

Ni-Si

1960

$\text{Ni}(\text{BrO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{NiSiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, VI-861
 $\text{NiSC}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, $\text{NiO}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{NiSeO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (Vi)

Piper T.S., Koertge H.,
J. Chem. Phys., 1960, 32, N2, 559-561.

Одновременные электронные и колебательные
переходы в спектрах гидратированного
иона двухвалентного никеля.

RA., 1960, N21, 83693 J

1961
VI-664

$\text{Ni}_3\text{Si}_2(\text{re})$

Pilstrom G.

Acta chem.scand., 1961, 15, N4, 893-902.

The crystal structure of Ni_3Si_2 with
some notes on Ni_5Si_2 .

RX., 1962, 18 168

10

Est/orig.

Ni Si_x

Golubev Yu. M.

1962

OK₂

Heats of formation and
the nature of the chemi-
cal bonds of the transition
metal silicides.

Zh. Fiz. Khim. 36, 1315 (1962)

C.A. 1962.57.9

10586i-10537a

(see Ca)

1962

VI-662

Ni_2SiO_4 , Ni_2GeO_4 (V i)

Tarte P., Ringwood A.E.

Nature, (Enge)., 1962, 193, N4819, 971-72.

Infrared spectrum of the spinels Ni_2SiO_4
 Ni_2GeO_4 and their solid solutions.

Est/orig.

RX, 1962, 23B140. J

M 1652

1963

1. (MXO_4 , M=Mg, Ni, Co, Fe, Mn, Ca)

$\text{M}\text{Ca}\text{XO}_4$, M = Mg, Co, Fe, Mn,

X = Si U Mn Ge

Tarte P.

Spectrochim. acta, 1963, 19, N 1, 25-47

Etude infra-rouge des orthosilicates
et des orthogermanates. II Structures
du type alvine et monticellite

PX., 1966, 125206

J

sil.post. ($\text{MSiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, ($\text{M}=\text{Ni}, \text{Mn}, \text{Fe}$), $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$,
 $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{MSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ($\text{M}=\text{Zn}, \text{Mg}$), $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$,
 $\text{CrCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$)

Nakagawa I., Shimanouchi T.

Spectrochim. acta, 1964, 20, N 3, 429-39

Infrared absorption spectra of aquo complexes
and the nature of co-ordination bonds.

PJF, 1966, 5D392

J.

Ni_2Si

Ni_5Si_2

$NiSi$

Ni_3Si

(3 only)

9 Д152. Исследование рентгеновских спектров никеля и кремния в их сплавах. Бартошевич Р. Д., Савченко Н. Д., Цветков В. П. Дослідження рентгенівських спектрів нікелю і кремнію в їх сплавах. «Укр. фіз. ж.», 1966, 9, № 4, 424—429 (укр.; рез. русск. англ.)

Исследованы рентгеновские $K\beta_{1x}$ -полоса Si и $K\beta_5$ и L_{III} -полосы Ni в сплавах Ni_2Si , Ni_5Si_2 , $NiSi$, Ni_3Si . Показано, что $K\beta_{1x}$ -полоса Si в сплавах смещается в коротковолн. сторону и форма ее переходит от кривой с явно выраженными двумя максимумами в чистом Si к кривой с одним острым пиком в сплаве Ni_5Si_2 . $K\beta_5$ и L_{III} -полосы Ni в сплавах и чистом Ni не изменяют формы и энергетич. положения. Различие в поведение крайних линий Ni и Si объясняется тем, что межатомные расстояния для Ni очень мало отличаются в сплавах от расстояний в чистом металле, в то время как для Si они претерпевают изменения от 2,35 Å в чистом Si до 3,72 Å в сплаве Ni_2Si .

1966

41-1966-92

И

Ni₃Si Борисов Р. Д., Савченко Н. Д., 1966
Шейков В. П.

Изв. выс. ш., 2, № 4, 424-429.

Исследования рентгеновских
спектров никеля и кремния
в их сплавах.



(см. № 2 Si).

NiSi Баринцев Р. Д., Савченко Н. Д., 1966
Цвейков В. И.

Укр. физ. ж., 9, № 4, 424-429.

Исследование рентгеновской
структуры никеля и кристаллических
сплавов.

(см. Ni₂Si).

NiSi₂ Бартошев Р. Д. Сав - 1966

ченко Н. Д.; Цвѣтков В. П.

Укр. физ. ж., 9, № 4, 424-429.

Исследование рентгеновских
спектров никеля и кремния
в их соединениях.

(см. NiSi₂).

$[Ni(H_2O)_6]SiF_6$ Крауцман Н. 1966
С.х. Акад. sci.,
263, N16, B922-4.

ИК, КР - спек-
трос

Спектр колебаний
кристаллов фторсиль-
катов.

III (см. $[Zn(H_2O)_6]SiF_6$)

FeSi, CoSi, NiSi (Do.) Kp) VI 6934/1969

Vander A.-M.A., McIntyre M.S.,
Drowart J.

Chem. Phys. Letters, 1969, 4, N4, 198-200 (a.m.)

Mass spectrometric determination of
the dissociation energies of the gaseous
molecules FeSi, CoSi and NiSi.

P.H. Xmas, 1970

105934

M. H. (dp)

1973

NiSi
NiSi₂

8 Б601. Структура ближнего порядка жидких силицидов никеля. Снежко О. М., Баум Б. А., Гельд П. В. «Изв. высш. учеб. заведений. Физика», 1973, № 10, 150—153

Структ.
Ближн.
порядка

Рентгеновским методом исследованы расплавы, соответствующие по составу стехиометрич. высшим силицидам никеля: NiSi (32,37% Ni) и NiSi₂ (48,19% Si). Обнаружено заметное различие кривых интенсивности рассеяния рентгеновских лучей этими расплавами, что свидетельствует о различии их строения. Вычислены функции радиального распределения атомов, определены наиболее вероятные межатомные расстояния и площади первых координац. пиков и проведено их сравнение с теор. расчетами по различным моделям. С. В. Парфенов

Х. 1974 N 8

Si-Ni

OTT. 4824

1975

Kerr J. A., et al.

(Do)

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

Ni Si Gingrich R. A., 1980

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

Do;

North-Holland Publishing
Company, 1980.

(есть отпечаток в  коробке отпечатков
Gingrich).

$NiSi$
 $NiSi_2$

1983

9 Б4239. Термическая и вызванная [облучением] ионами диссоциация $NiSi$ и $NiSi_2$, контактирующих с никелем. Thermal and ion-induced dissociation of $NiSi$ and $NiSi_2$ in contact with nickel. Hung L. S., Mayer J. W. «Thin Solid Films», 1983, 109, № 1, 85—92 (англ.)

Методами дифракции скользящих рентгеновских лучей, дифракции электронов и спектрометрии резерфор-

X. 1984, 19, N 9.

довского обратного рассеяния ионов He^{2+} с энергией 2,7 или 3,0 МэВ изучено поведение образцов NiSi (I) и NiSi_2 (II), напыленных на подложки из монокрист. Si и покрытых затем слоем Ni толщиной 1000 Å, при отжиге в вакууме $1 \cdot 10^{-7}$ мм и облучении ионами Ag^+ с энергией 260 и 480 кэВ при комн. т-ре. Показано, что отжиг при 300°C и облучение ионами Ag^+ приводит к превращению I и II в Ni_2Si , слой к-рого примыкает к Пв Ni. Отмечены подобия в поведении каждой из систем при отжиге и облучении. Эти подобия связаны с наличием термодинамич. сил в индуцированных ионным облучением р-циях и с зависимостью вызванной облучением миграции от присущих системам транспортных свойств.

Э. Г. Раков

$NiSi_2$

1984

101: 235805j Electronic structure of nickel silicide ($NiSi_2$).
Xu, Jianhua; Xie, Leiming; Xu, Yongnian (Shanghai Inst. Metall.,
Acad. Sin., Shanghai, Peop. Rep. China). *Wuli Xuebao* 1984,

33(10), 1480-4 (Ch). The electronic structure of $NiSi_2$ was calcd. by
using the self-consistent LMTO method. The result agrees well with
those from the ARUPS photoemission expt. and other calcs. The
change in the Ni electron configuration was found to be responsible
for the Ni $3p_{3/2}$ core level binding energy shift; the decrease of Ni 3d
electrons weakened the screening effect for the Ni 3p electrons. The
ionicity plays a minor role in the chem. bond.

рацем
фактрон.
структура

C. A. 1984, 101, N 26.

NiSi₂

1985

Xie Yongnian, Xie Jian-
hua, et al.

Ch 836,
meop.
pærim.

Wuli Xuebao 1985,
34(7), 860-5.

( cit. CoSi₂; III)

1988
NiSi Fingerich Kare A.,
Kingcade F.E. Jr.

ab initio High Temp.-High Pres.-
pacem, Sures 1988, 20(1),
Xues. 35-45.
CB836.

(ca. NiBe_2 ; III)

NiSi

Om 33128

1989

12 Б1033. Расчет никельсодержащих молекул псевдопотенциальным методом конфигурационного взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями. II. Электронное основное $^1\Sigma^+$ и 20 низколежащих возбужденных состояний молекулы NiSi. Pseudopotential MRD ci calculations of nickel-containing molecules. II. The electronic $^1\Sigma^+$ ground state and 20 low-lying excited states of the NiSi molecule / Haberlandt H., // Chem. Phys.— 1989.— 138, № 2—3.— С. 315—326.— Англ.

М.П.

Методом конфигурац. взаимодействия с учетом одного и двухкратных возбуждений относительно исходного набора конфигураций в приближении псевдопотенциала рассчитано 21 низколежащее состояние молекулы NiSi в обл. расстояний 3—5 ат. ед. с мультиплетностью 1—5 и $\Lambda=0-3$. Приведены вертикальные энергии переходов, r_e , ω_e . Найдено, что основное состояние имеет тип симметрии $^1\Sigma^+$; для r_e , ω_e и μ_e получены оценки

X.1990, №12

4,23 ат. ед., 303 см^{-1} и $0,677 \text{ Д}$ соотв., $D_e = 1,89 \text{ эВ}$ (58% ст эксперим. значения). Отмечено, что хим. связь обусловлена в основном $4s\sigma-3p\sigma$ и $3d\pi-3p\pi$ взаимодействием атомов Ni и Si. Обсуждены проблемы выбора базиса МО, влияние суперпозиц. базисной и размерно-согласованной ошибок на результаты расчета.

П. В. Ганелин



NiSi

Om 33128

1989

6 Д126. Псевдопотенциальные MRD CI-расчеты никель-содержащих молекул. II. Основное электронное состояние Σ^+ и 20 низколежащих возбужденных состояний молекулы NiSi. Pseudopotential MRD CI calculations of nickel-containing molecules. II. The electronic Σ^+ ground state and 20 low-lying excited states of the NiSi molecule / Haberland H. // Chem. Phys.— 1989.— 138, № 2—3.— С. 315—325.— Англ.

М.П.

Неэмпирическим методом конфигурац. взаимодействия с учетом всех однократно и дважды возбужденных по отношению к основной многодетерминантной ф-ции конфигураций в двухэкспоненц. базисе сгруппированных гауссовских ф-ций с использованием псевдопотенциалов Дьюранда—Бартелата (Barthelat J. C. et al. / Mol. Phys.— 1979.— 35.— С. 771) проведены расчеты основного ($^1\Sigma^+$) и двадцати низколежащих

ср. 1990, № 6

синглетных, триплетных и сикстетных Δ , Σ , Π и Φ состояний молекулы NiSi . Приведены полные электронные энергии, энергии переходов, потенц. кривые, спектроскопич. характеристики и оптимальные геометрич. параметры. Проведен анализ заселенностей по Малликену. Подробно обсуждается природа химич. связывания в основном и возбужденных состояниях. Библ. 27.

В. А. Корсунов

NiSi

1989

3 Д150. Молекулы никель — элемент IV группы:
NiC, NiSi, NiGe. The nickel-group IV molecules NiC,
NiSi, and NiGe / Shim I., Gingerich K. A. // Z. Phys.
D.— 1989.— 12, № 1—4.— С. 373—376.— Англ.

Методами ССП и КВ с учетом всех электронов рас-
считаны энергии основных и низколежащих возбуж-
денных состояний молекул NiC, NiSi и NiGe. Получе-
но, что основным состоянием всех молекул является
состояние типа $^1\Sigma^+$. Молекула NiC является сильно
полярной, химич. связь в этом соединении можно оха-

М.П.

② ⑦

ср. 1990, №3

рактизовать как тройную, возникающую из-за связывания $4s$ и $3d\pi$ -электронов атома Ni и $2p$ -электронов атома C . Низколежащие возбужденные состояния NiC коррелируют с состоянием 3F_g иона Ni^+ и состоянием 4S_u иона C^- . Химич. связь в молекулах $NiSi$ и $NiGe$ имеет сходный характер, ее можно описать как связь типа σ , возникающую в результате спаривания $4s$ -электрона атома Ni и $3p\sigma$ -электрона атома Si или $4p\sigma$ -атома Ge , и связь типа π , которая является результатом связывания $3d\pi$ -орбитали Ni и $p\pi$ -валентных орбиталей атомов Si или Ge . С. А. Богданова

NiSi

[OM. 32295]

1989

Shim I., Gingereck K.A.,

Исследования. Z. Phys. D. Atoms. Molecu-
электрон. les and Clusters, 1989,
состоян., 1224-1 - 1224-4,
ab initio расчет.

The nickel-group IV molecu-
les NiC, ● NiSi and NiGe.

Ni-SiH₃

1990

9 Д140. Псевдопотенциальные НИК-КВ расчеты никель-содержащих молекул. III. NiSiH₃ и NiAlH₃ как минимальные модели систем-носителей металла. Pseudopotential MRD calculations of nickel-containing molecules. III. NiSiH₃ and NiAlH₃ as minimum models of metal-support systems / Haberlandt Helmut, Pacchioni Gianfranco // Chem. Phys.— 1990.— 142, № 3.— С. 369—380.— Англ.

Методом НИК-КВ с использованием псевдопотенциалов рассчитаны поверхности потенц. энергии состояния X^2E в Ni-SiH₃ (I) и состояния X^3E в Ni-AlH₃ (II). Определены равновесные расстояния NiX, энергии диссоциации и колебательные частоты, равные соответственно: 4,31 ат. ед.; 2,03 эВ; 334 см⁻¹ (X=Si) и 4,68 ат. ед.; 0,67 эВ; 208 см⁻¹ (X=Al). Орбиталь σ -связи дважды заселена в I и однократно — в II. Т. обр., связь SiX слабее в II, чем в I. Исследованы эффекты ошибок, обусловленных суперпозицией и размерами базисов, в расчетах методом НИК-КВ. Прове-

М.П.

(H)

ср. 1991, № 9

Ni-AlH₃

дено сопоставление результатов с известными данными полуэмпирич. расчетов несколько больших кластерных моделей. Ч. 2 см. // J. Chem. Phys.— 1986.— 90.— С. 4322. Т. Д.



NiSiH₃

1990

№ 17 Б1078. Псевдопотенциальные расчеты никельсодержащих молекул многоссылочным методом конфигурационного взаимодействия с учетом двукратных возбуждений. Pseudopotential MRD CI calculations of nickel-containing molecules. III. NiSiH₃ and NiAlH₃ as minimum models of metal-support systems / Haberlandt Helmut, Pacchioni Gianfranco // Chem. Phys.— 1990.— 142, № 3.— С. 369—380.— Англ.

М.П.
Неэмпирическим методом ССП с использованием псевдопотенциала Дюрана—Бартела для остовных электронов Ni, Si и Al и двухэкспонентного базиса, дополненного поляризац. *d*-ф-циями, и многоссылочным методом конфигурац. вз-вия с учетом двукратных возбуждений проведены расчеты электронного строения и кривых потенциальной энергии X^2E состояния NiSiH₃ и X^3E состояния NiAlH₃. Рассчитанные длины связей Ni—X, энергии диссоциации и частоты колебаний Ni—X

(4)
X. 1991, № 17

равны 4,31 ат. ед., 2,03 эВ, 334 см⁻¹ и 4,68 ат. ед., 0,67 эВ, 208 см⁻¹ для X=Si и Al, соотв. Обсуждены причины большей прочности связи Ni—Si по сравнению со связью Ni—Al. Оценено влияние ошибки суперпозиции базисного набора и размерно-согласованной ошибки в методе КВ. Библ. 34. И. Н. Сенченя

NiSiH₃

1990

113: 46454f Pseudopotential MRD CI calculations of nickel-containing molecules. III. Nickel silicon hydride (NiSiH₃) and nickel aluminum hydride (NiAlH₃) as minimum models of metal-support systems. Haberlandt, Helmut; Pacchioni, Gianfranco (Cent. Inst. Phys. Chem., Acad. Sci. GDR, DDR-1199 Berlin, Ger. Dem. Rep.). *Chem. Phys.* 1990, 142(3), 369-80 (Eng). The potential energy curves of Ni-SiH₃X²E and Ni-AlH₃X³E are calcd. The equil. distances r_{NiX} , dissocn. energies D_e , and vibrational frequencies ω_e are 4.31 au, 2.03 eV, 334 cm⁻¹ (X = Si) and 4.68 au, 0.67 eV, 208 cm⁻¹ (X=Al), resp. An interfacial σ bonding orbital is established: it is doubly occupied in NiSiH₃ and singly occupied in NiAlH₃. Hence, in NiAlH₃ the NiX bond is weaker than in NiSiH₃. A qual. understanding of bonding features is possible already on the RHF level of calcn. in these cases. The effects of the basis set superposition error and of the size-consistency error in CI calcns. are estd. The results are discussed and compared with the findings of previous semi-empirical calcns. of somewhat larger cluster models of the interaction between catalytic active metallic particles and the insulating support materials SiO₂ and Al₂O₃.

pacchioni,
Cve, 2e, Do

(11) KI

C.A. 1990, 11.3, N6

NiAlH₃

NiSi

1990

113: 65637j Electronic states and nature of bonding of the molecule nickel silicide (NiSi) by all-electron ab initio HF-CI and CAS-SCF calculations. Shim, Irene; Gingerich, Karl A. (Chem. Dep., Tech. Univ. Denmark, Lyngby, DK-2800 Den.). Z. Phys. D: At., Mol. Clusters 1990, 16(2), 141-8 (Eng). All-electron ab-initio Hartree-Fock (HF), CI, and field CAS-SCF calcs. have been applied to investigate the low-lying electronic states of the NiSi mol. The ground state of the NiSi mol. is predicted to be $1\Sigma^+$. The chem. bond in the $1\Sigma^+$ ground state is a double bond composed of one σ and one π bond. The σ bond is due to a delocalized MO formed by combining the Ni 4s and the Si $p\sigma$ orbitals. The π bond is a partly delocalized valence bond, originating from the coupling of the $3d\pi$ hole on Ni with the $3p\pi$ electron on Si. Within the energy range 1 eV, 18 electronic states have been identified. The lowest lying electronic states have been characterized as having a hole in either the $3d\pi$ or the $3d\delta$ orbital of Ni, and the resp. final states are formed when either of these holes are coupled to the $3p\pi$ valence electron of Si.

параметры
температуры
составов

C.A. 1990, 113, N 8

NiSi

1990

7 12 Д139. Исследование электронных состояний и природы связи в молекуле NiSi с помощью расчетов с учетом всех электронов методами ХФ-КВ и ПАКССП. Electronic states and nature of bonding of the molecule NiSi by all electron ab initio HF-CI and CASSCF calculations / Shim Irene, Gingerich Karl A. // Z. Phys. D.— 1990.— 16, № 2.— С. 141—148.— Англ.

Неэмпирическим методом Хартри—Фока с учетом конфигурац. взаимодействия (ХФ-КВ) и в модели полного активного пространства (ПАК) ССП в базисе гауссовых ф-ций $14s11p6d/12s9p1d$, сгруппированном в $8s6p3d/6s4p1d$, исследовано электронное строение NiSi (I) в основном и ряде возбужденных состояний. Показано, что основным является состояние ${}^1\Sigma^+$ с длиной связи 4,21 ат. ед., колебательной частотой 313 см^{-1} и энергией диссоциации 1,13 эВ. Приведены геометрические и энергетич. характеристики для возбужденных состояний, проведен анализ заселенностей по Малликену. Показано, что I обладает двойной связью (σ -связь осуществляется делокализованной МО, образованной $4s\text{-AONi}$ и $3p\sigma\text{-AOSi}$, а π -связь — $3p\pi\text{-AOSi}$ и $3d\pi$ -дыркой на Ni).

В. Л. Лебедев

М.П.

Ф. 1990, N 12

NiSi

1990

23 Б1026. Электронные состояния и природа связи в молекуле NiSi по неэмпирическим расчетам с учетом всех электронов методами ХФ—КВ и ССП ПАП. Electronic states and nature of bonding of the molecule NiSi by all electron ab initio HF—Cl and CASSCF calculations / Shim Irene, Gingerich Karl A. // Z. Phys. D. — 1990.— 16, № 2.— С. 141—148.— Англ.

С учетом всех электронов системы выполнены расчеты энергий и волновых ф-ций низших электронных состояний молекулы NiSi. Использованы сегментир. базисные наборы сгруппир. гауссовых ф-ций [8s6p3d] для Ni и [6s4p1d] для Si. Предварит. анализ волновых ф-ций различных состояний выполнен в приближении Хартри—Фока (ХФ), затем использованы подходы конфигурац. взаимодействия (КВ) и самосогласованного поля с многоконфигурац. ф-циями в полном активном пространстве (ССП ПАП). Найдено, что основным яв-

М.А.

Х. 1990, № 23.

ляется состояние $^1\Sigma^+$ с равновесным расстоянием 4,0—4,2 ат. ед., энергией диссоциации 1,1 эВ, основной частотой колебаний 300—400 см^{-1} . В пределах 1 эВ находятся 17 электронных состояний разного типа симметрии. Дана интерпретация связи в молекуле с использованием орбитальных представлений. А. В. Немухин



Ni SiH_2^+

1992

Lundani T.R., Gordon M.S.,

J. Phys. Chem. 1992,

96 (2), 638-6

непрямая
связь



(all. Sc SiH_2^+ ; π)

$NiSiN_2^+$

1992

Cundari Thomas R.,

Gordon Mark S.

J. Phys. Chem. 1992.

96, N 2. C. 631 - 636.

(cor. $ScSiN_2^+$; III)

АЛЕКСАНДР.
СИНДЕРС

NiSiH_2^+

1992

Cundari T. R.,
Gordon M. S.

meopern.
pacern

J. Phys. Chem. 1992. 96,
N 2. C. 631-636.

(Ces. ● ScSiH_2^+ ; III)

Ni(CO)_n SiO

(DM-37955)

1995

Dappich S., Pickens H.,
et al.,

(de)
neop.
parum

Chem. Phys. Lett.,
1995, 242, 521-526

NiSi

[Om. 41646]

2003

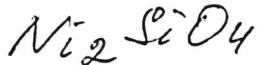
Ned F. Lindholm, Dale
J. Bugh et al.,

J. Chem. Phys., 2003,
118, N 5, 2190-2196.

Optical spectroscopy of

jet - cooled NiSi^c





2000

F: Ni_2SiO_4 (ΔG_f)
P: 1

02.10-19БЗ.4. Определение стандартных молярных свободных энергий Гиббса образования силикатов кобальта и никеля посредством гальванических элементов твердым электролитом, включавшим композит на основе CaF_2 . Determination the standard molar gibbs free-energies of formation of the silicates of cobalt and nickel by solid-state galvanic cells involving the CaF_2 -based composite electrolyte / Rog G., Kozłowski A., Bucko M., Glowacz E. // J. Chem. Thermodyn. - 2000. - 32, N 7. - С. 931-935. - Англ.

Стандартные молярные свободные энергии Гиббса образования Co_2SiO_4 и Ni_2SiO_4 определены с помощью гальванических элементов с твердым электролитом в интервале температур 823-1273 К. В качестве твердого электролита использовался композит на основе CaF_2 . Полученные результаты сравнены с литературными данными.