400 нм) состоит из коротких последовательностей и самые интенсивные полосы в каждой последовательности образуют короткие прогрессии $v'=0$ и $v''=0$. Каждая полоса имеет два интенсивных

М.Н.

X. 1981 №2

пика и для полос с $v'=0$ слабый третий пик на коротковолновой стороне. Расстояние между интенсивными пиками изменяется с v' и одинаково для полос с одинаковыми v' . Расстояние третьего пика от других одинаково для каждой полосы с $v'=0$. Установлено, что эта СП обусловлена переходом $b\Pi_r \rightarrow X'\Sigma^+$. Предполагается, что особенности структуры этого перехода обусловлены взаимодействием с состояниями $E'\Sigma^+$, $D'\Delta$, $d^3\Delta$. Отмечается, что добавка активного азота в пламя приводит к увеличению интенсивности СП $b \rightarrow X$ относит. $a \rightarrow X$. Рассчитаны нек-рые постоянные состояний $a^3\Sigma^+$ и $b^3\Pi_r$.

Ю. И. Дорофеев

000000 9749

SiS

GeS

D⁰

Chemical

Reaction

(+1) ☒

V92: 171805v Single and multiple collision chemiluminescent studies of the silicon-carbon oxide sulfide and germanium-carbon oxide sulfide reaction. A study of the silicon sulfide (SiS) and germanium sulfide (GeS) $a^3\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ and silicon sulfide (SiS) $b^3\Pi-X^1\Sigma^+$ intercombination systems and the nature of excited silicon sulfide (SiS*) collisional quenching. Green, Gary J.; Gole, James L. (Dep. Chem., Georgia Inst. Technol., Atlanta, GA 30332 USA). *Chem. Phys.* 1980, 46(1-2), 67-85 (Eng). The chemiluminescent emission from SiS and GeS resulting from the reaction of Si and Ge metal with COS was studied under both single and multiple collision conditions. Included in this study is the observation of the SiS and GeS $a^3\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ and SiS $b^3\Pi-X^1\Sigma^+$ intercombination band systems. The temp. dependence of the obsd. single collision spectra is analyzed to deduce the nature of the metal reactant beams and to det. the activation energies for formation of SiS* $a^3\Sigma^+$, SiS* $b^3\Pi$ and GeS* $a^3\Sigma^+$. The significance of the activation energies is discussed. Lower bounds of 143.7 ± 1.6 kcal/mol and 132.2 ± 1.0 kcal/mol are detd. for $D_0^0(\text{SiS})$ and $D_0^0(\text{GeS})$, resp. Multiple collision spectral studies are used to initiate the exploration of collisional quenching.

1980

CA 1980 92 1120

SiS
GeS

оттиски 9149

1980

УДК 6 Д722. Хемилюминесцентное изучение реакций Si—OCS и Ge—OCS в условиях единичных и многократных столкновений. Исследование интеркомбинационных переходов $a^3\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ SiS и GeS; и $b^3\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+ + \text{SiS}$, а также природы столкновительного тушения возбужденных состояний SiS. Single and multiple collision chemiluminescent studies of the Si—OCS and Ge—OCS reaction. A study of the SiS and GeS $a^3\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ and SiS $b^3\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+ + \text{SiS}$ intercombination systems and the nature of SiS* collisional quenching. Green Gary J., Gole James L. «Chem. Phys.», 1980, 46, № 1—2, 67—85 (англ.)

Do; Di
сикстр
Хемилум.

Исследована хемилюминесценция моносulfидов Si и Ge, образующихся в реакциях Si и Ge с сульфидом уг-



(71)

Р 1980 № 6

лерода. Эксперименты проводились в условиях единичных ($p \sim 10^{-4} - 10^{-5}$ мм рт. ст.) и многократных ($p \sim 2$ мм рт. ст.) столкновений. Наблюдались системы интеркомбинационных полос $a^3\Sigma^+ \rightarrow X'\Sigma^+/\text{SiS}$ и GeS и $b^3\Pi \rightarrow X'\Sigma^+/\text{SiS}$. Получена температурная зависимость наблюдаемого свечения в условиях единичных столкновений. Анализ этой зависимости позволил определить природу реагирующих металлч. пучков и энергии активации образования $a^3\Sigma^+$ - и $b^3\Pi$ -состояний SiS и $a^3\Sigma^+$ -состояния GeS . Для $D_0^0(\text{SiS})$ и $D_0^0(\text{GeS})$ определены нижние границы: $143,7 \pm 1,6$ ккал/моль и $132,2 \pm \pm 1$ ккал/моль соответственно. Проведенные исследования спектров в условиях многократных столкновений реагирующих частиц используются для анализа процессов столкновительного тушения $b^3\Pi$ -состояния SiS .

В. В. Хмеленко

SiS

оттиски 10041

1980

2 Д795. Исследование двух новых низколежащих электронных состояний SiS в хемилюминесцентном спектре пламени. Examination of two new low-lying electronic states of SiS observed in chemiluminescent flame spectra. Linton C. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 130, № 2, 279—290 (англ.)

Для получения ХЛ пламени использована реакция $\text{Si}(^3P) + \text{OCS}(^1\Sigma) \rightarrow \text{SiS}^* + \text{CO}(^1\Sigma)$. В спектре пламени обнаружены две новые системы полос в областях 350—400 и 385—600 нм. На основе анализа структуры полос, спин-орбитального расщепления, молекулярных констант

М. 17.

Ф. 1981/12

и сравнения с ХЛ-спектром изовалентных молекул наблюдаемые системы отнесены к переходам $b^3\Pi-X'\Sigma^+$ и $a^3\Sigma^+-X'\Sigma^+$ молекулы SiS. Изотопный анализ позволил провести отождествление колебательных переходов и определить колебательные константы. Вращательная структура получена для $a-X$ -полос и определена вращательная постоянная $a^3\Sigma^+$ -состояния: $B \sim 0,247 \pm 0,007$ см⁻¹. Приведены константы обнаруженных состояний (в см⁻¹): $a^3\Sigma^+ : T_e = 24582,1 \pm 1,3$; $\omega_e = 503,8 \pm 1,0$; $\omega_e x_e = 1,86 \pm 0,21$; $b^3\Pi_0 : T_e = 27314,5 \pm 2,2$; $\omega_e = 619,4 \pm 2,0$; $\omega_e x_e = 5,75 \pm 0,52$; $b^3\Pi_1 : T_e = 27407,9 \pm 1,1$; $\omega_e = 624,3 \pm 1,2$; $\omega_e x_e = 3,97 \pm 0,28$.

В. В. Хмеленко

SiS

417.

93: 16051y Examination of two new low-lying electronic states of silicon sulfide (SiS) observed in chemiluminescent flame spectra. Linton, C. (Phys. Dep., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB; Can. E3B 5A3). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 80(2), 279-90 (Eng). SiS mols. were produced in the chemiluminescent reaction of Si atoms with OCS. Spectra of the resulting flame consist mainly of 2 new band systems in the region 350-400 and 385-600 nm. These systems were assigned as $b^3\Pi-X^1\Sigma^+$ and $a^3\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ on the basis of band structure, spin-orbit splitting, mol. consts., and comparison with chemiluminescent spectra of isovalent mols. Vibrational assignments were made with the help of the isotope effect and vibrational consts. were obtained. Rotational structure was obsd. in some $a-X$ bands and a partial anal. yielded an approx. rotational const., $B \sim 0.247 \pm 0.007 \text{ cm}^{-1}$, for the $a^3\Sigma^+$ state. Franck-Condon factors, calcd. for the $a-X$ system, are shown to fit the general trend of the intensity distribution. Irregularities in spin-orbit splitting and in relative intensities of the spin-orbit components of the $b^3\Pi-X^1\Sigma^+$ system were obsd. and an attempt is made to explain them in terms of interactions with neighboring states. Addn. of active N to the flame greatly increased the intensity of the $b-X$ system relative to the $a-X$ system.

1980

CA 1980 93 N 2

SLS

[Ommuck 13048]

1981

Ramakrishna R.T.V.,
et al.

Acta chim. Acad. sci.
hung., 1981, 108, n1, 25-30.



сч. ност.,
параметры
бенарда
Джонса

S.S

Ommuck 12915 1981

No ;

Ramant K., Ghodgaonkar,
A.M.,

J. Chem. Educ., 1981, 58(8),
609-610.



SiS

1981

Rao T. V., et al.

См. ниже. Acta Chim. Acad.

и. и. Sci Hung 1981, 108,

(1), ● 25-30.

(см. 190; III)

1981

Om 11260

SiS (кв. мех. расет, низкие
спектр. состояния)

Robbe J.M., Lefebvre-Brion H., Bot-
tscho R.A.,

J. Mol. Spectrosc. 1981, 95(1), 215-24

Theoretical electronic structure
and perturbations in SiS.

C.A. 1981, 94, NB, 55032h

10



SiS

оттис 11260

1981

8 Д128. Теоретическая электронная структура и возмущения в SiS. Theoretical electronic structure and perturbations in SiS. Robbe J. M., Lefebvre-Brion H., Gottscho R. A. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, № 1, 215—224 (англ.)

Неэмпирический расчет молекулы SiS проведен с помощью метода ССП с последующим учетом конфигурац. взаимодействия. Для расчета использован двух-экспонентный базис слэтеровских орбиталей с включением 3d-поляризационных ф-ций. Расчет выполнен при пяти различных межъядерных расстояниях (от 3,42 до 5,0 ат. ед.). Найдены волн. ф-ции, энергии, спектроскопич. постоянные ряда низколежащих электронных состояний. Детально исследованы возмущения электронных состояний, рассчитаны параметры возмущений. Проведено сравнение возмущений в молекулах SiS, SiO и CS, CO с равным числом валентных электронов. Предсказан характер изменения возмущений при переходе к более тяжелым молекулам SiSe и SiTe.

Е. А. Ж.

Электронная
структура,
кв. меех,
расчет

Ф, 1981 № 8

SiS

16 Б22. Теоретическая электронная структура и возмущения в SiS. Robbe J. M., Lefebvre-Brion H., Gottscho R. A. Theoretical electronic structure and perturbation in SiS. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, № 1, 215—224 (англ.)

В области межъядерных расстояний от 3,4 до 5,0 ат. ед. рассчитаны кривые потенциальной энергии молекулы SiS в состояниях $1,^3\Sigma^+$, $1,^3\Pi$, $1,^3\Sigma^-$, $1,^3\Delta$. Вычисления проведены методом конфигурац. взаимодействия (с учетом до 150 конфигурац. ф-ций) с орбиталями, найденными методом самосогласованного поля. Использован двухэкспонентный набор слейтеровских ф-ций s , p - и d -типа. Найденный порядок уровней и рассчитанные значения спектроскопич. постоянных хорошо согласуются с эксперим. данными. Отмечено сходство общей картины потенциальных кривых с полученной для

Si; М. И.
эл. структ.

α. 1981. N16

Отмеч 1/260

др. молекул с 10 валентными электронами: CO, CS и SiO. Рассчитаны постоянные спин-орбитального взаимодействия для состояний $^3\pi$ и $^3\Delta$, а также параметры взаимного возмущения валентных состояний за счет орбитального и электронно-вращательного взаимодействий. Предсказаны параметры возмущения для более тяжелых молекул SiSe и SiTe. А. В. Немухин

SiS

DM MUCK 11260

1981

Muzikal I.
Coemodius

94: 55032h Theoretical electronic structure and perturbations in silicon monosulfide. Robbe, J. M.; Lefebvre-Brion, H.; Gottscho, R. A. (Lab. Spectrosc. Mol. Diatomiques, Univ. Lille I, 59655 Villeneuve d'Ascq, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 85(1), 215-24 (Eng). Wavefunctions, SCF-CI energies, and spectroscopic consts. of low-lying electronic states of SiS were computed. Ab initio calcs. of parameters characteristic of the perturbations occurring between the valence states of SiS were performed. The results present, as in SiO, a large difference between $^3\Pi$ and $^1\Pi$ perturbation parameters. Predictions of the magnitude of the corresponding perturbations in heavier mols. (SiSe, SiTe) are reported.

C.A. 1981. 94, 28

SiS

1982

UK-но-
зачет.

Chackarian C., Jr.,
Tipping R. H.
J. Mol. Spectrosc.,
1982, 93, 41, 237-244.

● (Cor. HF; III)

SiS

Dec. 14/995- 1982

2 B1377. Динамические ограничения, связанные с образованием $\text{SiS}(a^3\Sigma^+)$ в хемилюминесцентной реакции $\text{Si}-\text{OCS}$. Dynamic constraints associated with the formation of $\text{SiS}(a^3\Sigma^+)$ from the $\text{Si}-\text{OCS}$ chemiluminescent reaction. Gole James L., Green Gary J. «Chem. Phys.», 1982, 69, № 3, 357—363 (англ.)

Исследовали спектры хемилюминесценции (ХЛ), возникающей в р-ции атомов Si с молекулами OCS в условиях однократных столкновений (давл. $\sim 2 \cdot 10^{-4}$ Торр). Эти спектры обусловлены переходами $\text{SiS}^*a^3\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ и $b^3\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ в возбужденных молекулах SiS^* , к-рые образуются в р-ции $\text{Si}(^3P) + \text{OCS}(^1\Sigma^+) \rightarrow \text{SiS}^*(a^3\Sigma^+, b^3\Pi, \dots) + \text{CO}(^1\Sigma^+)$. Система спектральных полос $\text{SiS}(a^3\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+)$ начинается при 4000 Å, достигает максимума при ~ 4800 Å и простирается до 5650 Å. В спектре доминирует полоса перехода из состояния $\text{SiS}^*(a^3\Sigma^+, v'=0)$, хотя наблюдаются также переходы с уровней $v'=1, 2$ и 3. Распределение населенностей ко-

Спектр

X. 1983, 19, 42

лебат. уровней $\text{SiS}(a^3\Sigma^+, v'=0-3)$ равно $0,679 : 0,229 : 0,075 : 0,022$, т. е. является практически больцмановским при t -ре p -ции 645 К, тогда как соотв-щее распределение для $\text{SiS}^*(b^3\Pi)$ сильно отличается от больцмановского. Исследованы причины резкого обрыва колебательного распределения $\text{SiS}^*(a^3\Sigma^+)$ при $v'=3$, поскольку экзотермичность p -ции образования $\text{SiS}^*(a^3\Sigma^+)$ достаточна для возбуждения уровней $v'=4$ и 5. На основании анализа методами теории информации найдено, что на населенности колебательных уровней $\text{SiS}^*(a^3\Sigma^+)$ сильное влияние оказывают динамич. ограничения, проявляющиеся в том, что в p -ции $\text{Si} + \text{OCS}$ не происходит превращения энергии внутреннего возбуждения и поступательной энергии реагентов в энергию колебательного возбуждения продукта SiS^* . В. Е. Скурат

SiS

Q.M. 14 995 1982

2 Д777. Динамические ограничения, сопутствующие образованию молекул $\text{SiS} (a^3\Sigma^+)$ в хемилюминесцентной реакции $\text{Si} + \text{OCS}$. Dynamic constraints associated with the formation of $\text{SiS} (a^3\Sigma^+)$ from the $\text{Si}-\text{OCS}$ chemiluminescent reaction. Gole James, Green Gary J. «Chem. Phys.», 1982, 69, № 3, 357—363 (англ.)

спектр, Si,

В области 400—560 нм получен спектр хемилюминесценции продуктов газофазной реакции $\text{Si} + \text{OCS}$. Структура спектра отнесена к излучательному распаду состояний $a^3\Sigma^+$ и $b^3\Pi$ возбужденных молекул SiS^* . Анализ распределения интенсивностей в спектре позволил установить, что колебательное возбуждение молекул SiS в состоянии $a^3\Sigma^+$ близко к больцмановскому распределению при t -ре 645 К, а в состоянии $b^3\Pi$ — существенно отличается от больцмановского. Анализируя полученные результаты, авторы высказали предположение о существовании динамич. ограничений, влияющих на характер распределения продуктов по внутренней энер.

р. 1983, 18, № 2

гии. Установлено, что внутренняя и кинетич. энергии реагирующих молекул не могут быть с достаточной эффективностью преобразованы в колебательную энергию молекул SiS. М. Т.



SiS

Ommuck 14995 1982

$a^3\Sigma^+$, $b^3\Pi$

/ 97: 153380b Dynamic constraints associated with the formation of silicon monosulfide($a^3\Sigma^+$) from the silicon-carbon oxide sulfide chemiluminescent reaction. Gole, James L.; Green, Gary J. (Dep. Chem., Georgia Inst. Technol., Atlanta, GA 30332 USA). *Chem. Phys.* 1982, 69(3), 357-63 (Eng). The Si-OCS reaction is characterized by chemiluminescent emission from the excited electronic $a^3\Sigma^+$ and $b^3\Pi$ states of SiS. The vibrational population distribution of the $a^3\Sigma^+$ state is virtually Boltzmann at 645 K. In contrast, the vibrational distribution for the $b^3\Pi$ state appears to be far from Boltzmann. A surprisal anal. indicates that a dynamic constraint affects the population of vibrational quantum levels in the $a^3\Sigma^+$ state. This constraint appears to be the inability of the Si-OCS reaction to convert the internal energies of the Si atoms and OCS mols. and the relative translational energy of these reactants into product SiS internal excitation.

C.A. 1982, 97, N18.

SiS

М.П.

ВМ. 24506

см. №9 (вклад Барроу)

ММММММММ 13 4 6 0

1982

14 Б136. Валентные состояния молекулы SiS: анализ возмущений в системе $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$. Harris S. M., Gottscho R. A., Field R. W., Barrow R. F. Val-

lence states of the SiS molecule: analysis of perturbations in the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ system. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 1, 35—39 (англ.)

Измерены электронные спектры поглощения молекул $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$ и $^{30}\text{Si}^{32}\text{S}$ в печи Кинга при 1500 К. Наблюдено 5950 линий, отнесенных к 27 электронно-колебательным переходам $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$ и 2560 линий, отнесенных к 12 полосам $^{30}\text{Si}^{32}\text{S}$. Проанализированы возмущения, вызванные взаимодействиями состояния $A^1\Pi$ с состояниями $D^1\Delta$, $C^1\Sigma$, $E^3\Sigma^-$ и $D^3\Delta$. Колебательная нумерация в возмущающих состояниях определялась тремя методами — на основании факторов Франка—Кондона, на базе измеренных изотопных сдвигов и с помощью идентификации возмущающих уровней, пересекающих более одного колебательного уровня состояния $A^1\Pi$. Для всех возмущающих состояний получена надежная нумерация (для $D^1\Delta$ — два варианта). Приведены молек. постоянные всех взаимодействующих состояний SiS. С. Б. Осин

х. 1982, 19, №14.

0m. 24506

SiS

0m. NG (Barrow)

Оттиск 13460 1982

7 Д434. Валентные состояния молекулы SiS анализ возмущений в системе $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$. Valence states of the SiS molecule: analysis of perturbations in the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ system. Harris S. M., Gottscho R. A., Field R. W., Barrow R. F. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 1, 35—59 (англ.)

Выполнен детальный анализ полос системы $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ изотопич. молекул ^{28}SiS и ^{30}SiS . Проанализированы возмущения, обусловленные взаимодействиями с состояниями $D^1\Delta$, $C^1\Sigma^-$, $e^3\Sigma^-$, $d^3\Delta$. Три разных метода, основанных на: 1) анализе коэф. . Франка-Кондона; 2) изотопич. сдвигах и 3) идентификации возмущающих уровней, пересекающихся более чем с одним колебательным уровнем состояния $A^1\Pi$, использованы для нумерации колебательных уровней возмущающих состояний. Для трех из них выполнено однозначное отнесение. Для состояния $D^1\Delta$ предложено две альтернативных нумерации. Построены потенциалы РКР и определены постоянные взаимодействий возмущающих состояний с состоянием $A^1\Pi$. Результаты сопоставлены с данными для CO, CS, SiO и результатами неэмпирич. расчетов. Библ. 35.

В. С. Иванов

спектр,
валентные
состояние

Ф/1982, 18, 147

SiS

COMMUCK 13400

1982

96: 60286c Valence states of the silicon sulfide molecule: analysis of perturbations in the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ system. Harris, S. M.; Gottscho, R. A.; Field, R. W.; Barrow, R. F. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, UK OX1 3QZ). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 91(1), 35-59 (Eng). The results of a detailed rotational anal. of bands of the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ systems of ^{28}SiS and of ^{30}SiS are given. Perturbations caused by interactions with 2 singlet states, $D^1\Delta$ and $C^1\Sigma^-$, and with 2 triplet states, $e^3\Sigma^-$ and $d^3\Delta$, were analyzed. The use of 3 different methods, based (1) on Franck-Condon factors, (2) on isotope shifts, and (3) on the identification of perturbing levels which cross more than 1 vibrational level of $A^1\Pi$, to det. the vibrational numbering in the perturbing states was examd. and for 3 of the above electronic states, an unambiguous numbering was derived. Two alternative consecutive vibrational numberings for $D^1\Delta$ are suggested. Method (1) is unreliable here, because of the very high vibrational quantum nos. of the levels that perturb $A^1\Pi$. RKR potentials were constructed and with calcd. Franck-Condon factors, values of the electronic interaction consts. were derived for the interactions between the perturbing states and $A^1\Pi$. The values were compared with those for CO, CS, and SiO, and with ests. from ab initio calcs.

($A^1\Pi-X^1\Sigma$)
M.A.

C.A. 1982, 96, N 8

DM. N 9 (Frank Barrow)

24506 DM.

SiS

004. 16682

1983

17 Б200. Вращательный анализ полос $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$. Изучение возмущений в состоянии $A^1\Pi$. ~~Rotational~~ analysis of the $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ bands of $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$: perturbation studies in the $A^1\Pi$ state. Krishnamurthy G., Gopal Sheila, Saraswathy P., Lakshminarayana G. «Can. J. Phys.», 1983, 61, № 5, 714—724 (англ.; рез. фр.)

Вращат.
анализ

полос $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$,

и.п.

Сфотографирован УФ-спектр испускания молекулы $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$, возбуждаемый в безэлектродном МВ-разряде. Кремний и сера, обогащенная изотопом ^{34}S , помещались в разрядную трубку, заполненную Ne (2 мм). Т-ра разряда соотв. наиболее интенсивному спектру испускания — $\sim 800^\circ$. В этих условиях полосы S_2 в видимой области полностью подавляются. Измерена и проанализирована вращательная структура полос $V' = 0-5 - V'' = 0, V' = 0, 1, 4-7 - V'' = 1, 3-2$ перехода $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ (2600—3000 Å). Приведено положение термов вращательной энергии ($Y \leq 85$) уровней $v = 0-7$ состоя-

X. 1983, 19, № 17

ния $A^1\Pi$, таблица Деландера для начала полос. Обна-
 ружены и обсуждены многочисленные возмущения, свя-
 занные с взаимодействием уровней $A^1\Pi(v=0-7) \leftrightarrow$
 $\leftrightarrow e^3\Sigma^-(v=14-23)$, $A^1\Pi(v=2-7) \leftrightarrow d^3\Delta(v=20-27)$ и
 $C^1\Sigma^-(v=17-23)$, $A^1\Pi(v=1-7) \rightarrow D^1\Delta(v=17-24)$. Зна-
 чения молек. постоянных $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$ (см^{-1}): состояние
 $A^1\Pi - T_e=35026,29$, $\omega_e=506,04$, $\omega_e x_e=2,85$, $B_e=0,2590$,
 $\alpha_e=2,06 \cdot 10^{-3}$, $D_e=2,85 \cdot 10^{-7}$; состояние $X^1\Sigma^+ - \omega_e=$
 $=739,29$, $\omega_e x_e=2,51$, $\omega_e y_e=5,2 \cdot 10^{-4}$. В. М. Ковба

SiS

1982

Рачеѣ
ѡпык-
мырѡ

Sauer J., Čársky R.,
Zahradník R.

Collect. Czech. Chem.
Commun., 1982, 47, 4,
1149-1168.

(cr. SiH_2 ; III)

S.S.

224. 16682 1983

10 Д504. Вращательный анализ полос $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ молекулы $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$: исследование возмущений в состоянии $A^1\Pi$. Rotational analysis of the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ bands of $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$. Perturbation studies in the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ state. Krishnamurty G., Gopal Sheila, Saraswathy P., Lakshminarayana G. «Can. J. Phys.», 1983, 61, № 5, 714—724 (англ.; рез. фр.)

Сфотографирована с высоким разрешением (дисперсия 0,13 Å/мм) УФ-система полос $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ молекулы $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$. Спектр системы возбуждался с помощью безэлектродного ВЧ-разряда в смеси, содержащей металлический кремний, элементарную серу и неон при давлении 2 мм рт. ст. и $T \approx 800^\circ\text{C}$. Выполнен вращательный анализ 13 полос, расположенных в области 2600—3000 Å. Для колебательных уровней $v=0\div7$ состояния $A^1\Pi$ зарегистрированы возмущения, обусловленные состояниями $e^3\Sigma$, $d^3\Delta$, $C^1\Sigma$ и $D^1\Delta$. Сдвиги в началах полос $v'=2, 6, 7$ также приписаны возмущениям. Определены молекулярные постоянные состояния $A^1\Pi$. В. А. Е.

М-П;

фр. 1983, 18, N10

SiS

004. 16682

1983

98: 224585f Rotational analysis of the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ bands of silicon sulfide ($^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$): perturbation studies in the $A^1\Pi$ state. Krishnamurty, G.; Gopal, Sheila; Saraswathy, P.; Lakshminarayana, G. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400085 India). *Can. J. Phys.* 1983, 61(5), 714-24 (Eng). The UV bands of the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ system of a $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$ mol. were excited in emission in an electrodeless discharge tube and photographed in the 4th order of a 10.6 m Ebert grating spectrograph. Rotational anal. of 13 bands lying in the region 2600-3000 Å was carried out. Perturbations obsd. in the $v = 0-7$ levels of $A^1\Pi$ were attributed to the perturbing states $e^3\Sigma$, $d^3\Sigma 3\Delta$, $C^1\Sigma^-$, and $D^1\Delta$. Origins of the bands involving $v' = 2, 6$, and 7 were shifted from their expected positions, presumably due to perturbations.

($A^1\Pi-X^1\Sigma^+$)

C.A. 1983, 98, N 26

1984

Sis Berthier G., Pauzat F., et al.

J. Mol. Struct., 1984, 107, Suppl.:

"Theochem", 16; Theor. Chem.

m.n. 1983. Proc. XIVth Congr. Theor.
Chem. Latin Expression,
Louvain-la-Neuve, 30 May-
2 June, 1983, 39-48.

(cu. HES⁺; III)

SiS

От. 22954

1985

9 Б1016. Релаксация и колебательная структура наиболее глубоких ионизационных состояний SiS. Relaxation and vibrational structure in the deepest ionized states of SiS. Cesar Amary, Canuto Sylvio. «J. Mol. Struct.», 1985, 133, Suppl.: «Theochem», 26, 221—226 (англ.)

Спин-неограниченным методом Хартри—Фока с использованием базисных наборов $(13s10p1d)/[7s5p1d]$ рассчитаны фрагменты кривых потенциальной энергии основного состояния молекулы SiS, а также состояний, возникающих при удалении одного электрона с орбиталей 1σ , 2σ и 3σ . По сравнению с нейтр. молекулой равновесные расстояния в состояниях $(1\sigma)^{-1}$ и $(3\sigma)^{-1}$ увеличиваются, а в состоянии $(2\sigma)^{-1}$, отвечающем удалению электрона с орбитали $1s$ кремния, — уменьшается. По разности полных энергий и по методу Купманса оценены вертикальные энергии ионизации. Для низших колебат. состояний ионов определены относит. факторы Франка—Кондона, определяющие профили полос в рентгеноэлектронном спектре. Отмечено, что энергия релаксации должна оказывать существенное влияние на профили полос, точно так же, как и в случае молекул CO и CS. А. В. Немухин

расчет М.А.

X.1986, 19, №9

SiS
S. St

Q.M. 22954

1985

104: 42135u Relaxation and vibrational structure in the deepest ionized states of thioxosilylene (SiS). Cesar, Amary; Canuto, Sylvio (Dep. Fis., Univ. Fed. Pernambuco, 50.000 Recife, Brazil). *THEOCHEM* 1985, 26, 221-6 (Eng). Ab initio non-relativistic spin-UHF calcs. were performed on SiS and its S_1 , S_{11} , and S_2 core-ionized states. Geometrical changes were investigated. The calcd. Franck-Condon factors are given explicitly. Relaxation energy greatly influences the vibrational band profile in parallel to the corresponding analogs, CO and CS. The geometrical relaxation was compared to the ones obtained for the corresponding protonated systems and some aspects of possible astrophys. interest are briefly discussed.

(грамота
Ф.К.)

C.A. 1986, 104, N 6

SiS

om. 23470 1985

№18 Б1202. Анализ вращательной структуры полос системы $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ SiS. Rotational analysis of the $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ bands of SiS. Lakshminarayana G., Shetty B. J., Gopal S. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 112, № 1, 1—7 (англ.)

Сфотографирован спектр испускания радикалов SiS, образующихся при пропускании смеси $S_2Cl_2/SiCl_4/Ar$ через МВ-разряд. В обл. 440—660 нм наблюдалась 21 полоса перехода $E^1\Sigma^+ (v'=7, 8, 14-19) - X^1\Sigma^+ (v''=84,35, 47-54)$. Для всех полос проанализирована вращат. структура ($J \leq 80$) и приведены значения $v_0, B_v', B_v'', D_v', D_v''$. Проведена совместная обработка полученных данных и результатов выполненных ранее исследований оптич. и МВ-спектров. Определены значения равновесных молек. постоянных SiS в состоянии $E^1\Sigma^+$ и $X^1\Sigma^+$. Оценена энергия диссоциации D_e (SiS, $E^1\Sigma^+$) = 9720 cm^{-1} . В предположении, что состояние $E^1\Sigma^+$ коррелирует с атомами Si(3P) и S(3P) получена величина энергии диссоциации в основном электронном состоянии 51460 ± 1000 cm^{-1} (ошибка связана в основном с атомными мультиплетными расщеплениями).

(М.П.)

X.1986, 19, №18

В. М. Ковба

SiS

Om. 23470 1985

9 Л240. Вращательный анализ $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ -полос SiS. Rotational analysis of the $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ bands of SiS. Lakshminarayana G., Shetty B. J., Gopal Sheila. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 112, № 1, 1—7 (англ.)

Вращательный анализ Герцберга полос $E - X$ молекулы SiS распространен на полосы, включающие колебательные уровни вплоть до $v=19$ в E -состоянии и $v=54$ в X -состоянии. Начало полос, равновесные колебательные и вращательные постоянные определены с помощью аппроксимации вращательных линий методом наименьших квадратов. В. В. Россихин.

М.П.

ср. 1986, 18, № 9

SiS

Om 23470

1985

103: 29545n Rotational analysis of the $E^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ bands of silicon monosulfide. Lakshminarayana, G.; Shetty, B. J.; Gopal, Sheila (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400 085 India). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 112(1), 1-7 (Eng). Rotational analyses of 21 bands lying in the region 4400-6600 Å and belonging to the $E^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ system of SiS were carried out. These bands arise from transitions involving vibrational levels $v = 7, 8$, and 14-19 in the E state and the vibrational levels $v = 34, 35$, and 47-54 in the $X^1\Sigma^+$ state. By combining the present band origin data with those of previous workers in a least-squares fit, a set of vibrational consts. was obtained.

($E^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$)

(Krausz
many)

C. A. 1985, 103, N4.

SiS

1987

Balasubramanian T.K.,
Bhale G.L., et al.

колебает.
и вращает.
поскольку.

Symp.-Int. Astron.
Union 1985 (Pub. 1987).
120, 91-2.

(Cen. ALO; III)

SiS

OM 30752

1988

5 Д68. Неэмпирическое исследование основного состояния ($X^1\Sigma^+$) SiS, включающее электронную корреляцию. Ab initio study including electron correlation of the ground state ($X^1\Sigma^+$) of SiS / Li Shou-zhong, Moncrieff David, Zhao Jian-guo, Brown Franklin B. // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 151, № 4—5.— С. 403—408.— Англ.

Неэмпирически рассчитаны потенциальная кривая основного состояния ($X^1\Sigma^+$) и спектроскопич. постоянные молекулы, SiS. Расчет включал три стадии: предварительная генерация МО методом ССП, расчет исходного набора конфигураций с помощью многоконфигурац. метода ССП в полном пространстве активных орбиталей, расчет методом конфигурац. взаимодействия с учетом всех однократных и двухкратных возбуждений исходных ф-ций состояния. Использованы сгруппированные базисы гауссовых ф-ций $[6s5p2d]$ и $[7s6p3d1f]$, центрированные на каждом ядре. Наиболее точные расчеты с использованием 328 исходных конфигураций и 3 миллионов конфигураций при поиске нижнего корня

М.А.

ф. 1989, № 5

векового уровня прямого метода КВ, выполненные на суперкомпьютере типа Сайбер, позволили получить равновесное межъядерное расстояние (R_e) с точностью 0,002 ат. ед. ($R_e = 3,647$ ат. ед.), а энергию диссоциации (D_e) с точностью 0,38 эВ ($D_e = 6,0$ эВ). Найдена также функция зависимости дипольного момента SiS от межъядерного расстояния.

А. И. Дементьев



SiS

om 30752

1988

110: 45229n Ab initio study including electron correlation of the ground state ($X^1\Sigma^+$) of thioxosilylene (SiS). Li, Shou Zhong; Moncrieff, David; Zhao, Jian Guo; Brown, Franklin B. (Supercomput. Comput. Res. Inst., Florida State Univ., Tallahassee, FL 32306-3006 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 151(4-5), 403-8 (Eng). Results from a set of large-scale MR-CI calcns. on the ground-state potential energy curve of SiS are presented. Various spectroscopic consts. derived from the calcns. are compared with those from expt. A functional representation of the dipole moment of this mol. is given, and compared with expt. and another semiempirically derived functional form.

muonem.
vacuum

C.A. 1989, 110, N6

SiS

1988

4 Б1036. Неэмпирическое изучение с учетом электронной корреляции основного состояния ($X^1\Sigma^+$) SiS. Ab initio study including electron correlation of the ground state ($X^1\Sigma^+$) of SiS / Li Shou-zhong, Moncrieff D., Zhao Jian-guo, Brown F. B. // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 151, № 4—5.— С. 403—408.— Англ.

Методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям рассчитана потенциальная кривая основного электронного состояния $X^1\Sigma^+$ молекулы SiS. Орбитали получены методом ССП в полном активном пространстве. Использован базис сгруппированных гауссовых ф-ций [7s6p3d1f]. Вычисленные спектроскопич. постоянные согласуются с эксперим. данными. Определена ф-ция дипольного момента в широком интервале межъядерных расстояний и получена аппроксимация этой ф-ции полиномом третьей степени.

А. А. Сафонов

М.П.

X.1989, N 4

SiSe

1988

$(E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+)$
M.A.

109: 159280g The vibrational and rotational analysis of the $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ system of silicon selenide (SiSe). Lakshminarayana, G.; Shetty, B. J. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400 085 India). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 130(1), 155-67 (Eng). By exciting the spectrum of SiSe in a microwave discharge, all of its 3 known band systems, namely, $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ (2450-2770 Å), $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ (2900-3900 Å), and $a^3\Pi - X^1\Sigma^+$ (3900-4300 Å), and a large no. of new bands at 4000-6000 Å were obtained. From a detailed vibrational anal., the new bands belong to the $E^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ system and arise out of transitions from $v = 0-13$ levels of the $E^1\Sigma^+$ state to $v = 25-52$ levels of the $X^1\Sigma^+$ state. The vibrational isotope shift studies of $^{28}\text{Si}^{78}\text{Se}$ and $^{28}\text{Si}^{80}\text{Se}$ were carried out which showed that the vibrational numbering of the new bands and that of the bands in the region 2450-2770 Å is correct. From a least-squares fitting of the bandheads the vibrational consts. were obtained. Rotational anal. of 8 bands, namely, 9-46, 9-45, 8-45, 8-44, 8-43, 7-43, 7-0, and 8-0 was carried out which confirmed the above assignments. A simultaneous least-squares fit of all the rotational lines of the 8 bands together with the 3 microwave transitions previously obsd. by J. Hoeft (1965) in the $v = 0$ level of the ground state ($J = 1 \leftarrow 0$ at 11,489.44 MHz, $J = 2 \leftarrow 1$ at 22,978.69 MHz, and $J = 3 \leftarrow 2$ at 34,468.17 MHz) was carried out. From this fit accurate rotational consts. were obtained for the electronic states involved in the transition.

C.A. 1988, 109, N 18

SiS

(Im-29283)

1988

109: 135127m A comparison of different many-body perturbation theory calculations of the ground state of thioxosilylene (SiS). Lima, Eneida G.; Canuto, Sylvio (Dep. Fis., Univ. Fed. Pernambuco, 50.000 Recife, Brazil). *Int. J. Quantum Chem.* 1988, 33(5), 395-401 (Eng). A comparison of different many-body perturbation theory (MBPT) calcs. of the ground state rotational and vibrational consts. of SiS is made. The calcs. are performed up to the complete fourth-order MBPT level, and in all cases two basis sets are utilized. The results of the third-order and some incomplete fourth-order calcs. are in good agreement, but the complete fourth-order is among the worst as compared with the exptl. data. Anal. of the different contributions to the calcd. correlation energies points towards the necessity of including even higher-order terms of the MBPT expansion.

meop.
paxem

C. A. 1988, 109, N 16

SiS

М. 29283

1988

В 20 Б1025. Сравнение различных расчетов основного состояния SiS по многочастичной теории возмущений. A comparison of different many-body perturbation theory calculations of the ground state of SiS. Lima E. G., Canuto S. «Int. J. Quantum Chem.», 1988, 33, № 5, 395—401 (англ.)

С помощью многочастичной теории возмущений (ТВ) рассчитаны спектроскопич. постоянные основного состояния молекулы SiS. Используются базисы сгруппированных гауссовых ф-ций $(12s9p1d)/[6s4p1d]$ и $(13s10p2d)/[7s5p2d]$. Сопоставлены результаты, полученные во втором, третьем и четвертом (без и с учетом трехкратных возбуждений) порядке ТВ, а также результаты метода Паде-аппроксимант, метода конфигурац. взаимодействия с одно- и двукратными возбуждениями и эксперим. данные. С эксперим. данными хорошо согласуются результаты ТВ 3-го порядка и ТВ 4-го

(М.П.)

X. 1988, 19, N 20

порядка без учета трехкратных возбуждений.
В случае полного 4-го порядка ТВ согласие с эк-
сперим. данными ухудшается. Анализ различных
вкладов в корреляц. энергию указывает на необходи-
мость учета членов высших порядков разл. многоча-
стичной теории возмущений. А. А. Сафонов



SiS

SiS⁺

(X¹Σ⁺)

X. 1989, № 21

DM 31566

1989

21 Б1149. Исследование SiS(X¹Σ⁺) методом фотоэлектронной спектроскопии при высоких температурах. High-temperature photoelectron spectroscopy a study of SiS(X¹Σ⁺) / Cockett M. C. R., Dyke J. M., Morris A., Niavarani M. H. Z. // J. Chem. Soc. Faraday Trans. Pt. 2.— 1989.— 85, № 1.— С. 75—83.— Англ.

С использованием линии излучения HeI в качестве источника возбуждения исследованы фотоэлектронные спектры (ФЭС) SiS(X¹Σ⁺) в газовой фазе, образованного при испарении смеси Si(tb)/SiS₂ (тв.) при t-ре около 1200 К. Интерпретация ФЭС проведена на основе данных неэмпирич. расчетов методом ССП. Корреляц. эффекты учитывались в рамках метода конфигурац. взаимодействия. В диапазоне энергий связи до 21 эВ наблюдали пять полос вместо трех, предсказываемых теоремой Купманса. Эффект объяснен неприменимостью модели одноэлектронной ионизации. В ряде спектров разрешена колебат. структура и получены значения спектроскопич. постоянных R_e , ω_e и D_e для X²Π и B²Σ⁺ состояний SiS⁺. А. Н. Соколов

SiS

Om. 31566

1989

фотон. chem,
констан. cmf.

110: 47851h High-temperature photoelectron spectroscopy: a study of silicon monosulfide ($X^1\Sigma^+$). Cockett, Martin C. R.; Dyke, John M.; Morris, Alan; Zamanpour Niavarani, M. Hadi (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, UK SO9 5NH). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1989, 85(1), 75-83 (Eng). The He I UPS of SiS($X^1\Sigma^+$) was recorded and interpreted with the aid of ab initio CI calcs. Five bands assocd. with this mol. were obsd. at <21 eV ionization energy, whereas only 3 are expected on the basis of Koopmans' theorem. SiS represents an example of the breakdown of the 1-electron ionization model, and the presence of 5 bands in the exptl. spectrum is rationalized in terms of an ionic-state CI mechanism. Vibrational structure was resolved in the 1st and 3rd photoelectron bands and anal. of this structure led to values of r_e , ω_e , and D_e in the $X^2\Pi$ and $B^2\Sigma$ states of SiS $^+$.

(H) ~~AD~~



SiS $^+$ } r_e, ω_e, D_e in $B^2\Sigma$ & $X^2\Pi$.

C.A. 1989, 110, N6

LiJ

(DM 34381)

1989

Müller-Plathe F.,
Laksanen L.,

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

Hartree - ● Fock - Limit

Properties for SiC , SiN , Si_2 ,
 Si_2^* and SiS .

SiS

Am 34539

1989

/112: 147978q Vibrational transition probabilities, $\bar{r}$ -centroids and Morse PE-curves for silicon sulfide (SiS). Singh, Markandey; Chaturvedi, Jai Prakash (Dep. Phys., Univ. Gorakhpur, Gorakhpur, India). *Astrophys. Space Sci.* 1989, 162(2), 279-85 (Eng). Vibrational transition probabilities namely, Franck-Condon factors and $\bar{r}$ -centroids, were evaluated using an approx. anal. method for the D - X system of SiS. Morse potential energy curves for $D^1\pi$ and $X^1\Sigma^+$ states of SiS were constructed using the latest spectroscopic data. The value of $\bar{r}$ -centroids for the band decreases linearly with the corresponding wavelength.

nomeruz-
kuebbe

C.A. 1990, 112, N16

SiS

O.M. 34066

1989

. 112: 44712u Franck-Condon factors and r-centroids for the $E^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ bands of silicon sulfide (SiS) and silicon selenide (SiSe). Sunanda, K.; Gopal, Sheila; Shetty, B. J.; Lakshminarayana, G. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400 085 India). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1989, 42(6), 631-4 (Eng). By using the computer program TRAPRB, Franck-Condon factors and r-centroids were calcd. for the $E^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ bands of the SiS and SiSe radicals. Intensities of these bands have been visually estd. from the emission spectra photographed on a 3.4 m Ebert grating spectrograph (5 Å/mm). A comparison of the Franck-Condon factors with these estd. intensities shows reasonable agreement.

 $E^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$,

факторы

Франка-Кондона

①

12



SiSe

C.A. 1990, 112, N6

Sis

(OM 34246)

1990

Baker J., Barms M., et al.

J. Electron Spectrosc. and
Relat. Phenom., 1990, 51,
Spec. Issue., 487-511.

Photoelectron Spectroscopy
of unstable molecule.

SiS

(Dm 35360)

1990

114: 90976x Diode laser measurement of the infrared spectrum of silicon monosulfide. Birk, Helmut; Jones, Harold (Abt. Phys. Chem., Univ. Ulm, W-7900 Ulm, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1990, 175(5), 536-42 (Eng). The IR spectra of four isotopic forms of SeS in natural abundance ($^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$: 87%, $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$: 3.8%, $^{29}\text{Si}^{32}\text{S}$: 4.4%, $^{30}\text{Si}^{32}\text{S}$: 2.9%) in their ground electronic states ($^1\Sigma$) were measured using a diode laser spectrometer. An accurate set of Dunham parameters, mass-independent parameters and mass scaling coeffs. were calcd. The coeffs. of the Dunham potential of SiS were also accurately detd. using a direct fitting procedure.

UK, U.N.

C.A. 1991, 114, N 10

SiS

Om 35374

1990

113: 220493c Fourier transform emission spectroscopy at 13 μm : vibration-rotation spectrum of silicon sulfide (SiS). Frum, C. I.; Engleman, R., Jr.; Bernath, P. F. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(8), 5457-61 (Eng). The vibration-rotation emission spectrum of the high temp. mol. SiS was recorded with a Fourier transform spectrometer. The observation of a high resolu. emission spectrum at 13 μm (750 cm^{-1}) is unusual but this technique is generally applicable to high temp. species. Seven bands (1-0 through 7-6) of the main isotopic form, $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$, were obsd. along with three bands (1-0, 2-1, and 3-2) for each of the minor species, $^{29}\text{Si}^{32}\text{S}$, $^{30}\text{Si}^{32}\text{S}$, and $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$. Mass-reduced Dunham parameters, including Watson's correction due to the breakdown of the Born-Oppenheimer approxn., were derived from the data.

xcnham -
frumam-
cukmp,
ll.11

©.A. 1990, 113, N 24

SiS

от 35344

1990

15 Б1188. Фурье-спектроскопия испускания при 13 мкм. Колебательно-вращательный спектр SiS. Fourier transform emission spectroscopy at 13 μm : Vibration-rotation spectrum of SiS / Frum C. I., Engleman R., Bernath P. F. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 8.— С. 5457—5461.— Англ.

В области 13 мм (750 см^{-1}) с высоким разрешением ($0,005\text{ см}^{-1}$ фурье-спектрометр) измерен колебательно-вращат. спектр испускания молекул SiS в газ. фазе. Смесь кремния и SiS₂ нагревали до T -ры $900-1000^\circ$. В спектре наблюдали семь полос, $v+1 \leftarrow v=0-6$, основного изотопомера $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$ и полосы $1-0$, $2-1$ и $3-2$ еще трех изотопных модификаций, $^{29}\text{Si}^{32}\text{S}$, $^{30}\text{Si}^{32}\text{S}$, $^{28}\text{Si}^{34}\text{S}$. Приведены: параметры Данхема для всех изотопомеров; приведенные по массе параметры Данхема

М.П.

X.1991, N 15

включая поправки Уотсона связанные с нарушением приближения Борна — Оппенгеймера; значения энергии колебат. уровней и поворотные точки потенциальной кривой РКР $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$ ($X^1\Sigma^+$, $v=0-7$). Значения (в см^{-1}) молек. постоянных $^{28}\text{Si}^{32}\text{S}$: $Y_{10}=749,64565$, $Y_{20}=-2,58622$, $Y_{30}=1,04 \cdot 10^{-3}$, $Y_{40}=-7,3 \cdot 10^{-6}$, $Y_{01}=0,30352788$, $Y_{11}=-1,47316 \cdot 10^{-3}$, $Y_{21}=-3,1 \cdot 10^{-8}$, $Y_{31}=-9,1 \cdot 10^{-9}$, $Y_{02}=-1,9903 \cdot 10^{-7}$, $Y_{12}=-1,86 \cdot 10^{-10}$, $Y_{22}=-2,9 \cdot 10^{-12}$, $Y_{03}=-1,3 \cdot 10^{-15}$, $Y_{13}=-6 \cdot 10^{-16}$.

В. М. Ковба

SiS

1990

Мусалв Д.Т., Якобсон В.В.
и др.

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

(сер.  CN⁻; III)

SiS

Дм 36098

1991

12 Д116. Радиальные функции SiS $X^1\Sigma$ из колебательно-вращательных спектров. Radial functions of SiS $X^1\Sigma$ from vibration—rotational spectra / Ogilvie J. F. // Chem. Phys. Lett.—1991.—183, № 1—2.—С. 40—44.—Англ.

Определены параметры радиальных функций, необходимых для расчета потенц. энергии и адиабатических и неадиабатич. эффектов, в области $1,72 \leq R/10^{-10} \text{ м} \leq 2,25$ для молекулы SiS в электронном основном состоянии $X^1\Sigma$. Представлен алгоритм определения этих параметров непосредственно из частот и волн. чисел чисто вращательных и колебательно-вращательных переходов. Показано, что только 12 независимых параметров необходимо для подгонки набора данных из 3025 линий со стандартным отклонением $0,236 \text{ м}^{-1}$.

МЛ-

ср. 1991, № 12

SiS

1992

Coxon John A.,
Hajigeorgiou Photos. G.

директивн. Chem. Phys. 1992,
потенци. 167 (3), 327-40.
Крив.

( NaF; iii)

SSI

(om. 37 773)

1994

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

15⁺,

D,

эксперим.,
теорет.
расчет

J. Phys. Chem., 1994,
98, N40, 9931-41

SiS

1994

Ogilvie J. F., Liao S. C.

Acta Phys. Hung. 1994,

$X'\Sigma^+$

74 (4), 365-77.

m.n.

( cer. AlCl; III)

Sis

1994

Woon D. E., Denning
T. H., Jr.

et. n.

J. Chem. Phys. 1994.

101, N10.C. 8877.

(see: AL₂; III)

his

1997

Bernath, Peter F.,

lek, Symp. - Int. Astron. Union
0690p 1997, 178, 281-286

(all. Ark;



III)

SiS

1998

Decker, Stephen A.,
et al.,

теорет.
расчет
спр-м
и
стабильн.

THEOCHEM 1998, 457 (1-2),
215-226

(см. №  III)

SiS

2000

F: SiC (T_{tr})
P: I(T_{tr})

02.02-19B3.101. Моделирование молекулярной динамики структурного превраще карбиде кремния под давлением. Molecular dynamics simulation of structural transformation in silicon carbide under pressure / Shimojo Fuyuki, Ebbsjo Ingvar, Kalia Rajiv K., Nakano Aiichiro, Rino Jose P., Vashishta Priya // Phys. Rev. Lett. - 2000. - 84, N 15. - С. 3338-3341. - Англ.

Методом молекулярной динамики проведено изотермически-изобарное исследова индуцированного давлением структурного перехода в SiC с использованием но межатомной потенц. схемы, позволившей с успехом реализовать обратимое превращение между структурами цинковой обманки и каменной соли. Вычисленн изменения объема при переходе и гистерезис оказались в хорошем согласии с эксперим. данными. Превращение на атомном уровне включало переход от кубической к моноклинной элементарной ячейке и относит. сдвиг Si и C подрешеток в направлении {100}. Библ. 21.

SiS

Om. 41277

2002

Surya Chattopadhyaya,
Anjan Chattopadhyay,
et al.,

un.

J. Phys. Chem. 2002, A106,
833-841. ●