

**Modellrechnungen von Kraftkonstanten der
Tetramethyl-Verbindungen $(\text{CH}_3)_{4-n}\text{M}(\text{CD}_3)_n$, $M = \text{Si}, \text{Ge},$
 Sn, Pb**

**Siegfried Biedermann^a, Hans Bürger^{a,1}, Karl Hassler^{b,*,2} und
Friedrich Höfler^{†b}**

^a Institut für Anorganische Chemie, Technische Universität Braunschweig,
D-3300 Braunschweig, Bundesrepublik Deutschland

^b Institut für Anorganische Chemie, Technische Universität Graz,
A-8010 Graz, Österreich

(Eingegangen 8. Oktober 1979. Angenommen 28. November 1979)

*Model Type Calculations of Force Constants for Tetramethyl Derivatives
 $(\text{CH}_3)_{4-n}\text{M}(\text{CD}_3)_n$, $M = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$*

From the experimental fundamental vibrational frequencies of $(\text{CH}_3)_4M$, $(\text{CD}_3)_4M$ and $(\text{CH}_3)_3M\text{CD}_3$, $M = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$, and of $(\text{CH}_3)_2\text{Si}(\text{CD}_3)_2$ and $\text{CH}_3\text{Si}(\text{CD}_3)_3$ a transferable local symmetry type force field for $(\text{CH}_3)_{4-n}M$ groups has been calculated. Applications involving different M atoms and numbers n of CH_3 groups are presented.

(*Keywords: Force constants, calculations; Tetramethyl compounds, deuterated*)

Einführung

Methyl-Verbindungen der Hauptgruppenelemente $M = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$ und Pb besitzen große wissenschaftliche und technische Bedeutung. Bei der Deutung der Schwingungsspektren von Verbindungen, die $(\text{CH}_3)_{4-n}M$ -Gruppen, $n = 1-3$, enthalten, ist es nicht nur bisweilen schwierig, in den IR- und Raman-Spektren die inneren CH_3M -Schwingungen von den Schwingungen des Molekülrestes zu unterscheiden, sondern es kommt auch zu gegenseitigen Beeinflussungen, die bewirken, daß sowohl die CH_3M - als auch die übrigen Schwingungen außerhalb ihres Erwartungsbereiches liegen. Dies kann zu Fehlinterpretationen Anlaß geben.

Die heute allgemein gegebene Möglichkeit der rechnerunterstützten Normalkoordinatenanalyse (NCA) macht es wünschenswert, für

$(\text{CH}_3)_{4-n}M$ -Gruppen über ein LSFF-Typ-Kraftfeld³ zu verfügen, das folgende Eigenschaften besitzt:

1. Simulation der Grundschnwingungsfrequenzen der $(\text{CH}_3)_{4-n}M$ -Gruppe und Anpaßbarkeit an die Meßwerte durch geringfügige, sicher konvergierende Variation der Diagonal-Symmetriekraftkonstanten des $(\text{CH}_3)_{4-n}M$ -Blocks.

2. Zuverlässig reproduzierbare Berechnung der Kraftkonstanten von Bindungen zwischen M und anderen M -Substituenten auch ohne Zusatzdaten durch Ankopplung eines „Fremdblocks“ an den $(\text{CH}_3)_{4-n}M$ -Block über das oder die gemeinsamen Diagonalelemente der F -Matrix sowie Nebendiagonalelemente, die entweder null oder parametrisiert sind.

3. Möglichkeit der Verfeinerung dieser Ankopplung über Nebendiagonalelemente, sofern geeignete Zusatzdaten verfügbar sind.

4. Qualitative und quantitative Wiedergabe der Kopplungsverhältnisse über die Potentialenergeverteilung (PED).

Diesen Forderungen liegt die Überlegung zugrunde, daß die Symmetriekraftkonstanten von $(\text{CH}_3)_{4-n}M$ -Blöcken, speziell die Nebendiagonalglieder F_{ij} ($i \neq j$), relativ konstant sein sollten.

Für die Aufstellung solcher Blöcke innerer Kraftkonstanten der $(\text{CH}_3)_{4-n}M$ -Gruppen erscheinen uns die Tetramethyl-Verbindungen geeignet, da es eine weitere zwingende Forderung an das gesuchte Kraftfeld ist, auch die Grundschnwingungen aller deuterierten Spezies $MC_4H_mD_{12-m}$ wiederzugeben. Wir haben den umgekehrten Weg beschritten und sind so vorgegangen, daß wir aus den vorstehend beschriebenen Schwingungsspektren⁴ verschieden deuterierter Tetramethyl-Verbindungen für $M = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$ und Pb Minimalsätze experimentell fundierter innerer und Symmetrie-Kraftkonstanten bestimmt haben, welche nach den genannten Kriterien auf verwandte Moleküle übertragbar sind. Hierfür werden Beispiele gegeben.

Die Verwendung von H/D-Isotopenverschiebungen zwingt zu Korrekturen, die durch die unterschiedliche Anharmonizität bedingt sind. Dies kann etwa so geschehen, daß dem D-Atom eine geringere als die tatsächliche Masse zugeordnet wird, oder daß alle H- und/oder D-Frequenzen mit festen Faktoren korrigiert werden⁵. Hier muß dann zwischen unterschiedlichen Schwingungsformen, etwa $\nu\text{CH}/\delta\text{CH}$ unterschieden werden, für die folgende Korrekturfaktoren angegeben werden:

$$X = 0,04 [\nu(\text{CH})]; 0,02 [\delta(\text{CH})]; X(\text{H})/X(\text{D}) \text{ nach } \text{Dennison}^6.$$

Unterschiede zwischen $\delta_{\text{as}}(\text{CH}_3/\text{CD}_3)$ und $\rho(\text{CH}_3/\text{CD}_3)$ -Schwingungen bleiben unberücksichtigt.

Das von uns verfolgte Ziel, einen universell einsetzbaren Kraftkon-

Tabelle 1. Kraftkonstantenblöcke für $(CH_3)_{4-n}MR_n$ -Moleküle und ihre Definition

CH_3MR_3

a_1					e						
A_1	A_{12}				B_1	B_{12}	B_{13}				
	A_2	A_2Z	A_2V			B_2	B_{23}				
= A		Z	ZV	ZT	= νMC	= B		B_3U	B_3T	B_3W	
			V	VT	= $\nu_s MR_3$			U	UT	UW	= $\nu_{as} MR_3$
				T	= $\delta_s MR_3$				T	TW	= $\delta_{as} MR_3$
								W		= ρMR_3	

$(CH_3)_2MR_2$

a_1					a_2						
A		A_2Z	A_2V			C_1	C_{12}	C_{13}			
	B	B_3Z	B_3X	B_3V	B_3T		C_2	C_{23}			
		Z	ZX	ZV	ZT	= $\nu_s MC_2$		C_3	C_3W		
			X	XV	XT	= δMC_2	= C			W	= δRCM
			V	VT	= $\nu_s MR_2$						
				T	= δMR_2						

$(CH_3)_2MR_2$

b_1					b_2					
C	C_3U	C_3W				A	A_2Y			
	U	UW	= $\nu_{as} MR_2$		B		B_3Y	B_3W		
		W	= δRCM				Y	YW	= $\nu_{as} MC_2$	
						W		= δRCM		

$(CH_3)_3MR$

a_1					e								
A	B	A_2Z	A_2V			A	A_2Y						
		B_3Z	B_3X	B_3V			B	B_3Y	B_3X	B_3W			
		Z	ZX	ZV	= $\nu_s MC_3$			C	C_3Y	C_3X	C_3W		
			X	XV	= $\delta_s MC_3$				Y	YX	YW	= $\nu_{as} MC_3$	
			V	= νMR			X	XW	= $\delta_{as} MC_3$				
								W	= ρMC_3				

Tabelle 1 (Fortsetzung)

$$(CH_3)_4M$$

a_1		e	f_2		
A	A_2Z	B	B_3X	A	A_2Y
	$Z = \nu_s MC_4$		$X = \delta MC_4$	B	$B_3Y \quad B_3X$
					$Y \quad YX = \nu_{as} MC_4$
					$X = \delta MC_4$

Tabelle 2. Symmetriekraftkonstanten ($10^2 N/m$) der CH_3 -Blöcke A—C für $(CH_3)_{4-n}M$ -Verbindungen

	Si	Ge	Sn	Pb
$A_1 = F(\nu_s CH_3)$	4,862	4,903	4,927	4,93
$A_2 = F(\delta_s CH_3)$	0,484	0,469	0,438	0,42
$B_1 = F(\nu_{as} CH_3)$	4,704	4,754	4,773	4,833
$B_2 = F(\delta_{as} CH_3)$	0,51	0,50	0,526	0,519
$B_3 = F(\rho CH_3)$	0,479	0,457	0,41	0,416
$C_1 = F(\nu_{as} CH_3)$	4,704	4,754	4,773	4,833
$C_2 = F(\delta_{as} CH_3)$	0,51	0,50	0,526	0,519
$C_3 = F(\rho CH_3)$	0,38	0,380	0,356	0,356
A_{12}	0,049	0,049	0,049	0,049
$B_{12} = C_{12}$	—0,076	—0,076	—0,076	—0,076
$B_{13} = C_{13}$	0,076	0,076	0,076	0,076
$B_{23} = C_{23}$	0,022	0,022	0,022	0,022

stantenblock zu finden, jedoch nicht CH-Kraftkonstanten mit letzter Genauigkeit zu berechnen, läßt sich ohne Korrekturen erreichen, wenn man für CH- und CD-Kraftkonstanten unterschiedliche Werte annimmt. Folgende Beziehungen werden im folgenden verwendet:

$$\begin{aligned}
 f(\nu_{as} CD_3) &= f(\nu_{as} CH_3) + 0,1 \quad 10^2 N/m \\
 f(\nu_s CD_3) &= f(\nu_s CH_3) + 0,15 \quad 10^2 N/m \\
 f(\delta_{as}, \delta_s, \rho CD_3) &= f(\delta_{as}, \delta_s, \rho CH_3) + 0,0095 \quad 10^2 N/m
 \end{aligned}$$

Berechnungen der Kraftkonstanten von Tetramethyl-Verbindungen der Elemente der 4. Hauptgruppe wurden schon häufiger durchgeführt⁷⁻⁹. *Watarai*¹⁰ verwendete ebenfalls Daten der d_{12} -Verbindungen. Über Rechnungen an $(CH_3)_3SiR$ -Modellen einschließlich d_9 -Spezies wird in¹¹⁻¹⁴ berichtet.

Tabelle 3. Auf 100 (pm) normierte, von null verschiedene Kraftkonstanten des C_4 - MR_n -Teils der Tetromethylverbindungen.

	CH_3SiR_3	$(CH_3)_2SiR_2$	$M = Si$	$(CH_3)_3MR$	Pb	$M = Si$	Ge	Sn	Pb
A_2Z	-0,24	-0,24	-0,24	-0,218	-0,207	-0,24	-0,218	0,207	-0,207
A_2Y			-0,24	-0,218	-0,207	-0,24	-0,218	0,207	-0,207
A_2V	-0,24	-0,24	-0,24	-0,218	-0,207	-0,24	-0,218	-0,207	-0,207
B_2Y	0	0	0,055	0	0	0	0	0	0
B_3X	0	0							
$C_{3v}a_1$			-0,123	-0,108	-0,095				
$C_{3v}e$			0	0	0				
$T_{2g}e, f_2$						0,065	0,055	0,033	0,022
B_3W	0	0	0,055	0	0				
C_3Y			-0,055	0	0				
C_3X			0,055	0	0				
ZX	0,11	0,132	0,170	0,119	0,109				
ZV		0,16	0,11	0,07	0,04				
ZT	-0,283	-0,132							
YX			-0,245	-0,168	-0,152	0,321	0,238	0,218	0,161
YW		0,245	0,245	0,168	0,152				
XW			-0,053	0	0				
XV		-0,132	-0,283	-0,198	-0,185				
XT		0,053							
WU	0,245	0,245							
WT	-0,053								
VT	0,170	0,132							
UT	-0,245								

Tabelle 4. Berechnete Grundschiebungsfrequenzen (cm^{-1}) der Molekule

$\nu_i, i =$	$(\text{CH}_3)_4\text{Si}$	$(\text{CD}_3)_4\text{Si}$	$(\text{CH}_3)_4\text{Ge}$	$(\text{CD}_3)_4\text{Ge}$	$(\text{CH}_3)_4\text{Sn}$	$(\text{CD}_3)_4\text{Sn}$	$(\text{CH}_3)_4\text{Pb}$	$(\text{CD}_3)_4\text{Pb}$
1	2901	2118	2913	2124	2920	2128	2920	2128
2	1267	996	1250	980	1204	939	1172	909
3	592	530	561	503	508	459	465	424
4								
5	2962	2225	2978	2236	2983	2239	3002	2252
6	1427	1039	1414	1030	1442	1051	1438	1049
7	853	660	827	637	771	596	768	583
8	197	170	185	160	147	128	129	114
9								
10								
11								
12								
13	2962	2224	2978	2235	2983	2237	3002	2252
14	2901	2116	2913	2124	2920	2128	2920	2127
15	1429	1041	1414	1030	1442	1041	1438	1049
16	1265	993	1248	976	1203	936	1172	907
17	902	762	835	653	777	592	769	583
18	701	609	603	548	530	485	476	438
19	242	210	194	171	146	128	121	108
20								
21								
22								
23								
24								
25								
26								
27								
28								
29								

Rechenergebnisse

Die im folgenden in Tabellenform niedergelegten und übertragbaren Kraftkonstanten beziehen sich auf den FG-Formalismus; die Kraftkonstanten sind auf 100 pm abstandsnormiert und haben die Einheit 10^2N/m ($= \text{mdyn}/\text{\AA}$). Die G -Matrizen wurden, von den Symmetriekoordinaten nach ⁹ (T_d), ¹⁵ (C_{3v}) und ¹⁶ (C_{2v}) ausgehend, mit Hilfe eines Rechenprogramms¹⁷ aufgestellt. Folgende geometrische Daten fanden Verwendung:

$d(\text{CH})$ 109 pm, $d(\text{SiC})$ 188,8, (GeC) 198, (SnC) 218, (PbC) 230,2 pm, alle $\times 109^\circ 28'$ ¹⁸.

Bei der Rückverrechnung der ν_i 's (ggf. durch iterative Verfahren) aus G - und vorgegebenen F -Matrizen sind wir so vorgegangen, daß wir, bei

$(\text{CH}_3)_4M$, $(\text{CD}_3)_4M$, $(\text{CH}_3)_3M\text{CD}_3$ sowie $(\text{CD}_3)_2\text{Si}(\text{CH}_3)_2$ und $(\text{CD}_3)_3\text{SiCH}_3$

$(\text{CH}_3)_3\text{SiCD}_3$	$(\text{CH}_3)_3\text{GeCD}_3$	$(\text{CH}_3)_3\text{SnCD}_3$	$(\text{CH}_3)_3\text{PbCD}_3$	$(\text{CD}_3)_3\text{SiCH}_3$	$(\text{CD}_3)_2\text{Si}(\text{CH}_3)_2$	$\nu_i, i =$	
2967	2978	2983	3001	2226	2966	30	801
2901	2913	2920	2920	2112	2901	31	616
2112	2124	2128	2127	2901	2226	32	669
1429	1414	1442	1438	1041	2112	33	228
1267	1249	1204	1172	998	1430	35	2967
996	977	937	907	1266	1266	36	2901
899	835	777	769	636	1042	37	2226
674	581	518	469	546	995	38	1429
576	530	476	432	778	848	39	1265
239	193	145	121	213	623	40	1039
					712	41	843
					556	42	580
					230	43	740
					182	44	217
					2966		
2967	2978	2983	3002	2226	2225		
2967	2978	2983	3002	2226	1423		
2901	2913	2920	2920	2113	1039		
2226	2236	2239	2252	2967	739		
1428	1415	1449	1438	1040	562		
1422	1409	1439	1435	1038	185		
1265	1248	1197	1172	999			
1042	1032	1053	1050	1430			
841	825	770	765	642	2966		
789	767	721	714	593	2226		
625	620	574	573	841	2112		
716	587	533	477	683	1423		
235	181	150	129	180	1041		
197	175	133	111	224	995		

jeweils exakter Frequenzanpassung an die h_{12} -Verbindungen, die Nebendiagonalglieder in sinnvollen Grenzen so variiert haben, daß die Grundschnwingungen der deuterierten Verbindungen möglichst genau wiedergegeben wurden.

Die Übertragbarkeit der Kraftkonstanten, in den Teilblöcken A, B und C zusammengefaßt, bezieht sich bei CH_3 -Schwingungen sowohl auf innere als auch auf Symmetriekraftkonstanten. Dies beinhaltet, daß Fernwechselwirkungen null sind. Bei den Gerüstschwingungen der $MC_{4-n}R$ -Einheit bezieht sich die Gleichheit im MC_n -Teil auf innere Kraftkonstanten. Gleichbenannte Symmetriekraftkonstanten in den Tab. 1 und 3 der $C_{4-n}MR_n$ -Einheit für unterschiedliche n und damit Punktgruppen sowie Rassen weichen folglich voneinander ab, da sie unterschiedliche Linearkombinationen von inneren und Wechselwir-

kungs-Kraftkonstanten sind. Für d -Verbindungen gelten die bereits erwähnten Zuschläge zu den Diagonalkraftkonstanten A_i , B_i und C_i .

Die für die unterschiedlichen n der Spezies $(\text{CH}_3)_{4-n}\text{MR}_n$ zusammengestellte Notation der Kraftkonstantenblöcke (Tab. 1) besteht aus jeweils identischen Teilblöcken A, B und C der CH_3 -Gruppen sowie einem weiteren Teilblock des $\text{C}_{4-n}\text{MR}_n$ -Teiles, der von der Natur von R abhängig ist. Der B-Block entspricht Symmetriekoordinaten vom Typ $\frac{1}{\sqrt{6}}(2\Delta r_1 - \Delta r_2 - \Delta r_3)$, der Block C vom Typ $\frac{1}{\sqrt{2}}(\Delta r_2 - \Delta r_3)$. Werte für die Teilblöcke A, B und C sind in Tab. 2 zusammengestellt. Die Bedeutung der Symmetriekraftkonstanten ergibt sich aus den Symmetriekoordinaten in üblicher Weise nach¹⁹. Die mit T bis Z bezeichneten Symmetriekraftkonstanten des $\text{C}_{4-n}\text{MR}_n$ -Gerüsts, die bei mehratomigen Gruppen gegebenenfalls sinngemäß um die inneren R -Schwingungen erweitert werden können, sind zum einen symmetriabhängig (s. o.). Zum anderen beeinflußt die Natur von R auch die Kraftkonstanten des C_{4-n}M -Teiles: allgemein steigen mit zunehmender Elektronegativität von R die Kraftkonstanten an. Tab. 3 gibt für $(\text{CH}_3)_{4-n}\text{MR}_n$ -Verbindungen für $R = \text{CD}_3$ gültige Werte für $T - Z$ bzw. für einige Nebendiagonalelemente wieder. Allgemein können solche Nebendiagonalelemente in erster Näherung gleich Null gesetzt, oder aber besser von verwandten Molekülen übertragen werden, wobei für F_{ij} eine Relation $A \sqrt{F_{ii}F_{jj}}$ gewählt werden kann²⁰. In günstigen Fällen können auch Zusatzdaten (Isotopenshifts etc.) herangezogen werden. Die Wechselwirkungen der Teilblöcke A, B und C mit dem Molekülrest sind ebenfalls aufgenommen.

Tab. 4 gibt die mit den in den Tab. 2 und 3 aufgeführten Kraftkonstanten nach Muster von Tab. 1 berechneten Grundschiebungen der verschieden deuterierten Tetramethyl-Verbindungen wieder. Der Vergleich mit den beobachteten Werten⁴ zeigt eine gute Übereinstimmung.

Die mittlere Abweichung $\frac{1}{n} \sum \left| \frac{\Delta v}{v} \right| \left(= \left| \frac{\tilde{\Delta v}}{v} \right| \right)$ beträgt 0,9%.

Potentialenergieverteilung (PED)

Die Schwingungen von νCH_3 und δCH_3 sind weitgehend charakteristisch. Tab. 5 gibt die PED für die übrigen Schwingungen der Tetramethylsilane mit der Notation von Tab. 1 aus⁴ wieder, sofern diese im wesentlichen Umfang gemischt sind. Mit zunehmender M -Masse entmischen sich die Schwingungen. Es ist klar erkennbar, daß die $\rho(\text{CH}_3)$ -Schwingung beträchtlich mit Gerüstschwingungen gemischt ist. In der Beherrschung der Kopplungen mit $\rho(\text{CH}_3)$ liegt der wesentliche Vorteil

Tabelle 5. Potentialenergieverteilung (PED)* $V(k)$ der Grundschwingungen der isotopen Tetramethylsilane ohne ν, δ (CH_3/CD_3) sowie Fälle, in denen der Anteil eines k -Wertes 80% übersteigt

$\nu_{\text{exp.}}$	$(\text{CH}_3)_4\text{Si}$	$\nu_{\text{exp.}}$	$(\text{CD}_3)_4\text{Si}$	$\nu_{\text{exp.}}$	$(\text{CD}_3)_3\text{Si}(\text{CH}_3)_3$	$\nu_{\text{exp.}}$	$(\text{CD}_3)_2\text{Si}(\text{CH}_3)_2$	$\nu_{\text{exp.}}$	$(\text{CD}_3)_3\text{SiCH}_3$
868,9:	74(17) + 12(18)	748,5:	44(17) + 37(18)	843:	76(7)	625:	70(10) + 23(11)	625,0:	48(7) + 44(9)
	594:	51(18) + 38(17)	661:	44(8) + 48(9) + 10(7)	714,8:	50(11) + 21(10) + 23(12)	540,7:	75(8) + 10(9)	
			570:	49(9) + 40(8)	553,0:	60(12) + 24(11)	768,7:	50(9) + 34(7) + 9(8) + 8(10)	
			772:	73(25) + 18(27)	227,5:	78(13) + 28(14)	608,5:	68(25) + 15(27)	
			692:	76(27) + 9(26) + 15(25)	181:	69(14) + 22(13)	688,4:	73(27) + 15(25)	
			189:	70(28) + 42(29) + 6(24)	815,5:	66(30) + 16(32) + 6(33)	172:	78(28) + 13(25) + 31(29)	
			228,4:	63(29) + 33(28) + 9(25)	642,8:	72(31) + 22(32)	217,0:	71(29) + 7(24) + 7(25) + 22(28)	
					686,6:	48(32) + 25(30) + 20(31)			
					584,1:	78(42) + 13(43)			

* $V(k) = F_{\text{dia}} \cdot L_{kk}^2 \cdot 100 / \sum_{ij} F_{ij} L_{ijk} L_{ijk}$

des von uns beschriebenen Rechenverfahrens. In besonderer Weise treten Mischungen bei den niedrig energetischen Deformationen des $C_{4-n}MR_n$ -Systems auf. Hier stellt die NCA die einzig solide Zuordnungsgrundlage dar.

Anwendungen

Zur Überprüfung der Anwendbarkeit des vorgeschlagenen LSFF für Methylverbindungen der Elemente der IV. Hauptgruppe haben wir drei Verbindungen einschließlich ihrer deuterierten Analoga ausgewählt, die eingehend schwingungsspektroskopisch untersucht wurden. Hierbei variierten sowohl die Zahl n der CH_3 -Gruppen, als auch die Eigenschaften und Zahl der Substituenten R . Im einzelnen handelt es sich um $(CH_3)_6Si_2^{14}$, $CH_3GeI_3^{21}$ und $(CH_3)_3SnCF_3^{22}$. Die mittleren Abweichungen $|\tilde{\Delta}_v|$ (cm^{-1}) sowie $\left| \frac{\tilde{\Delta}_v}{\nu} \right|$ (%) zwischen experimentellen und als Ausgangslösung berechneten sowie nachiterierten Werten betragen:

	$ \tilde{\Delta}_v $ (exp.-ber.)	$\left \frac{\tilde{\Delta}_v}{\nu} \right $ (exp.-ber.)	$ \tilde{\Delta}_v $ (exp.-it.)	$\left \frac{\tilde{\Delta}_v}{\nu} \right $ (exp.-it.)
$(CH_3)_6Si_2$	16,9	1,7	0	0
$(CD_3)_6Si_2$	17,9	2,9	11,8	2,2
CH_3GeI_3	8,7	2,3	0	0
CD_3GeI_3	8,7	2,7	2,5	0,5
$(CH_3)_3SnCF_3$	15,2	1,74	0	0
$(CD_3)_3SnCF_3$	10,2	2,0	4,3	0,7

Literatur

- 1 Neue Anschrift: FB 9 — Anorganische Chemie, Gesamthochschule, Gaußstraße 20, D-5600 Wuppertal 1, Bundesrepublik Deutschland.
- 2 Korrespondenzautor, Institut für Anorganische Chemie, Technische Universität, Stremayrgasse 16, A-8010 Graz.
- 3 T. Shimanouchi, in Physical Chemistry, An Advanced Treatise, Vol. IV. New York: Academic Press. 1970.
- 4 S. Biedermann, H. Bürger, K. Hassler und F. Höfler, Mh. Chem. **111**, 703 (1980).
- 5 D. C. McKean, S. Biedermann und H. Bürger, Spectrochim. Acta **30 A**, 845 (1974).
- 6 J. L. Duncan, D. C. McKean und G. K. Speirs, Mol. Phys. **24**, 553 (1972).
- 7 H. Siebert, Z. anorg. allg. Chem. **268**, 177 (1952).
- 8 I. F. Kovalev, Optics and Spectroscopy **6**, 387 (1959).
- 9 K. Shimizu und H. Murata, J. Mol. Spectrosc. **5**, 44 (1960).
- 10 F. Watari, Spectrochim. Acta **34 A**, 1239 (1978).

- ¹¹ *A. N. Lasarew, K. Poiker und L. L. Schtschukowskaja*, Izv. Akad. Nauk SSSR, Neorg. Mater. **1967**, 2021.
- ¹² *A. N. Lasarew und K. Poiker*, Izv. Akad. Nauk SSSR, Neorg. Mater. **1967**, 1720.
- ¹³ *F. Höfler*, Z. Naturforsch. **27 a**, 760 (1972).
- ¹⁴ *F. Höfler*, Mh. Chem. **107**, 893 (1976).
- ¹⁵ *K. Shimizu und K. Murata*, J. Mol. Spectrosc. **4**, 201 (1960).
- ¹⁶ *K. Shimizu und H. Murata*, J. Mol. Spectrosc. **4**, 214 (1960).
- ¹⁷ *P. Pulay, G. Borossay und F. Torök*, J. Mol. Structure **2**, 236 (1965).
- ¹⁸ Tables of Interatomic Distances and Configuration in Molecules and Ions, Special Publication No. 11, Chemical Society, London (1958); *B. Beagley, J. J. Monaghan und T. G. Hewitt*, J. Mol. Structure **8**, 401 (1971); *W. F. Sheehan und V. Skomalev*, J. Amer. Chem. Soc. **74**, 39 (1952).
- ¹⁹ *E. B. Wilson, J. C. Decius und P. C. Cross*, Molecular Vibrations. New York: McGraw Hill. 1955.
- ²⁰ *H. J. Becher*, Fortschr. Chem. Forsch. **10**, 156 (1968).
- ²¹ *J. R. Durig, C. F. Jumper und J. N. Willis*, J. Mol. Spectrosc. **37**, 260 (1971).
- ²² *R. Eujen und H. Bürger*, Spectrochim. Acta, **35 A**, 1135 (1979).