

Si-0

Si-O

Smith J.V.

1954

charge

Acta Cryst. 7, 479-81

Обзор по Al-O и Si-O

расстояниям;

$$r_{\text{Si-O}} = 1.60 \pm 0.01 \text{ \AA}$$

CA 48

12503a

Si-O chg

1960

r) Organosilicon compounds. XX. Determination of the basicity of the silicon-bound oxygen by infrared spectroscopy. M. Horák, V. Bažant, and V. Chvalovský (Ústav org. chemie a biochemie ČSAV, Prague). *Collection Czechoslov. Chem. Commun.* 25, 2822-30(1960)(in German); cf. *CA* 54, 24478a.—The formation of the H-bond between various proton donors and isostructural alkyl ethers, alkoxysilanes, and siloxanes was studied. The basicity of the O atoms decreases in the series of groups: COC, COSi, and SiOSi; this effect is attributed to the partial formation of the multiple bond in the SiO group. The induction and steric effects of alkyl groups on H-bond formation were studied.
E. Erdős

C.A.1961.55.5.4082ghv

Si-O

связь

1961

24Б374. К вопросу о природе связей Si — O и межатомных расстояниях в силикатах. Лазарев А. Н. «Ж. общ. химии», 1961, 31, № 12, 4061—4062.— Утверждается, что выводы работы М. Г. Воронкова (РЖХим. 1962, 3Б180) основаны на использовании устаревших или неверных эксперим. данных по межатомным расстояниям и поэтому не являются справедливыми.

Н. Степанов

X. 1962. 24.

$(\text{SiO})_n$

[Ommuck 563]

Hartie J.M., Hauge R.H.,
Margrave J.L.

$\nu_i,$
 $\bar{\nu}(n=1)$

Reactions and Structures
of Isolated SiO Species at
Low Temperatures from
Infrared Spectra.

III

Pandey, En - 4



Si-O
связь

24Б375. К вопросу о природе связей Si — O в силикатах. (В порядке дискуссии). Воронков М. Г. «Ж. общ. химии», 1962, 32, № 7, 2391—2392.—В ответ на критику А. Н. Лазарева (см. реф. 24Б374) теории кремне-кислородных связей в силикатах, развитой в статье автора (РЖХим, 1962, 3Б180), приведены дополнительные эксперим. данные по межатомным расстояниям для кратчайшей связи Si—O⁻ и длиннейшей мостиковой связи Si—O(—Si): в цоизите они равны 1,53 и 1,67; в тиллите 1,58 и 1,66; в миларите 1,56 и 1,66; в метасиликате натрия 1,57 и 1,68; в эпидоте 1,51 и 1,67; в гемиморфите 1,60 и 1,72 А. Эти данные, по мнению автора, подтверждают его теорию перекрывания p_{π} -орбит аннионного атома O и d_{π} -орбит Si, что ведет к увеличению порядка связи Si—O⁻; в отдельных случаях при длине связи $\sim 1,55$ А этот порядок может приближаться к двум (Si=O)⁻. При отсутствии значительного p_{π} — d_{π} -взаимодействия связь Si—O⁻ была

х. 1962. 24

см. реф.

бы длиннее связи $\text{Si} - \text{O} (-\text{Si})$ вследствие большего, чем у мостикового кислорода, радиуса ионизированного атома O^- и меньшей полярности первой связи. Возможности $p_\pi - d_\pi$ -взаимодействия в мостиковой связи очень малы из-за мощного электроотталкивающего эффекта анионных атомов O . Вследствие этого автор допускает в силикатах существование практически чистых σ -связей $\text{Si} - \text{O} (-\text{Si})$. А. Воронков

1963

Si-O

Robinson E. A.

Vi

Can. J. Chem. 41(12), 3021-33.

анал. нот.

кислоты.
соединения.

Characteristic vibrational frequencies of oxygen compounds of silicon, P and Cl: correlation of stretching frequencies and force constants with bond lengths and bond orders. (see P-6) III

8834 - BP - IV

1963

Si₃O₉, Si₄O₁₂, Si₆O₁₈ (mol.konst.)

Saksena D.D., Agarwal K.C.,

Jauhri G.S.

Trans. Faraday Soc., 1963, 59, N 2,
276-283

The ring band of ...



$\text{SiO}_2 + \text{Si}$

Джоварт з.

Оммуек
(81)

ном. нолв.

1964.

Si-O

частичной
колебательной
связи

Leconte F., Paullé A., 1964
Bochénioux - Morin C.,
Yelong B.

C. r. Acad. Sci, 1964, 258,
n° 1, 131.

О молекулярном строении
кварцевой формы соедине-
ний P_2O_5  SiO_2 и $P_2O_5 \cdot \overline{GeO_2}$

ж. 1964.16

(см. Ge-O) III

1967

Si-O

1 Д151. Динамические коэффициенты связей Si—O и их зависимость от природы заместителей при кремнии и кислороде. Лазарев А. Н., Пойкер Кр., Тенишева Т. Ф. «Докл. АН СССР», 1967, 175, № 6, 1322—1324

Проведен полный расчет частот и форм колебаний молекул типа R_3Si-OR' (в том числе с $R'=SiR_3$) с целью выяснения влияния природы заместителей на величины K_{SiO} . Были рассмотрены спектры следующих молекул: $(CH_3)_3SiOX$, где $X=CH_3, CD_3, H, D, Na, Si(CH_3)_3, Cl_3SiOCH_3, (CD_3)_3SiOSi(CD_3)_3, H_3SiOSiH_3, D_3SiOSiD_3, Cl_3SiOSiCl_3$. Использование молекул, содержащих при каждом атоме Si лишь одну связь Si—O, позволяло исключить из рассмотрения вопрос о взаим-

ф. 1968. 12



ном влиянии связей Si—O с общим атомом Si и ограничиться при интерпретации результатов учетом изменений электроотрицательности R и R'. Большая часть исследовавшихся соединений содержала группировку $(\text{CH}_3)_3\text{Si}$, поэтому был также исследован спектр $(\text{CD}_3)_3\text{SiCl}$, что позволило несколько уточнить набор постоянных потенц. энергии молекулы $(\text{CH}_3)_3\text{SiCl}$. Результаты расчета динамич. коэф. приведены в таблицах.

А. И. О.

1967

Si-O

(Pur. no.)

62855v The force constants of Si-O bonds and their dependence on the nature of substituents on silicon and oxygen. A. N. Lazarev, Kr. Poiker, and T. F. Tenisheva. *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 175(6), 1322-4(1967)(Russ). Complete calcn. of frequencies and vibration modes of Me_3SiOMe (I), $\text{Me}_3\text{SiOCD}_3$ (II), Cl_3SiOMe (III), Me_3SiOH (IV), Me_3SiOD (V), Me_3SiONa (VI), $\text{Me}_3\text{SiOSiMe}_3$ (VII), $(\text{CD}_3)_3\text{SiOSi}(\text{CD}_3)_3$ (VIII), $\text{H}_3\text{SiOSiH}_3$ (IX), $\text{D}_3\text{SiOSiD}_3$ (X), and $\text{Cl}_3\text{SiOSiCl}_3$ (XI) was carried out for detn. of the effect of substituents on Si and O on dynamic coeffs. of Si-O bonds, K_{SiO} . The following values of K_{SiO} and K^*_{SiO} (K^*_{SiO} is so-called independent dynamic coeff.; its meaning and method of calcn. were described by P. P. Shorygin and E. M. Popov (1964)) were found for $\text{R}_3\text{SiOR}'$ mols. (compd., K_{SiO} , and K^*_{SiO} in 10^6 cm.^{-2} given): III, 9.00, 8.23; I, II, 6.75, 6.17; IV, V, 7.20, 6.92; VI, 8.75, 8.66. For disiloxanes the following values of K_{SiO} , K^*_{SiO} , of the dynamic coeff., K_{SiOSi} , and of the coeffs. of the

C. A. 1968. 68. 14

mutual interaction of Si-O bonds with O atoms, $H_{\text{SiO}, \text{SiO}}$, were found (compd., K_{SiO} , K^*_{SiO} , $H_{\text{SiO}, \text{SiO}}$, K_{SiOSi} , and SiOSi angle given): VII, VIII, 7.55, 6.96, ~ 0 , 0.5-1.0, 135-140°; IX, X, 8.75, 8.17, ~ 0.5 , 0.2, 150°; XI, 9.60, 9.18, -1.0, 0-0.2, 160-170°. The increase of K^*_{SiO} by $\sim 33\%$ when passing from I to III can partly be explained by the change of polarity of σ bond. The change $\text{R}_3\text{SiOMe} \rightarrow \text{R}_3\text{SiSiR}_3$ causes the same ($\sim 13\%$) increase of K^*_{SiO} both for $\text{R} = \text{Me}$ and $\text{R} = \text{Cl}$. The order of Si-O bonds of VII, IX, and XI was detd. as 1.13, 1.33, and 1.49, resp., from K^*_{SiO} according to H. Siebert (1953)(1954). The increase of K^*_{SiO} in the order $\text{I} < \text{IV} < \text{VI}$ in the ratio 1.00:1.12:1.40 indicates the increase of electropositivity of H in comparison with Me group both bonded to the electroneg. O atom. $H_{\text{SiO}, \text{SiO}}$ increases and K_{SiOSi} decreases with increase of order of Si-O-Si bond; cumulated system of $(p \rightarrow d)_\pi$ bonds is formed. The increase of $H_{\text{SiO}, \text{SiO}}$ can probably be an objective measure of delocalization of π -electrons in the system Si-O-Si. L. Schanel

Si - O.

Май П.А.

1984

характеристически
связи

Изв. АН Латв ССР, Серия
хим., 1984, № 1, 506.

О корреляции некоторых
характеристических связей
кристаллов.

(см. Si - H) III

Si-O

chgs

1967

111530a Theory of silicon-oxygen tetrahedral bonding. Janine Pares and Charles Leenhardt (Fac. Sci., Montpellier, France). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. C* 264(25), 2027-9 (1967)(Fr). A calcn. of the bonding energy of Si-O gives 9 ev $\pm$ 10%, in agreement with exptl. values. Both a covalent term and an ionic term are contained in the wavefunction solved.

A. B. Carlson

C.A. 1967. 07. 24

Si-O

Maijs, L

1968

"Z. anorg. allgem. Chem",

(Chyb)

273, 1140, 1953,

Jensovskyi, "Z. Chem.", 2, 334, 1962
3, 453, 1963.

(corr. Si - F, III)

1968

Si-O
связь

V Д149. О силовой постоянной связи Si—O в молекуле трихлорметоксисилана. Пойкер Кр., Лазарев А. Н. «Изв. АН СССР. Неорганические материалы», 1968, 4, № 9, 1513—1516

Расчет колебательных частот молекулы $\text{Cl}_3\text{SiOCH}_3$ приводит к заключению о значительном увеличении коэф. динамич. взаимодействия связи Si—O по сравнению с молекулой $(\text{CH}_3)_3\text{SiOCH}_3$ и указывает на повышение порядка этой связи за счет $p\pi-d\pi$ -взаимодействия.

Сил. пос.
(Si-O)

ф. 1969. 1А

1969

 $(Si_3O_9)^{6-}$ $[SiO_4]^{4-}$

Vi

65043b Structure of the calcium silicate phase Z (Roy). Ovrachenko, N. A.; Govorov, A. A.; Lantukh, G. V. (Inst. Kolloid. Khim. Vody, Kiev, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1969, 186(2), 389-92 [Chem Technol] (Russ). Phase Z, present in products of hydrothermal treatment of calcic-siliceous mixts., was synthesized by D. M. Roy (1958). Roy detd. the compn. of phase Z as $9CaO \cdot 6SiO_2 \cdot H_2O$. Later, a mineral of the same compn., kilchoanite, was detected in nature (Agrell and Gay, 1961). Phase Z was detected by O., *et al.* (lines 3.06; 2.88; 2.84; 2.68 (2, 67); 2.55 (2.54); 2.48; 2.43 in x-ray diffraction patterns), in products of the hydrothermal treatment (48 hrs. at 250° and 500 atm.) of merwinite and glass contg. CaO 50, MgO 5, Al_2O_3 5, and SiO_2 50%. In the case of merwinite, phase Z formed even at 200° and was present with small admixts. of brucite and serpentine. The ir spectra of phase Z were taken. The spectrum of this phase in the region of Si-O

C.A. 1969. 71. 14

vibrations was considered as a result of the superposition of absorption bands from various Si-O groupings because of a relatively high CaO/SiO₂ ratio (1.5) in phase Z resulting in strong weakening of the interaction between the Ca-O bonds and various (SiO₄)⁴⁻ tetrahedra or more complex Si-O radicals. The bands of 435 (437); 580; 707 (708); 895 (893); 925 (930); 975 (984); 1015; and 1045 cm.⁻¹ are thus related to the Si-O vibrations of (Si₃O₉)⁶⁻ rings, and the 497 (486); 516; 560 (567); 845 (837, 855); and 953 (955) cm.⁻¹ bands to Si-O vibrations of isolated (SiO₄)⁴⁻ tetrahedra. Bands 3470 and 3553 cm.⁻¹ are evidently stretching vibrations of OH groups in Ca chondrodite, probably present as admixts. in the samples. Therefore, the structure of phase Z contains (Si₃O₉)⁶⁻ rings in addn. to isolated (SiO₄)⁴⁻ radicals with the absence of a noticeable amt. of pyrosilicate groups of (Si₂O₇)⁶⁻.

BLJR

1969

Si₂O₆

Venkateswarlu K.,
Natarajan A.

Chem. u.

J. chim. phys. et phys.-
Chim. Biol., 66 (7-8),
1318.

(Cu-Ge₂H₆)_{III}

1970

 SiO_3 SiO_4

расчет

 ν_i , см. ксф.

15 B65. Ограниченные нормальные колебания атомной системы с идентичными мотивами, связанными попарно общим атомом. Boillet Pierre. Modes limites d'un système atomique à motifs identiques liés deux à deux par un atome commun. «C. r. Acad. sci.», 1970, 270, № 7, B506—B509 (франц.)

Рассмотрен расчет частот нормальных кристаллич. решеток, построенных из группировок, XY_4 (напр., SiO_4 в силикатах). В кач-ве модели рассматривалось кольцо, построенное из шести тетраэдров SiO_4 , к-рое одновременно можно рассматривать построенным из шести элементов SiO_3 . Записывались системы 12 дифференциальных уравнений нормальных колебаний для каждого из шести элементов SiO_3 . На этом примере введено понятие ограни-

X. 1970. 15

ченного нормального колебания, отвечающего случаю, когда можно рассматривать нормальные колебания отдельных слабосвязанных (в пределе несвязанных) элементов SiO_3 . В результате применяемых приближений, а также вследствие симметрии рассматриваемой физ. модели возможна факторизация общей системы 72 дифференциальных уравнений. Вычислены частоты ограниченных нормальных колебаний и силовые коэф. элементов SiO_3 в рассматриваемой модели.

А. Александров

1970

Si₃O₉

19950p Vibrational spectra and chemical structure of complex ions and molecules of the X_3O_9 type. Ignat'ev, I. S.; Lazarev, A. N. (Inst. Khim. Silikat. im. Grebenshchikova, Leningrad, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1970, 191(3), 596-9 [Chem] (Russ). Cyclic mols. X_3O_9 formed by condensation of 3 tetrahedra XO_4 into a configuration each with 2 common and 2 free O atoms are known for Si, P, and S. Based on their known configurations, at. distances, and estd. force consts. of the X-O bonds, the vibrational frequencies were calcd. and compared with the exptl. detd. values for Si_3O_9 and P_3O_9 . The obtained force consts. indicate further that, for Si and P oxides, the condensation into the cyclic X_3O_9 configuration is more probable while for S and Cl the noncondensed XO_4 form is more stable.

Roman Mykolajewycz

Chem. H.

C. A. 1970. 13. 4.

+1

[X]

1970

 Si_3O_9

19 Б170. Анализ спектров силикатов и германатов с анионами $(\text{X}_3\text{O}_3)^{6-}$ с использованием метода квазинзотопического замещения. Лазарев А. Н., Игнатьев И. С. «Оптика и спектроскопия», 1970, 28, № 5, 971—973

Исследованы ИК-спектры тв. р-ров $\text{Sr}_3\text{Si}_3\text{O}_4$ — $\text{Sr}_3\text{Ge}_3\text{O}_9$ и показана возможность идентификации частот колебаний анионов Si_3O_9 , Si_2GeO_9 , SiGe_2O_9 , Ge_3O_9 . Расчет частот колебаний этих анионов позволил уточнить интерпретацию спектров и оценить силовые постоянные связи.

Резюме

+2

X. 1970. 19

[17]

1970

 Si_2O_3

113969y Structure analysis of thermal oxide films of silicon by electron diffraction and infrared absorption. Nagasima, Naoyuki (Semicond. Integrated Circuits Div., Hitachi, Ltd., Tokyo, Japan). *Jap. J. Appl. Phys.* 1970, 9(8), 879-88 (Eng). Electron diffraction data have been used to obtain the radial distribution functions of thermal oxide films of Si. Influence of multiple scattering of electrons on the intensity was taken into consideration, and a method of correcting for this effect is proposed. The Si-O, O-O, and Si-Si distances were detd. to be 1.62, 2.60, and 3.1 Å, resp. The angle of the Si-O-Si bond was estd. to be $147 \pm 10^\circ$. The shape of an ir absorption spectrum of the oxide film in a wave no. range between 400 and 1300 cm^{-1} was similar to that of fused silica. The at. arrangement in the film is a 3-dimensional random network consisting of SiO_4 tetrahedra. Such an at. arrangement is compared with that of fused silica. RCJD

C.A. 1970. 73. 22

Si-0

Nagaraj, Subbarao.

1971

(u.n.)

"From Diss. Abst. Int"

B, 1971, 32, N3, 1749-50.

(see Si-N, III)

SiO_m^{-n}

Bosch S.S.

1972

γHe

"Yen" (Esp) 1972, 32, N368,
153, 154, 154.

• All AlO_m^{-n} ; III

Si_nO_m

1972

(3 Б30.) Силовые постоянные и некоторые закономерности химической связи в тетраэдрических оксисоединениях элементов третьего периода: Si, P, S, Cl. Lazarev A. N. The force constants and some regularities of chemical bonding in the tetrahedral oxy—compounds of the second—row elements: Si, P, S, Cl. «Chem. Phys. Lett.», 1972, 15, № 4, 631—633 (англ.)

(с.н)

Из лит. данных по силовым постоянным оценены порядки связей для молекул X_nO_m с $X=Si, P, S, Cl$ ($1/4 \leq n/m \leq 1/2$). Показано, что средний порядок связи $X-O$ в неполярных соединениях X_nO_m одинаков, а в полярных соединениях с уменьшением отношения n/m средний порядок связи понижается, если $X=Si$ или P , и растет, если $X=S$ или Cl .

М. Р. Алиев

(+3) ☒

Х. 1973 №3

Cmpyner. (Chemical)

50917.3475

31603

1975

Ch, Ph, TC, MGU

$Si_3O_9^{2-}$ (vi) #4-9781

Choishet J., Desc^hhanvres A., Tarte P.
Spectres vibrationnels des silicates et
germanates renfermant des anneaux, M_3O_9
(M=Si, Ge)-I. Attribution des fréquences
caractéristiques de l'anneau M_3O_9 dans
les composés de type b^éntoite, wad^éite et
tétragermanate. "Spectrochim. Acta", 1975,
A31, N 8, 1023-1034

1976

 Si_3O_9 Ge_3O_9 Кибат.
спектр(41) ☒

9-1976 N 6

6 Д548. Колебательные спектры силикатов и германатов состава M_3O_9 ($\text{M}=\text{Si}, \text{Ge}$). Ч. II. Исследование колебательных спектров силикат-германатов со структурой бенитоита: доказательство существования смешанных колец GeSi_2O_9 и Ge_2SiO_9 . Choisset J., Deschavres A., Tarte P. Spectres vibrationnels des silicates et germanates renfermant des anneaux M_3O_9 ($\text{M}=\text{Si}, \text{Ge}$). II. Etude des spectres vibrationnels des silicogermanates de type benitoite: mise en évidence des anneaux mixtes (GeSi_2O_9) et (Ge_2SiO_9). «Spectrochim. acta», 1976, A32, № 1, 57—66 (франц.; рез. англ.)

При комнатной т-ре исследованы спектры ИК-поглощения в области $200\text{--}1200\text{ см}^{-1}$ кристаллич. порошков твердых растворов $\text{Ge}_3\text{O}_9\text{--Si}_3\text{O}_9$. Сопоставление полученных спектров со спектрами чистых кристаллов Si_3O_9 и Ge_3O_9 (структура бенитоита) позволяет пред-

положить существование смешанных колец GeSi_2O_9 и Ge_2SiO_9 . В спектрах поглощения твердых растворов в области $650\text{--}670\text{ см}^{-1}$ наблюдаются 2 полосы, одна из которых испытывает сдвиг 7 см^{-1} при изотопном замещении $^{28}\text{Si} \rightarrow ^{30}\text{Si}$, а 2-я сдвигается на 4 см^{-1} при замещении ^{70}Ge на ^{76}Ge . В спектрах ИК-поглощения чистых кристаллов эти линии отсутствуют. Высказано предположение, что наблюдаемые линии обусловлены валентными колебаниями в группах MOM_2 . Оценка вероятности образования колец различного состава в твердых растворах, выполненная на основании измерения относит. интенсивности линий ИК-поглощения, показывает, что распределение атомов Si и Ge в решетке бенитоита твердых растворов носит статистич. характер. Библи. 6. Ч. I см. РЖФиз, 1976, 1Д557. С. П.

SiO_x

1979

93: 13204q Structure and properties of silicon oxide (SiO_x).
I. Atomic-geometric, electronic, and phonon structures.
Huebner, K.; Zuther, G. (Sekt. Phys., Wilhelm-Pieck-Univ.
Rostock, Rostock, Ger. Dem. Rep.). *Phys. Halbleitoberflaeche*
1979, 10, 263-79 (Ger). A review with more than 13 refs.

93: 13205r Intensities of vibrational bands and molecular
electronic structure. Bruns, Roy E.; De Barros Neto, Benicio
(Inst. Quim., Univ. Estadual Campinas, Campinas, Brazil).
Quim. Nova 1978, 1(3), 6-8 (Port). A review with 6 refs.

H. A. Goldsmith

CA 1980 93 N2

Chemical &
Biological
(Ogden)

Ogden J.S.

1979

SiO_2

Si_2O_2

Si_3O_3

V_4O_{10}

KNO_3

NaPO_3

The characterization of high temperature molecules using matrix isolation and isotope line structure
10th Materials Research Symposium
on characterization of High temperature, Vapors and Gases.
NBS Special Publication 561
Volume 1, 1979, 511-522.

у зурбуря б-Коробукоо

Силикаты

1982

2 БЗ1. Молекулы как модели связывания в силикатах. Molecules as models for bonding in silicates. Gibbs G. V. «Amer. Miner.», 1982, 67, № 5-6, 421-450 (англ.)

Обзор. Рассматривается использование молекулярных моделей для изучения электронного строения сложных кристаллич. структур силикатов. Отмечено очень малое различие в строении дисилоксановой группировки $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$ в газофазных силоксановых молекулах и твердых силикатах. Кратко рассмотрен метод МО, обсуждены базисные ф-ции гауссовского типа. Приведены результаты расчетов геометрии и разностных карт электронной плотности (РКЭП) связей $\text{Si}-\text{O}$ в силикатных структурах с 4- и 6-координированными атомами кремния. Полученные результаты сопоставлены с эксперим. длинами связей и РКЭП для тв. силикатов. Рассчитанные длины $\text{Si}-\text{O}$ -связей в гипотетич. молекулах $\text{Si}(\text{OH})_4$, $(\text{HO})_3\text{SiOSi}(\text{OH})_3$ (I), $\text{Si}(\text{OH})_6^{2-}$, $\text{Si}(\text{OH})_4$ -

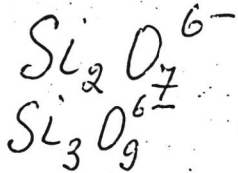
Электрон.
Строение
(обзор)

В

X. 1983, 19, № 2

$(\text{H}_2\text{O})_2$ и H_2SiO_6 хорошо согласуются с эксперим. данными для кристаллич. силикатов. Теор. и эксперим. РКЭП указывают на частично ковалентный характер связей $\text{Si}-\text{O}$. Обсуждено влияние поляризац. d-ф-ций кремния на результаты расчетов. Детально рассмотрены геометрия и силовые постоянные дисилоксановой группировки $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$ в различных полиморф. модификациях SiO_2 , полученные из расчетов Пв потенциальной энергии I. Сравнены эксперим. статич. деформационные карты РКЭП (отвечающие абс. нулю т-ры) группировки $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$ в α -кварце и теоретич. РКЭП молекулы дисилоксана. Рассмотрены результаты расчетов молекул с $\text{Si}-\text{O}-\text{T}$ ($\text{T}=\text{Si}, \text{Al}, \text{B}, \text{Be}$)-группировками. Полученные из кривых потенциальной энергии молекул $\text{H}_6\text{Si}_2\text{O}_7$, $\text{H}_6\text{SiAlO}_7^{1-}$, $\text{H}_6\text{SiBO}_7^{1-}$ и $\text{H}_6\text{SiBeO}_7^{2-}$ значения равновесных длин связей и углов SiOT хорошо согласуются с их значениями в соотв-щих силикатах. Сравнены геометрич. и энергетич. характеристики молекул и соотв-щих силикатов с $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$ - и $\text{Si}-\text{S}-\text{Si}$ -группировками. Дана квантовомех. трактовка правила электростатич. валентности Полинга. Отмечается, что применение расчетных методов квантовой химии оказывается очень полезным в минералогии для установления связи между структурными и физ. св-вами и для их более глубокого понимания. Библи. 130.

И. Н. Сенченко

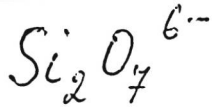


1982

Mansehnann R.

и. н., Isotopenpraxis, 1982,
ссыл. 18, N 6, 203-207.
ноен.

●
(ссыл. Si H₄ ; III)



1982

Takahashi Katsuyuki.

моном.
раств.

J. Chem. Soc. Faraday

Trans., 1982, Part 1,

78, N⁷, 2059-2072.

(cu. SiO_2 ; III)

Si-0

1982

Yu Jianguo; Liu Ruow.
Zhuang.

Иерун
СВЯЗ

Кедеме Tongbao 1982,
27 / 10), 603-606.

(см. В-Н; III)

SiO_4^{4-}

[Om. 22739]

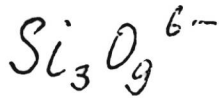
1985

Yul'g A., Ozias V., Pel-
legatti A.,

смыкка,
ab initio

Nouv. J. Chim., 1985,

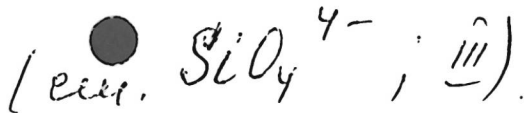
9, N 11, 675-680.

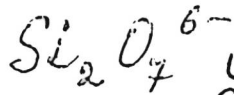


расчёт
м.п.,
структ.

1985
Liu Honglin, Chen Nianyi
et al.

Гуисуньянь сюэбао, J.
Chin. Silic. Soc., 1985,
13, N3, 257-263.



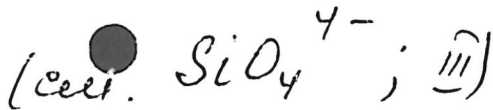


1985

Liu Honglin, Chen Nianyi
et al.

расчит
и.п.,
свернут.

Тяньцзяньцзюэ сундао,
J. Chin. Silic. Soc., 1985,
13, N3, 257-263.



$\text{Si}_3\text{O}_9^{6-}$

1985

3 Д155. Квантовохимический расчет электростатического потенциала силикатных ионов. Quantum chemical calculation of electrostatic potential of silicate anions. Liu Honglin, Chen Nianyi, Liao Muzhen, Hua Guodong, Dai Dingguo. «Гуйсуаньянь сюэбао, J. Chin. Silic. Soc.», 1985, 13, № 3, 257—263 (кит.; рез. англ.)

кв. мех. расч

Неэмпирическим методом рассчитаны связывающие электронные орбитали и электронные плотности для ионов $\text{Si}_3\text{O}_9^{6-}$, $\text{Si}_2\text{O}_7^{6-}$ и SiO_4^{4-} .

(72) IX

оп. 1986, 18, № 3

$\text{SiOO}-\text{OSiO}$

1985

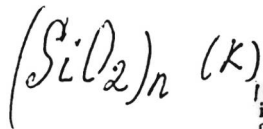
Зюбина Т.С.

потемн.
поверхн.,
ab initio
расчёт

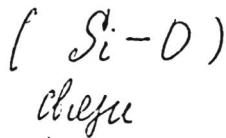
Ис. Меотам. химии,
1985, 30, N8, 1934-
-1938.

(см. $\text{MgOO}-\text{OMgO}$; III)

1986



$$n = 2, 3, 4$$



105: 139861m On the nonequivalency of silicon-oxygen bonds in silicon dioxide. Shluger, A. (Chem. Fac., Latvian State Univ., 226100 Riga, USSR). *J. Phys. Chem. Solids* 1986, 47(7), 659-64 (Eng). Ab initio and INDO investigations were done of both the electronic structure and potential surfaces of various SiO_2 mol. conformations and $(\text{SiO}_2)_n$, ($n = 2, 3, 4$) mol. complexes. The possibility of the formation of spatial structures resulting from the interaction of sep. SiO_2 mols. was shown, the structures formed being similar to those existing in condensed forms of silicon dioxide. Starting from the concept of the formation of cryst. SiO_2 structure and other silicates by consistent joining of sep. SiO_2 mols., the explanation of the nonequiv. nature of the Si-O bonds in these compds. is given. Two different mechanisms of switching these nonequiv. Si-O bonds in silicates and the corresponding rearrangements of their structures and silification are also discussed.

c. A. 1986, 105, N 16

Si-O

(Dm. 24189)

1986

Walther P.,

немишлен-
ное кольцо,
силь. поем.

Z. Chem., 1986, 26,
N 5, 189-190.

Okunov Si

1987

Lamoreaux R. H.,
Hildenbrand D. L.,
et al.

et al.,

Kp, $\Delta_f G$, J. Phys. Chem. Ref.
Data 1987, 16(3), 419-43.

(see Okunov Be; III)

Si-O(-Si)

1987

Shul'ts M. M.,
Stolyarova V. L.,
et al.

Группа
СВЗ

Fiz. Khim. Stekla
1987, 13 (6), 830-8.

(cer. Ge-O(-Si); III)

$(\text{SiO}_2)_2$

1989

4 Б1281. Исследование ИК-спектров молекулы $(\text{SiO}_2)_2$ в матрицах и неэмпирические расчеты в приближении самосогласованного поля. The molecule $(\text{SiO}_2)_2$. Matrix IR investigation and ab initio SCF calculation / Plitt H., Mehner Th., Schnöckel H. // 19th Eur. Congr. Mol. Spectrosc., Dresden, Sept. 4 — Sept. 8, 1989: Abstr. lect. and poster contrib. Dresden, 1989.— С. 255.— Англ.

Показано, что в низкот-рных матрицах могут образовываться молекулы $(\text{SiO}_2)_2$ при р-ции $(\text{SiO})_2$ и O_2 . Отнесение частот проведено с использованием изотопного замещения $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ и $^{28}\text{Si}/^{29}\text{Si}$. Строение обсуждено на основе спектральных данных и расчетов неэмпирич. методом МО. Б. В. Локшин

х. 1990, № 4

$(\text{SiO}_2)_2$

1989

4 Б1289. Молекула $(\text{SiO}_2)_2$. Инфракрасный спектр и вычисление методом ССП. The molecule $(\text{SiO}_2)_2$. IR spectrum and ab initio SCF calculation / Plitt H., Mehner Th., Schnöckel H. // 7th Matrix Isol. Spectrosc. Symp., Noordwijkerhout, 9—14 July, 1989: MIS'89: Abstr. Amsterdam.— 1989.— С. 73.— Англ.

По ИК-спектрам димера $(\text{SiO}_2)_2$, образующегося при р-ции в матрице между SiO_2 и O_2 , для различных изотопомеров с ^{18}O , предложена его структура. Наблюдаемые частотные сдвиги ($^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ и $^{28}\text{Si}/^{29}\text{Si}$) согласуются с ожидаемыми из нормально-координатного анализа. Экспериментально полученная структура димера подтверждена квантово-хим. расчетами.
Н. В. Кулакова

М.А.

х.1990, №4

$(\text{SiO}_2)_2$

1990

УДК 541.2 Б1266. Димер SiO_2 . ИК-матричное исследование и неэмпирический расчет методом ССП. Dimeres SiO_2 Matrix-IR-Untersuchungen und ab initio SCF-Rechnungen / Mehner T., Göcke H. J., Schunck S., Schnöckel H. // Z. anorg. und allg. chem.— 1990.— 580, № 1.— С. 121—130.— Нем.

Изучены ИК-спектры изолированных в матрицах из аргона молекул $(\text{SiO}_2)_2$, полученных окислением $(\text{SiO})_2$ и O_2 . Для идентификации полос использовалось изотопозамещение по кислороду и кремнию. Полосы 1293, 889, 786 см^{-1} отнесены к колебаниям B_{1u} , B_{3u} и B_{1u} молекулы $(\text{SiO}_2)_2$ симметрии D_{2h} , что согласуется с анализом нормальных колебаний. Теоретически оценена энергия димеризации $2 \text{ SiO}_2 \rightleftharpoons (\text{SiO}_2)_2$, равная —453 кДж/моль. Обсужден механизм образования $(\text{SiO}_2)_2$ из $(\text{SiO})_2$ и O_2 , схожий с элементарными процессами окисления поверхности кремния.

Г. В. Чертихин

М.П.

Х. 1990, № 22

Si-O - соединен

3K

1992

SiO,
SiO₂

117: 16278s Ab initio calculation of the local vibratory modes of interstitial oxygen in silicon. Jones, R.; Umerski, A.; Oeberg, S. (Dep. Phys., Univ. Exeter, Exeter, UK EX4 4QL). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1992, 45(19), 11321-3 (Eng). A local-d.-functional cluster method is used to calc. the structure and vibrational modes of interstitial oxygen in silicon. Found were Si-O lengths and the Si-O-Si bond angle to be 1.59 Å and 172°, resp. The asym. and sym. stretch frequencies are 1104 and 554 cm⁻¹ and are close to obsd. modes at 1136 and 518 cm⁻¹. The effective charge of the upper mode is 3.5e. Isotopic shifts of the modes are also reported. The sym. stretch mode at 544 cm⁻¹ is independent of the O-isotopic mass in agreement with observation.

(²Si-O, <Si-O-Si)
(param)

C.A. 1992, 117, N2

Si_3O

1993

Boldyrev A.I.,
Simons J.

ссылок,
vi, ab initio
расчет

J. Phys. Chem. 1993,
97 (22), 5875-81.

● (ссыл. Si_2O ; III)

Sidg²⁻

1993

120: 15406g Sulfur compounds. Part 162. Geometries and energies of the sulfur oxide radical anion SO_2^- and of three isomeric structures of the dithionite anion $\text{S}_2\text{O}_4^{2-}$. Steudel, Ralf; Steiger, Thomas (Inst. Anorg. Anal. Chem., Tech. Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 12 Germany). *THEOCHEM* 1993, 103(1-2), 55-9 (Eng). Ab initio MO calcns. indicate that the isolated $\text{S}_2\text{O}_4^{2-}$ anion may exist as either $\text{O}_2\text{S}-\text{SO}_2^{2-}$ (2), OSSO_3^{2-} (3), or SOSO_3^{2-} (4), the geometries and energies of which were calcd. with the MP2/6-311 + G(2d,p)//6-31G* approxn. The order of decreasing stability is $4 > 3 > 2$. The dissocn. of $\text{S}_2\text{O}_4^{2-}$ (2) into two radical anions SO_2^- is exothermic by 271 kJ mol⁻¹ in the gas phase. The bond length and valence angle of SO_2^- are 149.5 pm and 115.6°. The decompn. of aq. dithionite is discussed.

структура,
стабильн.,
теор. расчёт

C.A. 1994, 120, N2

SiñO

1994

Boldyrev A.I., Simons J.,

Report 1994, TR-40;

Order No. AD-A278863,

32pp.

J, Ae,
as initio
paven

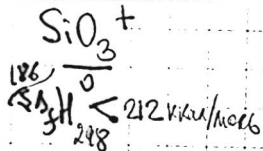
(cu. SiñC; ● III)

Si_nO
 $n=1\div 3$

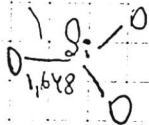
1994
Boldyrev A.I., Simons J.,
et al.,

(J, Ae) J. Phys. Chem., 1994,
98 (5), 1427-35.

(Cell. Si_nC  $n=1\div 3$; III)



$\tilde{\chi}^4 \text{H}^1 \text{young} \text{Dzh}$



Stöckigt D, Goldberg N, Hrusak J, Sülzle D,
 Schwarz H.

1994

JACS, 1994, 116, 8300-8303

Structural characterization of the
 Silicon Trioxide Radical Cation (SiO_3^+)
 by Fourier-Transform Ion Cyclotron
 Resonance Mass Spectrometry and ab initio
 MO calculations.

OM 37775

[OM 37775]

Si_2O_4

1994

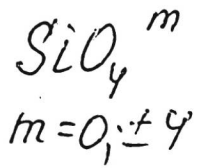
Ystenes Martin.

Spectrochim. Acta,

Part A 1994, 50A (2),
219-24.

структ.,
д., теор.
расчет

● (ср. SiO_2 ; II)



Zhao Yong-Fang,
Yu Wen.

1994

ab initio
paràm
cua.

Gaodeng Xiexiao Hua-
xue Xuebao 1994, 15(6),
907-11.

(cur. ● SiH_4^m ; III)

Si 6 O 18

1995

(Di)

122: 225481v Vibrational analysis of beryl ($\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$) and its constituent ring (Si_6O_{18}). Kim, Charles C; Bell, M. I; McKeown, D. A (Naval Research Laboratory, Dynamics of Solids Branch, Code 6680, Washington, DC 20375-5320 USA). *Physica B (Amsterdam)* 1995, 205(2), 193-208 (Eng). The normal modes of vibration and their frequencies are calcd. for beryl, a mineral whose crystal structure (space group D_{2h}^{16}) consists of six-membered silicate rings (Si_6O_{18}) linked by Be^{2+} and Al^{3+} ions. A valence force potential was used, consisting of central interactions between nearest neighbors and bond-bending interactions centered at the Si^{4+} , Be^{2+} , and Al^{3+} ions. The force consts. are detd. by fitting the calcd. frequencies to the results of a complete study of the Raman spectra of a large single crystal. The calcd. frequencies are in reasonable agreement with expt., permitting unambiguous assignment of normal modes to the obsd. spectral lines. In several cases, the resulting interpretation of spectral features differs significantly from those published previously. Considerable mixing of Al and Be motions with those of the ring is found for the Raman-active modes near 750 cm^{-1} and $>850\text{ cm}^{-1}$, resp. The normal modes and frequencies of the hypothetical isolated ring with C_{6h} symmetry are detd. by neglecting all interactions between the rings and the surrounding Be and Al atoms. This identification of normal modes characteristic of six-membered silicate rings and the effect of the environment on these modes may prove useful in the interpretation of IR and Raman spectra of amorphous silicates.

C.A. 1995, 122,
N18

1996

(Silica) x

x = 1-4

1 = 5-8.18

Parkless J.A.W., Stirling Dr,

et al.,

empirical

Chem. J. Phys. Chem 1996, 100, N 4,
1098 - 1103.

Imp-pa

Зерпункт
линейного SiO_2

p.d.x. N 15, 15 5 166

$(SiO)_n$

1996

Landler M.E.,
Behrman E.C. et al.

мор-
растий
вспышек,
Vi, ссид.

THEOCHEM 1996,
362(2), 215-24.

(сеп. $(ZnO)_n$, III)

1996

F: Si₂O₅(-2)

P: 3

6Б148. Новый класс свободных стабильных двузарядных анионов. Три изомера Si[2]O[5]{2-} и их взаимопревращения. A new class of free stable doubly negative systems: Three Si[2]O[5]{2-} isomers and their interconversion / Sommerfeld T., Scheller M. K., Cederbaum L. S. // J. Chem. Phys. - 1996. - 104, N 4. - С. 1464-1470. - Англ.

Неэмпирическим методом ССП в двухэкспонентном базисе с включением поляризационных и диффузных функций с учетом электронной корреляции в рамках МП2 и КВ изучена поверхность потенциальной энергии Si[2]O[5]{2-}. Обнаружено три изомера, устойчивых к диссоциации на моноанионные фрагменты, но только два из них устойчивы к вертикальному отщеплению электрона.

РХХ 1997

F: SiO₃

P: 3

Om. 38 353

1996

37.13B1247. Колебательный спектр и структура триоксида кремния SiO₃. Изучение методами ИК-спектроскопии в условиях матричной изоляции и теории функционала плотности. Vibrational spectrum and structure of silicon trioxide SiO₃: A matrix isolation infrared and density functional theory study / Tremblay Benoit, Roy Pascale, Manceron Laurent, Alikhani M. Esmail, Roy Denis // J. Chem. Phys. - 1996. - 104, N 8. - С. 2773-2781. - Англ.

Молекулы триоксида кремния образовывались в матрицах из аргона, содержащих атомы Si и молекулы O₂, либо как вторичный продукт р-ции Si+2O₂, либо как первичный в р-ции SiO+O₂ при УФ-фотолизе с частотой 5,17 эВ. Найдено и измерено пять фундаментальных колебательных переходов для восьми изотопных модификаций (использовались изотопы как кремния, так и кислорода). Спектры интерпретированы в предположении симметрии C_{2v}, что подтверждено неэмпирическим расчетом. Библ. 36.

PMX 1997

SiO₃

CM 38353

1996

124: 188241k Vibrational spectrum and structure of silicon trioxide SiO₃: a matrix isolation infrared and density functional theory study. Tremblay, Benoit; Roy, Pascale; Manceron, Laurent; Alikhani, M. Esmail; Roy, Denis (LURE, Univ. Paris Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1996, 104(8), 2773-81 (Eng). Mol. silicon trioxide has been isolated in argon matrixes at low temp. (i) as a secondary reaction product within Si+2(O₂) aggregates or (ii) as a primary product in the direct reaction of silicon monoxide with oxygen mols. after UV excitation at 5.17 eV. The silicon trioxide mol. has been characterized through the observation of five fundamental vibrations for at least eight different isotopic species, namely ²⁸Si¹⁶O₃, ²⁹Si¹⁶O₃, ³⁰Si¹⁶O₃, ¹⁶OSi¹⁸O₂, ¹⁸OSi¹⁶O¹⁸O, ¹⁶OSi¹⁶O¹⁸O, ¹⁸OSi¹⁶O¹⁸O, and Si¹⁸O₃. From the exptl. data, a structure of the C_{2v} sym. can be deduced with a Si:O double bond much shorter than two equiv. Si-O single bonds. These findings are fully supported by DFT calcns., which moreover predict a large binding energy of about 60 kcal/mol with respect to the sep. fragments (SiO and O₂). The possible reaction pathways are also discussed.

check
8 samples
Vi, Heptel
check

C.A. 1996, 124, IN 14

1996

F: Si₂O₄-

P: 3

1B1206. Изучение методом фотоэлектронной спектроскопии малых кластеров оксида кремния SiO[2], Si[2]O[3] и Si[2]O[4]. A photoelectron spectroscopic study of small silicon oxide clusters: SiO[2], Si[2]O[3], and Si[2]O[4] / Wang Lai-Sheng, Wu Hongbin, Desai Sunil R., Fan Jiawen, Colson Steve D. // J. Phys. Chem. - 1996. - 100, N 21. - С. 8697-8700. - Англ.

Место хранения ГПНТБ Исследованы фотоэлектронные спектры анионов с энергией фотонов 4,66 эВ. В спектрах проявляются широкие линии, свидетельствующие о значительных геометрич. различиях анионов и нейтральных кластеров. Вертикальные энергии фотоотрыва составляют 2,76(0,10), 2,75(0,10) и 3,63(0,1) эВ для SiO[2]{-}, Si[2]O[3]{-} и Si[2]O[4]{-} соответственно. В спектре Si[2]O[3]{-} обнаружены пики, свидетельствующие о наличии второго изомера. Проведены также аналогичные эксперименты с оксидами Ge. Обсуждены структуры кластеров.

РШХ 1997

1996

F: Si₂O₃-

P: 3

1B1206. Изучение методом фотоэлектронной спектроскопии малых кластеров оксида кремния SiO[2], Si[2]O[3] и Si[2]O[4]. A photoelectron spectroscopic study of small silicon oxide clusters: SiO[2], Si[2]O[3], and Si[2]O[4] / Wang Lai-Sheng, Wu Hongbin, Desai Sunil R., Fan Jiawen,

Colson Steve D. // J. Phys. Chem. - 1996. - 100, N 21. - С. 8697-8700. - Англ.
Место хранения ГПНТБ Исследованы фотоэлектронные спектры анионов с энергией фотонов 4,66 эВ. В спектрах проявляются широкие линии, свидетельствующие о значительных геометрич. различиях анионов и нейтральных кластеров. Вертикальные энергии фотоотрыва составляют 2,76(0,10), 2,75(0,10) и 3,63(0,1) эВ для SiO[2]{-}, Si[2]O[3]{-} и Si[2]O[4]{-} соответственно. В спектре Si[2]O[3]{-} обнаружены пики, свидетельствующие о наличии второго изомера. Проведены также аналогичные эксперименты с оксидами Ge. Обсуждены структуры кластеров.

19) X 1997

Si_nO_m

$$n \leq 6$$

$$m \leq 12$$

структур.
параметры,
энергетич.

свойств,

расчеты. узлы, атомы, молекулы.

CA 1998, 129, 114 pages

OT 39384 1998
129: 180355h Atomic and electronic structure of neutral and charged Si_nO_m clusters. Nayak, S. K.; Rao, B. K.; Khanna, S. N.; Jena, P. (Physics Department, Virginia Commonwealth University, Richmond, VA 23284-2000 USA). *J. Chem. Phys.* 1998, 109(4), 1245-1250 (Eng), American Institute of Physics. Using an MO approach and the generalized gradient approxn. in the d. functional theory, we have calcd. the equil. geometries, binding energies, ionization potentials, and vertical and adiabatic electron affinities of Si_nO_m clusters ($n \leq 6$, $m \leq 12$). The calcs. were carried out using both Gaussian and numerical form for the at. basis functions. Both procedures yield very similar results. The bonding in Si_nO_m clusters is characterized by a significant charge transfer between the Si and O atoms and is stronger than in conventional semiconductor clusters. The bond distances are much less sensitive to cluster size than seen for metallic clusters. Similarly, calcd. energy gaps between the highest occupied and LUMO of (SiO₂)_n clusters increase with size while the reverse is the norm in most clusters. The HOMO-LUMO gap decreases as the oxygen content of a Si_nO_m cluster is lowered eventually approaching the visible range. The photoluminescence and strong size dependence of optical properties of small silica clusters could thus be attributed to oxygen defects.

1999

F: Sin

P: 3

132:27035 Tight-binding studies on the
structural properties of silicon clusters. Fa,
W.; Luo, C. L. Department of Physics, Nanjing
Normal University Nanjing 210097, Peop. Rep.
China Acta Metall. Sin. (Engl. Lett.), 12(4), 534-
538 (English) 1999 Tight-binding mol. dynamics
and simulated annealing techniques are employed to
study the structural properties of silicon clusters
contg. 2- atoms. It is found that our results for
Si₂-Si₆ agree well with those ob using ab initio
techniques. Further Si-cluster research which give
the significant prediction has been made.

C. A. 2000, 132

Si On

(OM. 40024)

1999

Nicole R. Brinkmann et al.,

Ac g. Chem. Phys., 1999,

140, N13, 6240-45



F: Si-O

1999

P: 3

132:70808 Calculations of silicoxygen ring vibration frequencies. Sitarz M.; Handke, M.; Mozgawa, W. Al. Mickiewicza 30, Department of Materials Science and Ceramics, University of Mining and Metallurgy (AGH) Krakow 30 Pol.

Spectrochim. Acta, Part A, 55A(14), 2831-2837 (English) 1999 In the work model calcns. of the vibrations of ideally isolated silicoxygen rings (using PM3 method) were carried out. 3-, 4-, and 6-mem rings were considered. The 3-membered silicoxygen rings are flat and practically undeformed showing D_{3h} symmetry. The rings of higher no. of members (i.e. n₃) are deformed to some extent. The deformation is most significant in the Si-O-Si bond angles distribution. All the

C. A. 2000, 132

ring compds the bridging Si-O-Si bonds are $\sim 0.02-0.04$ Å shorter than the nonbridging bonds. Hypothetical IR spectra for all the rings considered were calcd. of these hypothetical spectra indicated that the whole spectrum can be di into 4 wavenumbers regions, 1200-1100 cm^{-1} stretching Si-O(Si) vibrations 800 cm^{-1} stretching Si-O- vibrations; 800-600 cm^{-1} ; the region in which a characteristic of silicoxygen rings appears, and <600 cm^{-1} bending -O-Si (Si)O-Si-O(Si). As the no. of ring members increases the ring band shift lower wavenumbers: 725 cm^{-1} for 3-membered rings, 650 cm^{-1} for 4-membered and 610 cm^{-1} for 6-membered rings. Calcd. spectra were compared with the spectra of cyclosilicates. They showed good agreement in the 1200-600 cm region. The ring band shifts towards lower wavenumbers with increasing n ring members.

$(\text{SiO}_2)_n$

1999

cmp-па и
freemuka,
meop. pacet

130: 316873f Energies and structures of $(\text{SiO}_2)_n$ clusters. Wang, Cheng; Liu, Lei; Li, Yufen (Department of Physics and State Key Joint Laboratory for Materials Modification by Laser, Ion and Electron Beams, Fudan University, Shanghai, Peop. Rep. China 200433). *Wuli Huaxue Xuebao* 1999, 15(2), 143-149 (Ch), Beijing Daxue Chubanshe. The energies and structures of $(\text{SiO}_2)_n$ clusters bound by a reliable empirical potential function have been studied. A genetic algorithm has been used to search for the global min. on the empirical potential surface. The dependence of energy and structure of $(\text{SiO}_2)_n$ clusters on cluster size has been analyzed and discussed. The results show that no magic nos. in $(\text{SiO}_2)_n$ clusters obviously exist, and, in the range of $n \leq 20$, there are no evidence that $(\text{SiO}_2)_n$ shows the structural characteristics of the corresponding bulk materials.

C.A., 1999, 130, N23

2000

F: SinOm

P: 3

132:284447 Energetics of silicon suboxides.

Hamann, D. R. Bell Laboratories, Lucent
Technologies Murray Hill, NJ 07974, USA Phys. Rev.
B: Condens. Matter Mater. Phys., 61(15), 9899-9901
(English) 2000 Substoichiometric oxides of Si
are modeled by a simple and consistent set of structures
that allow the energy penalty associated with the
substoichiometry to be calculated. The energies are evaluated by
generalized-gradient density-functional theory, and trends in
the electronic structure are described.

C-A. 2000, 132

Okungh Li

2000

La Violette, Randall A.,
et al.,

meopem.
pacem

J. Chem. Phys., 2000,
112, (21), 9269-75

(all. uspryht B) III)

Lin

[Om. 40854]

2001

Jinlan Wang, Guanghou
Wang et al.,

Chem. Phys. Lett., 2001,
341, 529-534.

Structural



transition

of Li^- clusters and their
thermodynamics.

