

3202, Kokeu!

SiO₂

Smyth

1987

(фаза высокого
давления)

15 B2070. Кристаллическая структура коэсита, фазы высокого давления SiO₂ при 15 и 298 К по данным монокристалльной нейтроно- и рентгенографии: проверка модели связей. Crystal structure of coesite, a high-pressure form of SiO₂, at 15 and 298 K from single-crystal neutron and X-ray diffraction data: test of bonding models. Smyth J. R., Smith J. V., Artioli G., Kvick A. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 4, 988—992 (англ.)

Определена крист. структура природного коэсита SiO₂ из эклогитовых пород кимберлита Roberts Victor, Южная Африка, методом нейтронографии при 15 К [λ 1,04997 Å, монокроматор Ge (220) 2168 отражений, R 0,048] и рентгенографии монокристалла при 298 К (λ Mo, 8234 отражения, R 0,013). Кристаллы монокл., ф. гр. C2/c, a 7,1357, b 12,3835, c 7,1859 Å, β 120,375° при 15 К и a 7,1464, b 12,3796, c 7,1829 Å, β 120,283° при 292 К определены методом нейтроно-

X. 1987, 19, N 15

графин. Выявлен существенно анизотропный характер термич. расширения, что объяснено относительно большим ($\sim 1\%$) изменением расстояний между несвязанными атомами О (3,26 при 15 К, 3,29 при 298 К) и углом OSi/O в тетраэдрич. каркасе. Обнаружена линейная зависимость между 8 независимыми расстояниями Si—O и 5 величинами $\sec \theta$ (Si/OSi): при 15 К $d(\text{Si—O}) = 3,42 - 0,0165 \cdot \sec \theta$ (OSi/O) (корреляция — 0,516), при 292 К $d(\text{Si—O}) = 1,529 - 0,0699 \cdot \sec \theta$ (SiOSi) (корреляция — 0,945). Сравнение этих зависимостей с теорет. кривыми, рассчитанными на основании модели молек. орбиталей для малых кластеров показало, что необходимо учитывать дополнит. факторы, например, силы отталкивания между соседними несвязанными атомами О.

Ю. И. Сигаловская

SiO_2

1987

✓ 10 Б2018. Полиморфное превращение кварца, подвергнутого механической обработке. Polymorphous transformation of quartz induced by mechanical treatment. Steinike U., Uecker D.-Chr., Sigrist K., Plötner W., Köhler Th. «Cryst. Res. and Technol.», 1987, 22, №10, 1255—1261 (англ.; рез. нем.)

При нагревании α -кварц проходит цикл полиморфных превращений по схеме:

$$\begin{array}{c} 573^\circ\text{C} \qquad 870^\circ\text{C} \\ \alpha\text{-кварц} \rightleftharpoons \beta\text{-кварц} \rightleftharpoons \beta\text{-тридимит} \rightleftharpoons \beta\text{-кристобалит} \end{array}$$

1470°C

Мех. обработка (в мельнице, от 1 до 70 часов) приводит к образованию так называемых механически активированных образцов α -кварца, претерпевающих полиморфные переходы при гораздо более низких т-рах: при 573°C в β -кварц и при $\approx 1200^\circ\text{C}$ в β -кристобалит. Энергия активации фазовых

Π_{t_2}

Х. 1988, 19, N 10

переходов при этом падает почти на 50%. Факт снижения t -ры фазовых превращений для механически активированных образцов объясняется повышенной концентрацией структурных дефектов, малыми размерами кристаллитов (и, соотв., большой удельной P_v) и разрывом части мостиковых связей $Si-O-Si$, что облегчает переход от одной структуры к другой.

С. В. Соболева

SiO_2

1987

5 E742. Использование электронной микроскопии для изучения фазовых превращений. Phase transformations as studied by electron microscopy. Van Landuyt J., Van Tendeloo G., Amelinckx S. «Ultramicroscopy», 1987, 23, № 3—4, 371—382 (англ.)

Рассматриваются возможности эл.-микроскопич. методами, в том числе дифракции электронов, при изучении фазовых превращений и реакций в твердых телах и сплавах. В качестве примеров анализируются 1) реакция дегидратации гетита с переходом в гематит при

Fe_2O_3

⑦ AlPO_4

ф. 1988, 18, № 5

нагревании и 2) фазовый переход низкотемпературного α -кварца в высокотемпературный β -кварц при $T = 573^\circ \text{C}$. На основании анализа полученных электрограмм предложен механизм реакции «гетит $\rightarrow$ гематит» с формированием микротекстуры из параллельных сдвойникованных слоев гематита шириной ± 3 нм, разделенных пустотами. При α — β -переходе в кварце зафиксировано существование промежуточной фазы несовершенного характера с образованием доменов из дофинейских двойников, вытянутых вдоль c -оси, имеющих треугольную форму в поперечнике (размер 10—30 нм). Такая же сложная микроструктура наблюдалась при фазовом превращении ($T = 580^\circ \text{C}$) в изоструктурном кварцу берлините AlPO_4 . Библ. 24. Т. Глушкова

SiO_2 (ru)

1987

107: 162321k Modeling of the structure and thermodynamic properties of liquid silica by the method of molecular dynamics. Voronova, L. I.; Lepinskikh, B. M.; Bukhtoyarov, O. I. (Inst. Metall., Sverdlovsk, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Chern. Metall.* 1987, (5), 5-9 (Russ). The interat. pair potential and the liq. structure parameters (radial distribution function) of liq. SiO_2 were calcd. by the mol. dynamics method. The thermodyn. properties (heat capacity, c_p , c_v ; isothermal and adiabatic compressibility; and thermal expansion coeff.) of liq. SiO_2 were calcd. by the microcanonical ensemble. The theor. results compare well with exptl. data.

(G, W)

C.A. 1987, 107, N18

SiO₂

1988

✓ 5 E376. Концентрационные зависимости теплоемкости бинарных стекол на основе диоксида кремния при низких температурах. Алиев Н. Н., Абдуллаев А. Б., Шалумов Б. З., Дьяконов С. С. «Изв. АН СССР. Неорганич. матер.», 1988, 24, № 1, 124—132

Методом адиабатич. калориметрии изучены концентрационные зависимости теплоемкости бинарных стекол систем SiO₂—B₂O₃, SiO₂—Al₂O₃, SiO₂—GeO₂ и SiO₂—TiO₂. Установлено различное влияние оксидов бора, алюминия, германия и титана на теплоемкость SiO₂, что связывается с различным вхождением катионов (B, Al, Ge и Ti) в его структуру. На основе эксперим. данных вычислены изменение энтропии и энтальпии изученных стекол для исследованных конц-ий в интервале т-р 5—300 К. Резюме

Sp;

ср. 1988, 18, № 5

SiO_2

1988

4 Б3017. Теплоемкость аморфных фаз диоксида кремния в интервале 5—340 К / Березовский Г. А., Давронов О. // 8 Всес. конф. по теплофиз. свойствам веществ, Новосибирск, 20—22 сент., 1988: Тез. докл. Ч. 2.— Новосибирск, 1988.— С. 16—17.— Рус.

В интервале т-р 5—340 К в вакуумном адиабатич. калориметре измерены теплоемкости C_p 5 образцов аморф. кремнезема, облученных быстрыми нейтронами с дозами от $2 \cdot 10^{19}$ до $2,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-2}$. Отмечено снижение C_p облученных образцов по сравнению с C_p исходного кварцевого стекла (КС), причем максимум отклонения наблюдался вблизи 10 К. Это свидетельствует о нек-ром упорядочении стекла в результате облучения, т. к. при низких т-рах C_p необлученного КС выше, чем крист. кварца. При дозах от $1 \cdot 10^{20}$ до $2,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-2}$ C_p слабо зависит от облучения. Это согласуется с предположением, что при таких дозах облучения стекло полностью представляет собой так называемую метамиктную фазу, в к-рой возможно проявляются локальные структуры

C_p

X. 1989, N 4

коэсита или китита. При дозах, меньших $1 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-2}$, образец представляет собой смесь двух фаз — исходного КС и метамиктной формы. Измерения низкотемпературной C_p метамиктного кремнезема, отожженного в течение 3 часов при 1000°C , показали его полное превращение в КС.

А. С. Гузей

1988

22 БЗ034. Теплоемкость аморфных фаз диоксида кремния. Березовский Г. А., Давронов О., Ланда Л. М., «12 Всес. конф. по хим. термодинам. и калориметрии. Тез. станд. докл., Горький, 13—15 сент., 1988. Ч. 1». Горький, 1988, 34

Изучено влияние облучения на термодинамич. св-ва кварцевого стекла (I). В вакуумном адиабатич. калориметре с периодич. вводом тепла измерена C_p I в интервале т-р 5—340 К. Построены графики зависимость $C_p(T)$ и рассчитаны ΔH и ΔS . На графиках $C_p(T)$ приведены отклонения C_p образцов I, облученных быстрыми нейтронами с дозами $2,0 \cdot 10^{19}$, $9,3 \cdot 10^{19}$ и $2,2 \cdot 10^{20}$ см⁻², от C_p исходного образца I. Показано, что C_p облученных образцов снижается с увеличением дозы, а ΔC_p имеет характерный минимум при 10 К. При дозе больше $2 \cdot 10^{20}$ см⁻² наступает насыщение, I полностью переходит в метамиктный кремнезем, C_p к-рого после отжига при 1000°С близка к C_p I с точностью 2—5% до 300 К.

По резюме

X. 1988, N 22

SiO_2

1988

2 В6. Синтез диоксида кремния из тетрахлорсилана и диоксидов азота и серы / Буцкий В. Д., Зоря Л. Н., Лазарев В. Б., Онайко В. А., Панасюк Г. П., Подзолко Л. Г. // Ж. неорг. химии.— 1988.— 33, № 10.— С. 2457—2461.— Рус.

Исследована возможность синтеза безгидроксильного кремнезема в системах $\text{SiCl}_4 + n_0\text{SO}_2$ (1), $\text{SiCl}_4 + n_0\text{NO}_2$ (2), $\text{SiCl}_4 + n_0\text{NO}_2 + n_0\text{SO}_2$ (3), где n_0 (относит. число молей) варьировалось от 0,5 до 4. Эксперимент основывался на данных термодинамич. моделирования указанных систем для $T = 300\text{—}900\text{ K}$ и норм. давл. В системах (1) и (2) не удалось достигнуть равновесных состояний. В системе (3) получен диоксид кремния, в к-ром, по данным ИК-спектроскопии, отсутствуют гидроксильные группы.

Резюме

синтез

х. 1989, № 2

8:02

1988

Давронов, Одилжон.

Исследование физико-химических свойств метамиктного кремнезема : Автореф. дис. на соиск. учен. степ. канд. физ.-мат. наук : (02.00.04) / АН СССР, Сиб. отд-ние, Ин-т неорганич. химии. — Новосибирск, 1988. — 17 с. : граф.

Библиогр. : с. 17 (5 назв.).

Полимеризация

№ 11172

А9 № 418 [88-5689a]

НПО ВКП 13—17.06.88

SiO_2
(кремнезем)

Cr;

Х. 1989, № 4

1988

4 Б3013. Влияние бозонного пика на низкотемпературную теплоемкость аморфного кремнезема / Давронов О., Дребушак В. А. // 8 Всес. конф. по физ. свойствам веществ, Новосибирск, 20—22 сент., 1988: Тез. докл. Ч. 2.— Новосибирск, 1988.— С. 4—5.— Рус.

В спектрах КР на стеклах присутствует «бозонный пик», на долю которого приходится от 30 до 90% интегральной интенсивности спектра КР. С использованием ранее опубликованных данных авторов рассчитаны параметры бозонного пика (доля в интегральной интенсивности от всего фононного спектра и частота ω_{max} максимума бозонного пика) для ряда стекол SiO_2 , облученных различными дозами быстрых нейтронов. С увеличением дозы облучения значения ω_{max} растут. До 40 К теплоемкость облученных образцов аморфного кремнезема описывается только бозонной составляющей. Сравнение расчетных значений теплоемкости с эксперим. для самых низких т-р свидетель-

ствуют об отклонении фононной плотности бозонного
пика $g(\omega)$ от квадратичной. А. С. Гузей

Тез

Si

1988

7 E249. Теплоемкость кремния в области милликельвин. Specific heat of silicon in the millidegree region / Keyes Robert W. // Phys. Rev. B.— 1988.— 38, № 14.— С. 9806—9809.— Англ.

Анализируется возможность использования Si в качестве болометра для элементарных частиц при T -рах ниже 100 мК, обусловленная его чрезвычайно низкой решеточной теплоемкостью. Рассматриваются различные вклады в теплоемкость электрически активных примесей. Показано, что наибольший вклад могут давать расщепления акцепторных состояний внутренними деформациями и расщепление примесных уровней магн. полем. Использование материала n -типа позволяет избежать первого вклада. Делается вывод о перспективности болометрич. метода для регистрации частиц с энергией ~ 100 МэВ.

В. Оскотский

Si

фр. 1989, N 3

SiO₂ (cmx)

Om 30526

1988

110: 46017d Heat capacity of neutron-irradiated silica glass. Davronov, O.; Berezovskii, G. A. (Inst. Inorg. Chem., Novosibirsk, USSR). *J. Therm. Anal.* 1987 (Pub. 1988). 33(3), 749-53 (Eng). The heat capacities of unirradiated silica glass and three samples of fast neutron-irradiated silica glass were measured between 6 and 340 K. For the glass samples irradiated with fast neutrons, a decrease in heat capacity was obsd. in comparison with the starting silica glass. This agrees with the assumption that at higher doses the silica glass is converted into the metamict phase, which has a different local structure.

(G)

c.A. 1989, 110, N6

SiO_2

от 30526

1988

5 Б3024. Теплоемкость кварцевого стекла после облучения нейтронами. Heat capacity of neutron-irradiated silica glass / Davronov O., Berezhovsky G. A. // J. Therm. Anal.— 1988.— 33, № 3.— С. 749—753.— Англ.

Теплоемкость C_p кварцевого стекла, облученного быстрыми нейтронами с конц-ией $2,0 \cdot 10^{19}$, $9,3 \cdot 10^{19}$ и $2,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-2}$ измерена в адиабатич. калориметре при t -рах 5—340 К. Точность измерений C_p составляла 0,2% при 50—278 К и 1,0% ниже 30 К. Облучение приводит к уменьшению C_p по сравнению с необлученным стеклом. При дозах свыше $2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-2}$ разности ΔC_p и ΔS облученного и необлученного образцов почти не зависят от дозы. Это указывает на образование метамиктной фазы с упорядоченным расположением фрагментов. Значения C_p (298 К, Дж/К·моль), $S_{298} - S_0$ (Дж/К·моль) и $H_{298} - H_0$ (Дж/моль) составляют для необлученного стекла $44,22 \pm 0,05$, $43,51 \pm 0,10$ и 7000 ± 10 и для стекла, облученного дозой $2,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-2}$ $42,84 \pm 0,10$, $40,70 \pm 0,40$ и 6700 ± 20 .

Л. А. Резницкий

C_p
5-340K

х. 1989, №5

SiO₂

Дорогомы

1988

~ 110: 83070m Thermodynamics of polymorphic forms of silica. Dorogokupets, P. I.; Karpov, I. K.; Lashkevich, V. V. (IZK, Irkutsk, USSR). *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Geol.* 1988, (11), 87-97 (Russ). Thermodyn. data and the equations of state for the 5 forms of SiO₂ were used to calc. the phase diagram of SiO₂ with an error not greater than a possible exptl. error. Thermodyn. characteristics of the transformation coesite = α -quartz in the 1300-1400° and 30-35 kbar region were detd.

фазовая
диаграмма,
 $\Delta \pm 2 H$, $\Delta \pm 2 S$;

диз. констант: $S_{298} = 39,16 \pm 0,5 \text{ Дж} =$
 $= 9,36 \pm 0,12 \text{ э.е.}$

$\Delta H_{298}^{\circ} = -907,72 \pm 1,1 \text{ Дж} =$

$\bullet = 216,95$

С.А. 1989, 110, N10

SiO_2

1988

9 Б3094. Несоразмерные фазовые переходы в кварце и берлините. Incommensurate phase transitions in quartz and berlinite / Dolino G. // Struct. and Magn. Phase Transit. Miner.— New York etc., 1988.— С. 17—38.— Англ.

Обзор теор. и эксперим. исследование х-к α - β -перехода в кварце, включая переход в несоразмерную фазу (НСФ), открытый спустя 100 лет после интенсивного изучения α - β -перехода. В теории Ландау фазовых превращений 2-го рода переход в НСФ проявляется как небольшое возмущение в св-вах α - β -перехода (1-го рода). Рассмотрены результаты изучения механизма и динамич. св-в этих переходов методами РФА, нейтронографии и спектроскопии КР. Сделан обзор исследований фундаментальных св-в НСФ, выполненных методом электронной микроскопии, а также работ по изучению физ. св-в НСФ, существующей в интервале т-р 1,4 К между α и β -фазами. Рассмотрены также результаты исследования НСФ в AlPO_4 . Библ. 70.
В. А. Ступников

T_2

X. 1990, N 9

SiO_2

Дм. 42034 . 1988

5 E736. Фазовые превращения в стеклообразном и аморфном SiO_2 . Phase transitions in vitreous and amorphous SiO_2 / Gerber Th., Himmel B., Lorenz H., Stachel D. // Cryst. Res. and Technol.— 1988.— 23, № 10—11.— С. 1293—1302.— Англ.; рез. нем.

Рентгенографическим методом с использованием $\text{Ag}-K_\alpha$ -излучения изучены структурные изменения, происходящие в аморфном SiO_2 под влиянием т-ры и давления (P): Изменение кривых интенсивности и ф-ций атомного распределения после отжига $\alpha\text{-SiO}_2$ при 700°C и $P=7$ ГПа интерпретируется как переход от структуры типа кристабалита к структуре типа кварца, сопровождающийся увеличением плотности $\alpha\text{-SiO}_2$ на 15%. Кристаллизация $\alpha\text{-SiO}_2$ начинается при 800°C и заканчивается при 900°C и $P=7$ ГПа. Структура мелкодисперсного SiO_2 отличается от структуры $\alpha\text{-SiO}_2$ характером упаковки атомных полиэдров. Измерение интенсивности рентгеновских лучей, рассеянных дисперсным SiO_2 при разных т-рах, позволило установить, что при повышении т-ры происходит сдвиговое структурное превращение, аналогичное $\alpha\text{-}\beta$ -переходу в кристабалите. Библ. 43.

Е. З. С.

(P_{ts})

ф. 1989, №5

SiO_2

Um. 42034

1988

(струк. аморфн)

/ 110: 160741k Phase transitions in vitreous and amorphous silica. Gerber, T.; Himmel, B.; Lorenz, H.; Stachel, D. (Sekt. Phys., Wilhelm-Pieck-Univ., DDR-2500 Rostock, Ger. Dem. Rep.). *Cryst. Res. Technol.* 1988, 23(10-11), 1293-302 (Eng). Glassy (v) and amorphous (a) SiO_2 were studied by x-ray diffraction with resolu. 0.016 nm at 7 GPa and 600-1000°. The densification produced structural phase transitions: at 700°, a 15% irreversible densification was seen of v- SiO_2 changing its cristobalite topol. to that of quartz; a- SiO_2 showed medium-range order and a displacive phase transition analogous to α - β transition in cristobalite.

фаз. переход

C.A. 1989, 110, N 18

SiO_2 (кварц)

1988

22 Б2055. Попытка уточнения структуры кварца. An attempt of structure refinement of quartz. Kihara K. «14th Int. Congr. Crystallogr., Perth, 12—20 Aug., 1987. Collect. Abstr.» Nellands, 1988, 153 (англ.)

Проведенное рентгенографич. уточнение ($R \approx 0,05$) структур кварца при т-рах выше (на 4 и 14 К) и ниже (на 10 и 60 К) т-ры фазового перехода $\alpha \rightarrow \beta$ и при комн. т-ре не выявило никаких промежуточных фаз с несообразными решетками. С. В. Соболева

структура.

Х. 1988, N 22.

SiO_2 (аморф.) от. 28573 1988

1 13 Б3022. Выбор величины стандартной энтальпии образования гидратированного аморфного диоксида кремния. Ключников В. А., Воронков М. Г., Пепекин В. И., Попов В. Т., Балыкова И. А., Кузьмина Е. С. «Докл. АН СССР», 1988, 298, № 2, 398—400

Калориметрически определена энтальпия образования высокодисперсного гидратированного аморф. SiO_2 (I). Показано, что $\Delta_f H_{298,15}^\circ$ (I) зависит от его Пв, наличия силанольных групп и воды, связанной Н-связями и физически адсорбированной. А. Л. М.

ΔH_f° ;

Х. 1988, 19, n 13

SiO_2 (amorph.) ^{om.} 28573

1988

108: 138835f Selection of standard heat of formation of hydrated amorphous silicon dioxide. Klyuchnikov, V. A.; Voronkov, M. G.; Pepekin, V. I.; Popov, V. T.; Balykova, I. A.; Kuz'mina, E. S. (Kamerov. Gos. Med. Inst., Kamerovo, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1988, 298(2), 398-400 [Phys. Chem.] (Russ). The heats of formation of hydrated amorphous SiO_2 and the effects influencing these values were detd. To det. the heat of combustion of ultradispersed C as well as of elementary Si a special calorimeter, described by U.A. Klyuchnikov (1979), was used. Hydration of SiO_2 was studied by reaction calorimetry and bomb calorimetry was used to det. the heat of formation of SiO_2 and H_2SiF_6 .

($\Delta_f H$)

(H) X

C. A. 1988, 108, N 16

SiO_2 (klopus)

1988

Kostyrko K., Shochylas
M., Klee H.

J. Therm. Anal. 1987,

T_{t2} , Δt_2 H; (Pub. 1988). 33(1), 351-7.

(cell, KNO_3 ; I)

SiO_2

от 30676 1988

7 Б3043. Термодинамическая стабильность метамиктного кремнезема в стандартных условиях / Ланда Л. М. // Докл. АН СССР.— 1988.— 303, № 1.— С. 136—139.— Рус.

Предположение о станд. состоянии кремнезема SiO_2 в виде полиморфной метамиктной модификации (КМ) аргументировано результатами термхим. исследований р-рения SiO_2 в HF -к-те. КМ возникает при облучении др. модификаций SiO_2 быстрыми нейтронами. В структуре КМ преобладают четырехчленные кольца тетраэдров SiO_4 . Барич. воздействие на SiO_2 -стекло также приводит к возникновению КМ, что сопровождается снижением энтальпии системы. Замораживание фазы высокого давления сопровождается сохранением внутри в-ва повышенного давления. Такое состояние существует из-за дефектов, к-рые препятствуют релаксации системы. Предполагается, что внутри КМ существует локальная структура китита или коэсита. Разность ΔG КМ и $\alpha\text{-SiO}_2$ (кварц) составляет $3 \pm 1,7$ кДж/моль.
Л. А. Резницкий

ΔG

И. 1989, № 7

SiO_2

Om. 30676

1988

110: 122603j Thermodynamic stability of amorphous metamictic silica under standard conditions. Landa, L. M. (Kuzbas. Politekh. Inst., Kemerovo, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1988, 303(1), 136-8 [Phys. Chem.] (Russ). The heats of dissoln. ΔH , were detd. for amorphous metamictic SiO_2 and quartz glass in HF aq. solns. Both forms have the same ΔH , -18.2 ± 1.4 kJ/mol, entropies 7.5-8.5 J/mol-K, and free energies of 5.8 kJ/mol. The results are discussed in terms of the glass structure and possible reinterpretations of the thermodyn. relationships.

(HF dissoln)

C.A. 1989, 110, ~14

SiO₂

1988

5 Б2001. Первые принципы определения кристаллов.
Crystals from first principles / Maddox J. // Nature.—
1988.— 335, № 6187.— С. 201.— Англ.

Описана попытка ряда японских ученых определить с использованием ЭВМ на основе параметров решеток и данных по силовым константам тетраэдрич. связей х-ки 4 структур полиморфных модификаций кремнезема: α -кварца, α -кристобалита, коэсита и стишовита и оценить их устойчивость при определенных термодинамич. параметрах. Эта первая попытка открывает возможности предсказания структур объектов с известным составом, но имеющих в очень ограниченном кол-ве или объектов с составами, меняющимися в объеме кристалла в линейных пределах, меньших чувствительности рентгеновского метода (например полупроводников с примесями добавками).

С. В. Соболева

политики

Х. 1989, № 5

SiO₂

1988

10 E656. О соотношении между показателем преломления и плотностью для полиморфов SiO₂. On the relationship between refractive index and density for SiO₂-polymorphs / Marler B. // Phys. and Chem. Miner.— 1988.— 16, № 3.— С. 286—290.— Англ.

Анализируются 5 различных аналитич. выражений, связывающих показатель преломления n и плотность ρ , для полиморфов SiO₂. Рассмотрены 13 полиморфов SiO₂ с диапазоном ρ от 1,76 до 2,92 г/см³. Наиболее адекватной является ф-ла $(\bar{n}^2 - 1) \{ [4\pi + b(\bar{n}^2 - 1)] \rho \}^{-1} = \alpha / M$, где $\bar{n}$ — усредненное значение n , M — молекулярный вес, α — поляризуемость, принимаемая постоянной для всех полиморфов SiO₂, $b = 1,21$ — параметр электронного перекрытия. Библ. 26. А. И. Коломийцев

плотность
полиморфов

ф. 1989, № 10

SiO₂

1988

14 Б2278. Ширина запрещенной зоны и плотность полиморфных модификаций SiO₂. Energy gap and density in SiO₂ polymorphs. Maj S. «Phys. and Chem. Miner.», 1988, 15, № 3, 271—273 (англ.)

Для различных полиморфных модификаций SiO₂ предложено полуэмпирич. соотношение между шириной запрещенной зоны E_G и плотностью ρ : $E_G = \sqrt[3]{39,24 - 13,8327 \rho}$ г. Вычисл. для низкот-рного кварца при $\rho = 2,65$ г/см³ величина E_G составляет 10,1 эВ (эксперим. значение 10,2); для стишовита при $\rho = 4,28$ г/см³ E_G равно 8,9 эВ. Крит. значение плотности при $E_G = 0$ согласно выведенной ф-ле равно $\sim 10,1$ г/см³, что хорошо согласуется со значением ρ для фазы высокого давл. SiO₂ со структурой флюорита CaF₂. С. В. Соболева.

Х. 1988, 19, N 14

SiO_2

1988

10 Б3057. Исследования полиморфизма SiO_2 при высоких давлениях методом молекулярной динамики. Возможная новая кубическая полиморфная модификация с высокой плотностью. Molecular dynamics studies of polymorphism of SiO_2 at high pressures: A possible new cubic polymorph with high density / Matsui Y., Matsui M. // Struct. and Magn. Phase Transit. Miner.— New York etc., 1988.— С. 129—140.— Англ.

С помощью методов компьютерного моделирования в рамках молек. динамики исследованы параметры гипотетич. перехода кристаллов SiO_2 из фазы флюорита в новую кубич. высокоплотную модификацию с пр. гр. $Ra3$. Переход протекает в течение 1 пикосек. и должен быть 1-го рода. Как показали вычисления, эта фаза стабильна в обл. давл. 0—250 ГПа. В новой фазе (a 4,441 Å, теор. плотность 4,56 г/см³) при нулевом

полимор-
физм

Х. 1990, N 10

давл. расстояние Si—O составляет 1,813 А, а среди 12 ребер O—O имеется 6 с расстоянием 2,345, и 6 с 2,766 А. Наиболее близким аналогом к новой фазе SiO₂ является рутил FeS₂. Сделано сравнение всех исследованных св-в фазы $P\alpha\bar{3}$ с фазой типа α -PbO₂, обычно появляющейся при попытках получения новой высокоплотной модификации SiO₂. В. А. Ступников

SiO_2

1988

8 Б2011. Моноклинная кристаллическая структура минерала могоanita SiO_2 . Die monokline Kristallstruktur des SiO_2 -minerals moganit / Mische G., Graetsch H., Flörke O. W., Fueß H. // Z. Kristallogr.— 1988.— 182, № 1—4.— С. 183—184.— Нем.

Рентгенографически определена структура природного полиморфа SiO_2 — могоanita. Установлено незначит. монокл. искажение решетки (a 8,770, b 4,879, c 10,720 Å, β 90,08°) с изменением идеализированной ф. гр. *Imab* на *I2/m*. Структура могоanita возникает в результате структурного двойникования SiO_2 -кварца и представляет собой 3-мерный каркас из соединенных вершинами в 4-, 6- и 8-членные кольца тетраэдров SiO_4 (Si—O 1,614, SiOSi 137°, 146°, 147°). С. В. Соболева

Кристал-
структура

Х. 1989, № 8

SiO_2

1988

Рак В. М., Серов Г. В.,
et al.

раз. Расплавы 1988, 2 (5),

21-8.

групп.

● (cur. FeO; I)

SiO_2

1988

4 Б3125. Кристаллообразование при термopаровой обработке кремнезема / Панасюк Г. П., Усов Л. В., Будова Г. П., Черенков Е. И., Лазарев В. Б. // Изв. АН СССР. Неорган. матер.— 1988.— 24, № 8.— С. 1318—1322.— Рус.

Методами РФА, микроскопич. и электронно-микроскопич. исследований изучены структурные превращения кремнезема под влиянием различных модификаторов. В процессе высокот-рного отжига кварцевого песка (КП) и кварцевого стекла (КС) после их вымачивания в р-ре NaOH (1—5 масс.%) наблюдалось появление сначала кристаллитной (КФ), а затем тридимитной фазы (ТФ) в случае КП и полное превращение КС в КФ или ТФ в зависимости от времени отжига. Последующая термopаровая обработка тех и др. образцов сопровождалась переходом КФ или ТФ в поликристаллич. кварц. В случае КП наблюдалось ориентированное зародышеобразование кварца, при к-ром ориентированные зародышевые микрокристаллы кв.

(Т_{т2})

X. 1989, № 4

ца (МК) заполняли весь объем зерна. Для образцов КС переход ТФ→кварц сопровождался образованием внутри зерна ТФ блоков из ориентированных МК, однако сами блоки внутри зерна были сильно разориентированы. При дальнейшей автоклавной обработке образцов из КП наблюдалось постепенное сращивание отдельных МК с образованием крупных монокристаллов, реже — двойников. Аналогичную картину наблюдали при кристаллизации в автоклаве аморф. кремнезема, содержащего 3 масс.% КОН и 1,5 масс.% Nd_2O_3 . Сделан вывод, что характер кристаллизации конечной фазы кварца связан со степенью упорядочения надмолек. структуры промежут. фаз (КФ и ТФ), формирующейся в процессе высокот-рного отжига в присутствии модификаторов.

Н. М. Аристова

Вок
ТАВ

SiO_2

1988

12 E806. Кристаллообразование при термopаровой обработке кремнезема. П а н а с ю к Г. П., Усов Л. В., Будова Г. П., Черенков Е. И., Лазарев В. Б. // Изв. АН СССР. Неорган. матер. 1988.— 24, № 8.— 1318—1322.— Рус.

Характер кристаллизации конечной фазы кварца из промежуточных кристобалита и тридимита непосредственно связан со степенью упорядоченности надмолекулярной структуры этих фаз, формирующейся в процессе высокотемпературного обжига в присутствии модификаторов. Резюме

ср. 1988, N 12.

SiO₂

1988

110: 145318j Theoretical evidence for a new ultra-high-pressure phase of silicon dioxide. Park, Key Taeck; Terakura, Kiyoyuki; Matsui, Yoshito (Inst. Solid State Phys., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 106). *Nature (London)* 1988, 336(6200), 670-2 (Eng). A hypothetical polymorph of silica with a modified fluorite (Pa $\bar{3}$) structure is proposed using first-principles electronic structure calcs. as a possible high-pressure phase. SiO₂-Pa $\bar{3}$ would have a d. of 4.46 (~6% denser than SiO₂-rutile at normal pressures) and should become more stable than SiO₂-rutile at pressures of ≥ 60 GPa. These results also suggest that MgSiO₃-perovskite, which is widely accepted as the major constituent within the earth's deep interior, may be unstable at very high pressure.

(Kobae para)

C.A. 1989, 110, N 16

SiO₂

1988

21 Б3173. Неравновесные фазовые переходы в SiO₂.
Романова Г. Ф., Ефремов А. А., Диденко П. И.
«Электрон. процессы на поверхности и в тонк. слоях полупровод. 9 Всес. симп., Новосибирск, 15—17 июня, 1988. Ч. 2». Новосибирск, 1988, 151—152

фаз. переход

Предложена модель процесса структурных перестроек, происходящих в тонких ПЛ SiO₂ под влиянием внешних воздействий и внутренних процессов. Сделан учет дополнит. изменения в пространстве конфигураций при неск. видах воздействия на систему. В рамках развитого формализма проведен анализ ряда эксперим. результатов, полученных методом МС вторичных ионов. Исследован эффект больших доз и ряд примесно-стимулированных структурных перестроек. В. А. Ступников

Х. 1988, № 21

SiO_2

(Om. 28563)

1988

Шифр В.К.,

расчет
подкрити-
ческой
изотерм

Физ. и химия стекла,
1988, 14, N 1, 137-140.

Расчет методом Монте-Карло
подкритической и изотерм для
ионной модели SiO_2

SiO_2

1988

16 Б3022. Калориметрическое изучение полиморфных модификаций кремнезема при высоких температурах. Жидикова А. П., Семенов Ю. В., Бабич Ю. В. «Высокотемператур. химия силикатов и оксидов. Тез. докл. 6 Всес. совещ., Ленинград, 19—21 апр., 1988». Л., 1988, 122—123

В микрокалориметре Кальве при 973 К измерены теплоты р-рения кварца и коэсита в расплаве $2\text{PbO} \cdot \text{B}_2\text{O}_3$, составившие $-4,22 \pm 0,20$ и $-5,84 \pm 1,20$ кДж/моль. Для перехода кварц—коэсит получено $\Delta_{\text{trs}}H(973 \text{ К}) = 1,62 \pm 1,22$ кДж/моль. А. С. Гусей

(ΔH_{trs})

Х. 1988, 19, N 16

SiO_2

1988

2 В4. Синтез безводного диоксида кремния из тетрахлорсилана / Зоря Л. Н., Лазарев В. Б., Онайко В. А., Панасюк Г. П., Бабиевская И. З. // Ж. неорганич. химии.— 1988.— 33, № 10.— С. 2462—2466.— Рус.

Исследована возможность синтеза безгидроксильного кремнезема в системах $\text{SiCl}_4 + n_a \text{H}_2\text{SO}_4$ (1), $\text{SiCl}_4 + n_a \text{HNO}_3$ (2), $\text{SiCl}_4 + n_a \text{N}_2\text{O}_5$ (3), в к-рых n_a (относит. число молей) варьировалось от 0,5 до 2. Эксперимент основывался на данных термодинамич. моделирования равновесных систем для $T=300\text{—}900\text{ K}$ и норм. давл. Для систем (1) и (2) не найдены эксперим. условия синтезов. В системе (3) получен диоксид кремния, не содержащий ощутимых кол-в примесей, что согласуется с результатами расчетов. Резюме

секрет

X. 1989, № 2

SiO₂

1989

- 1) 24 В21. Низкотемпературный способ получения безводного диоксида кремния / Буцкий В. Д., Зоря Л. Н., Лазарев В. Б., Панасюк Г. П., Подзолко Л. Г., Фалькенгоф А. Т. // Ж. неорганической химии.— 1989.— 34, № 9.— С. 2194—2198.— Рус.

Исследовано взаимодействие тетрахлорсилана с диоксидом азота и разработан новый низкотемпературный (313—333 К) способ получения безводного диоксида кремния. Рассмотрены факторы, влияющие на чистоту и выход конечного продукта. Синтезированный диоксид кремния охарактеризован при помощи хим. и масс-спектрального анализов, ИК-спектроскопии. Схемы реакций расшифрованы на основе данных газохроматографического анализа.

Резюме

Х. 1989, № 24

SiO_2

1989

21 Б3236. Обзор данных по растворимости и полимеризации двуокиси кремния. A review on solubility and polymerization of silica / Chan S. H. // Geothermics.— 1989.— 18, № 1—2.— С. 49—56.— Англ.

Обзор. Систематизированы данные по р-римости и полимеризации аморфной SiO_2 (I) в водн. р-рах (влияние т-ры, давл., pH, электролитов различной природы на р-римость I; влияние pH, пересыщения р-ров, т-ры, солей различной природы на полимеризацию I). Кинетика полимеризации I. Механизмы полимеризации I. Библ. 45.

А. С. Соловкин

раствори-
мость и по-
лимеризация

х. 1989, № 21

Кварцевые
аэрогели
 SiO_2

1989

11 E280. Низкотемпературные энергетические возбуждения и тепловые свойства кварцевых аэрогелей. Low-temperature energy excitations and thermal properties of silica aerogels / De Goer A. M., Calemczuk R., Salce B., Bon J., Bonjour E., Maynard R. // Phys. Rev. B.— 1989.— 40, № 12.— С. 8327—8335.— Англ.

В интервале t -р от 0,1 до 10 К измерены теплоемкость C_p , теплопроводность K , внутреннее трение Q и относит. изменение скорости звука $\Delta V/V$ на кварцевых аэрогелях низкой плотности (от 0,87 до 0,12 г/см³). Величина K измерялась адиабатич. методом в ³Не-криостате при t -рах от 300 мК до 10 К. Q и $\Delta V/V$ измерены на резонансной частоте образца от 60 мК до 10 К в криостате с растворением ³Не в ⁴Не. K измерена классическим стационарным методом в интервале от 0,1 до 10 К с использованием растворения ³Не в ⁴Не ниже 1 К. Библ. 29. В. Оскотский

C_p

ф. 1990, № 11

SiO_2 - аэрогель

1989

11: 241493j Low-temperature energy excitations and thermal properties of silica aerogels. De Goez, A. M.; Calemezuk, R.; Salce, B.; Bon, J.; Bonjour, E.; Maynard, R. (Dep. Rech. Fondam., CEN Grenoble, 38041 Grenoble, Fr.). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1989, 40(12), 8327-35 (Eng). Measurements were made of sp. heats, thermal conductivities, internal friction, and relative change in sound velocity in the temp. range 0.1-10 K on several base-catalyzed and neutral-reacted low-d. silica aerogels. The results show important differences in the behavior of classical, disordered dense solids ($\alpha\text{-SiO}_2$). They are analyzed within the framework of an elastic model of rods assembled in a disordered hierarchical network.

(C_p , 0.1-10K)

C.A. 1989, 111, N26

SiO₂

1989

! 3 E415. Оценка свободной энергии переохлажденных расплавов оксидов. Estimation of the free energy of undercooled oxide melts / Dubey K. S., Ramachandragao P., Lele S. // Phys. and Chem. Glasses.— 1989.— 30, № 4.— С. 163—165.— Англ.

В связи с разработкой теории зародышеобразования при кристаллизации и теории стеклования предложен метод оценки термодинамич. стимула зарождения в переохлажденной жидкости, который основан на разложении разности свободных энергий жидкой и твердой фаз ΔG при T -ре пл. в ряд Тейлора по степеням переохлаждения. Соответствующие коэф. разложения выражаются через скачки энтропии и теплоемкости. Полученное выражение хорошо описывает зависимость ΔG от переохлаждения для некоторых чистых (SiO₂, GeO₂, B₂O₃) и смешанных оксидов даже при значительных переохлаждениях в окрестности T -ры стеклования.

А. Б.

ΔF

22

ф. 1990, № 3

SiO₂-кеатит

1989

1 E779. Образование кеатита из гелей $\text{Li}_2\text{O}-\text{SiO}_2$ в присутствии оксида хрома. Formation of keatite from $\text{Li}_2\text{O}-\text{SiO}_2$ gels in the presence of chromium oxide / Ferreira da Silva M. G., Fernández Navarro J. M. // J. Non-Cryst. Solid.— 1989.— 109, № 2—3.— С. 191—197. — Англ.

Гели SiO_2 и $\text{Li}_2\text{O}-\text{SiO}_2$, содержащие 0,05—1 мол. % Cr_2O_3 , получены из водных растворов тетраэтилортосиликата, LiNO_3 и $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$. Затем они были термообработаны между 500 и 1000° С. Во всех образцах, содержащих одновременно ионы Li^+ и Cr^{3+} , при t -рах от 500 до 850° С образуется фаза высокого давления SiO_2 — кеатит. При введении только Li^+ или Cr^{3+} эта фаза не образуется. Увеличение содержания LiO_2 от 2,6 до 5 мол. % способствует образованию кеатита. Подобный эффект примесь Cr_2O_3 оказывает в интервале конц-ий 0,05—0,5 мол. %. При t -рах выше 650° С наряду с кеатитом образуется α -кварц, и обе формы SiO_2 существуют до 850° С, когда они переходят в кристобалит и тридимит. Нагрев образцов в восстановительной атмосфере (10% H_2 —90% N_2) сильно подавляет кристаллизацию кеатита.

А. И. Коломийцев

ср. 1990, № 1

Silica

DM 31056, 31964 1989

9 E649. Теплоемкость α -кварца от 298,15 до 847,3 К и β -кварца от 847,3 до 1000 К. Поведение свойств при переходе и переоценки термодинамических свойств. Heat capacity of α quartz from 298,15 to 847,3 K, and of β quartz from 847,3 to 1000 K — transition behaviour and revaluation of the thermodynamic properties / Grönvold Fredrik, Stølen Svein, Svendsen Sven R. // Thermochim. acta.— 1989.— 139.— С. 225—243.— Англ.

C_p :

Методом адиабатич. калориметрии измерялась теплоемкость C_p минеральных образцов кварца в диапазоне т-р 298,15—1000 К. Фазовый переход λ -типа между α - и β -структурами растянут на интервал 0,02 К выше точки 847,30 К максимума C_p , равного 1700 Дж/моль·К. Энтальпия α — β -перехода составляет 518 ± 5 Дж/моль. Молярная теплоемкость $C_{p,m}$, изменение энтальпии ΔH_m и энтропии ΔS_m во всем диапазоне 298,15—1000 К равны 69,14 Дж/моль·К, 45 633 Дж/моль и 75,00 Дж/моль·К соответственно. Полученные результаты сопоставлены с литературными данными. Проведена переоценка термодинамич. свойств кварца в диапазоне т-р 298,15—1700 К. Библ. 83. А. И. К.

ф. 1989, № 9

d-SiO₂

DM 31964, 31056 1989

Д 14 Б3028. Теплоемкость α -кварца от 298,15 до 847,3 К и β -кварца от 847,3 до 1000 К. Фазовый переход и пересмотр термодинамических свойств. Heat capacity of α quartz from 298,15 to 847,3 K, and of β quartz from 847,3 to 1000 K — transition behaviour and revaluation of the thermodynamic properties / Grønvold Fredrik, Stolen Svein, Svendsen Sven R. // Thermochim. acta.— 1989.— 139.— С. 225—243.— Англ.

Теплоемкость двух природных образцов кварца определена методом адиабатич. калориметрии в интервале 298—1000 К. Полиморфное превращение $\alpha \rightarrow \beta$ характеризуется резким пиком C_p с $C_{\text{макс}} = 1700$ Дж/моль К при 847,3 К, ширина т-рого интервала 0,02 К. Интегрированием аномальной части C_p в интервале 820—865 К вычислена $\Delta_{tgs}H = 518 \pm 5$ Дж/моль. Рекомендованы значения C_p , $H_{1000} - H_{298}$ и $S_{1000} - S_{298}$, равные 69,14 Дж/К моль, 45 633 Дж/моль и 75,00 Дж/К. моль. Критически проанализирован весь массив опубликованных термодинамич. данных по кварцу за 1911—1987 гг. Библи. 83.

Л. А. Резницкий

C_p , ΔH_{t2}

X. 1989, n 14

SiO_2 (quartz)

Om. 31964,
31056

1989

110: 180-108k Heat capacity of α quartz from 298.15 to 847.3 K, and of β quartz from 847.3 to 1000 K. Transition behavior and reevaluation of the thermodynamic properties. Groenvold, Fredrik; Stoelen, Svein; Svendsen, Sven R. (Dep. Chem., Univ. Oslo, 0315 Oslo, Norway). *Thermochim. Acta* 1989, 139, 225-43 (Eng). The heat capacities of two quartz mineral samples were measured by adiabatic shield calorimetry in the range 298.15-1000 K. The α - β transition occurs continuously in a λ -like fashion with max. heat capacity of about 1700 J/K mol over a 0.02 K interval near 847.30 K. The transitional enthalpy is 518 ± 5 J/mol over the range 820-865 K. The values of molar heat capacity, enthalpy and entropy are given. The results are compared with literature values and a reevaluation of the thermodyn. properties of quartz in the range 298.15-1700 K is presented.

Cp, ΔH

mermg. α - β

C.A. 1989, 110, N 20

Silva

1989

6i

111: 182094z Experiments with a new symmetrical thermo microbalance to 1500°C. Kaisersberger, E.; Janoschek, J. (NETZSCH-Geraetebau G.m.b.H., D-8672 Selb, Fed. Rep. Ger.). *Thermochim. Acta* 1988 (Pub. 1989). 148, 507-11 (Eng). Buoyancy effects are the main drawback to the precise evaluation of thermogravimetric expts. A recently introduced thermo microbalance, designed sym. with respect to the arrangement of the balance, furnaces and gas flow system, eliminates buoyancy effects at the TG signal. Very small mass changes (resoln. 0.1 μ g), can be detd. over a wide range of temps., using sample wts. in the range from micrograms up to 1 g. The long term stability is very high with typical TG drift of 0.1 μ g/h during isothermal work at high temps. and below 3 μ g on heating to the max. temp.



C.A. 1989, 111, N 20

SiO_2
(диатомит)

1989

5 БЗ135. Термохимическое модифицирование фильтрующих порошков на основе диатомита / Мchedlishvili Г. С., Хучуа Е. А., Мдивнишвили О. М., Уридия Л. Я., Гиоргадзе И. Г. // Изв. АН ГССР. Сер. хим.— 1989.— 15, № 3.— С. 211—214.— Рус.; рез. груз., англ.

Исследованы фазовые превращения в диатомите с добавками модификаторов различного состава в т-рном интервале 700—1000°С методом РФА. В кач-ве модификаторов использовались NaCl , NaF , Na_2SiF_6 и Na_2CO_3 . Модификаторы играют роль минерализаторов и способствуют переходу аморфн. кремнезема в фазу α -кристобалита. Этот процесс особенно усиливается при содержании NaCl выше 5%. Начало и скорость кристаллизации зависят от типа добавки. В нек-рых случаях образуется также тридимит. Фазовые изменения в диатомите обсуждены в связи с его фильтрующей способностью. Г. Л. Апарников

X. 1990, № 5

SiO₂

1989

9 E650. Переход от непрерывного к скачкообразному поведению в несоразмерной фазе кварца, обусловленный кинетическими эффектами. Kinetic crossover from continuous to discontinuous behavior in the incommensurate phase of quartz / Mogeon F., Dolino G., Valade M. // Phys. Rev. Lett.— 1989.— 62, № 2.— С. 179—182.— Англ.

При уменьшении скорости изменения т-ры обнаружен переход от непрерывного к прерывистому — скачкообразному изменению физич. свойств несоразмерной фазы кварца (существующей между α - и β -фазами в интервале 1,5 К около 846 К). Эффект изучен путем прецизионных измерений двупреломления Δn при циклич. изменении т-ры в интервале 0,7 К со скоростью от 90 мК/ч до 2 мК/ч и заключается в появлении на гистерезисной петле $\Delta n(T)$ регулярных ступенек, период и величина которых увеличиваются с уменьшением скорости. Эффект сильно зависит от концентрации дефектов в образце. Скачкообразный характер темпера-

∇t_2

ср. 1989, № 9

турной зависимости объясняется, по аналогии с известным в физике пластичности эффектом Портевина—Ле Шателье, нелинейной гистерезисной зависимостью сил трения от скорости движения «доменных стенок» несовершенной структуры, обусловленной их взаимодействием с подвижными примесями в кристалле. Библ. 27.

А. Отко



$\beta\text{-LiO}_2$

1989

2 Б3120. Химическая стабилизация β -кристобалита.
Chemical stabilization of β -cristobalite / Perrotta A. J.,
Grubbs D. K., Martin E. S., Dando N. R., McKin-
stry H. A., Huang C.-Y. // J. Amer. Ceram. Soc.— 1989.
— 72, № 3.— С. 441—447.— Англ.

Из систем $\text{Na}_2\text{O}\text{—Al}_2\text{O}_3\text{—SiO}_2$ и $\text{CaO}\text{—Al}_2\text{O}_3\text{—SiO}_2$ удалось получить химически стабилизированную β -фазу кристобалита. При нагреве в обл. т-р $800\text{—}1400^\circ\text{C}$ химически высокоактивных исх. в-в в состоянии геля и цеолита получается стабилизированная фаза крист. тв. р-ра. Информация о пределах стабильности β -фазы, о характеристиках превращения $\alpha\text{—}\beta$, об особенностях т-рной зависимости коэф. термич. расширения и о структурном состоянии крист. тв. р-ра получена методами высокот-рного РФА, ДСК, ДТГ, электронной микроскопии, ЯМР и термомеханич. анализа. Св-ва β -фазы с $a=0,71272$ нм, полученной из геля $\text{Na}_2\text{O}:\text{Al}_2\text{O}_3:$
: $13,9\text{SiO}_2$ при 1000°C , и с $a=0,71189$ нм, полученной из геля $\text{CaO}:\text{Al}_2\text{O}_3:40\text{SiO}_2$ при 1000°C , сопоставлены со св-вами β -фаз, полученных из NH_4 -содержащего цеолита и из стекол, гомогенизированных при 1750°C .

В. А. Ступников

(Т_т)

х. 1991, №2

SiO_2

(кварц)

T_{tr} ,
фазовые
переходы

ф. 1990, № 3

1989

1 3 E640. К термодинамической теории несоразмерных фазовых переходов в кварце / Санников Д. Г. // Физ. тверд. тела (Ленинград). — 1989. — 31, № 9. — С. 44—50

В термодинамич. потенциале, описывающем несоразмерные фазовые переходы в кварце (и в берлините), учитываются новые инварианты. Это позволяет получить последовательность фазовых переходов, наблюдаемую в эксперименте, а также получить новые решения для несоразмерной фазы. Предлагается скалярным воздействием на кристалл, напр., всесторонним сжатием P или напряжениями $\sigma_{xx} + \sigma_{yy}$, σ_{zz} , изменить либо род перехода из исходной в несоразмерную фазу, либо получить другое состояние несоразмерной фазы. Резюме

SiO₂

1989

) 11 E322. Измерения теплопроводности тонких пленок двуокиси кремния. Thermal conductivity measurements of thin-film silicon dioxide / Schafft Harry A., Suehle John S., Mirel Paul G. A. // Proc. IEEE Int. Conf. Microelectron. Test Struct., Edinburgh, 13—14th March, 1989: ICMTC.— New York (N. Y.), 1989.— С. 121—125.— Англ.

В интервале т-р от комнатной до 255°С измерена теплопроводность пленок плавленого кварца с толщинами 3,04 и 1,74 мкм, расположенных на подложке (111)Si. Нагревание осуществлялось с помощью тока, пропускаемого через металлизированное покрытие. Показано, что теплопроводность пленок значительно меньше, чем следует из ее величины для массивных образцов, уменьшается с повышением т-ры и с уменьшением толщины пленки.

В. О.

теплопроводн.

фр. 1989, № 11

SiO_2

1989

, 112: 54157v 'Testing of a sorption microcalorimeter and measurement of immersion heats of silica gel. Tan, Xinyi; Yan, Haikē; Hu, Riheng (Inst. Chem., Acad. Sin., Beijing, Peop. Rep. China). *Wuli Huaxue Xuebao* 1989, 5(5), 604-7 (Ch). A sorption microcalorimeter was constructed for the measurement of the heats of immersion of silica gels in water, toluene, and heptane.

(A Rtr)

C.A. 1990, 112, N8

SiO_2

1989

1 E778. Новые полиморфные модификации высокого давления в кремнеземе. New high pressure polymorphs of silica / Tsuchida Yoshihiko, Yagi Takehiko // Techn. Rept. ISSP. A.— 1989.— № 2099.— С. 1—15.— Англ.

В камере высокого давления с алмазными наковальнями и лазерным нагревом рентгенографически изучены фазы высокого давления SiO_2 при давлениях до 120 ГПа. При сжатии образцов α -кварца или аморфного кремнезема до 60 ГПа при комнатной т-ре образовался стишовит (структура типа рутила). При нагреве образца, сжатого до 10 ГПа, образовался хорошо кристаллизованный стишовит. При нагреве образцов, сжатых до 108 и 120 ГПа, возникала структура типа CaCl_2 , которая является искаженной структурой стишовита и несколько более плотной, чем стишовит. Этот переход является обратимым. При сжатии кристобалита при комнатной т-ре при ~10 ГПа возникает первая новая фаза, а при 30 ГПа вторая новая фаза, причем первая обратимым образом переходит в кристобалит, а вторая сохраняется при нормальных условиях. При нагреве этих фаз при давлении 10 ГПа они переходят в стишовит, что указывает на их метастабильный характер. Е. С. Алексеев

новые поли-
морфные мо-
дификации

ср. 1990, № 1

SiO_2

1989

11 E703. Новые индуцированные давлением структурные превращения в кремнеземе, полученные методом компьютерного моделирования. New pressure-induced structural transformations in silica obtained by computer simulation / Tsuneyuki Shinji, Matsui Loshito, Aoki Hideo, Tsukada Masaru // Nature.— 1989.— 339, № 6221.— С. 209—211. — Англ.

Методами молекулярной динамики изучены фазовые переходы в SiO_2 до 250 ГПа. Получены уравнения состояния для кристобалита, кварца, коэзита и стишовита. Результаты для кварца, коэзита и стишовита до их фазовых переходов согласуются с экспериментом. В кристобалите при 16,5 ГПа обнаружен переход в новую фазу с ромбической элементарной ячейкой с параметрами $a=5,20$ Å, $b=7,44$ Å, $c=5,58$ Å, пр. гр. *Стст*, которая в свою очередь переходит при 23 ГПа в стишовит. В кварце обнаружен переход при ~28—

T_{t2}

ф. 1989, № 14

30 ГПа в новую фазу со структурой типа α - PbO_2 . Козит при 15—20 ГПа переходит от моноклинной структуры к триклинной, а затем при 35—40 ГПа в структуру, в которой присутствует шестерная координация, что, возможно, соответствует описанной экспериментально аморфизации при ~ 30 —34 ГПа. Стишовит до 250 ГПа не обнаруживает фазовых переходов. Т. обр., предложенный потенциал, при котором с точностью до 10% воспроизводятся все структуры и объемные модули всех фаз SiO_2 при комн. т-ре и норм. давлении, может быть использован для предсказания новых фаз.

Е. С. Алексеев

SiO_2

1989

112: 166412s Heat conductivity of silica treated in order to intensify its preparation. Varuzhanyan, A. A.; Manukyan, G. G.; Ermolaev, I. K.; Talaev, I. V. (Inst. Obshch. Neorg. Khim., Yerevan, USSR). *Arm. Khim. Zh.* 1989, 42(11), 692-6 (Russ). The thermal conductivities of untreated and specially thermally treated samples of silica were measured at 303-1773 K, with an error not greater than ± 0.01 W/mK. A table of data is presented for the temp. interval 386-1475 K. A smooth temp. curve was obtained for the treated sample.

менюро-
лейко смб

с.А. 1990, 112, N 18

SiO_2

[Om. 33613]

1989

Vessal B., Amini M., et al.

(Russian) Phil. Mag. B 1989, 60, N6,
753-775.

Water-like melting behaviour
of SiO_2 investigated by the molecu-

lar dynamics simulation technique.

SiO₂

(Om. 32587)

1989

Wai C.M., Hutchison S. F.,

J. Chem. Educ. 1989,

66, N7, 546-549.

SiO₂

1990

(6p)

114: 30970f The effect of hydroxide concentration on the low temperature heat capacity and Raman scattering of vitreous silica. Ahmad, N.; Matiullah (Cent. Nucl. Stud., Islamabad, Pak.). *Solid State Commun.* 1990, 76(3), 433-5 (Eng). Heat capacities of three different samples of vitreous silica (Spectrosil-B contg. 1200 ppm OH, Heralux contg. 130 to 180 ppm OH, and Spectrosil-WF contg. 20 ppm OH) were measured in the temp. range of 1.5 to 20 K by using heat pulse technique to det. the effect of OH concn. on heat capacity. The results indicate that the sp. heats of Spectrosil-B and Spectrosil-WF are almost identical and are 20% higher than those of Heralux. It was concluded that the variations in the sp. heat of com. available vitreous silica sold under different trade names are not due the variation in the amt. of OH present in them. The Raman scattering from Spectrosils are almost identical in the frequency range from 10 cm⁻¹ to 140 cm⁻¹. The Raman coupling const. was detd. and its form is different from that predicted by Martin-Brenig theory.

C.A. 1991, 114, N 4

SiO_2

1990

14 БЗ100. Переходы α -несоизмерная фаза- β в кварце. Столетие исследований фазовых переходов со смещением. The α -inc- β transitions of quartz: A century of research on displacive phase transitions / Dolino G. // Phase Transit. В.— 1990.— 21, № 1.— С. 59—72.— Англ.

Обзор посвящен важнейшим результатам по α - β -переходу в кварце, полученным за последние 100 лет. Основные черты фазовых переходов в кварце, как и в AlPO_4 , к настоящему времени прояснены. На макроскопич. уровне — это переход 1-го рода с изменением симметрии, описываемый теорией Ландау. На микроскопич. уровне — это фазовый переход со смещением, вызванный небольшими перемещениями атомов (в основном вращением тетраэдров SiO_4). Переход из α -фазы в высокотемпературную промежуточную несоизмерную фазу является дискретным с уменьшением частоты слабых колебаний до 30^{-1} см и протекает по механизму заро-

(T_2)

X. 1992, № 14

дышеобразования и роста. Переход $\beta \rightarrow$ несоразмерная фаза является непрерывным с понижением частоты колебаний практически до нуля и нелинейным изменением многих физ. св-в. Эти 2 различных перехода разделены фазой с интересными необратимыми св-вами, подверженными влиянию упругих напряжений и точечных дефектов. Библ. 76. Е. М.



SiO_2

1990

5 Б3238. О проблеме растворимости оксида кремния при высоких pH. On the problem of silica solubility at high pH / Eikenberg J. // PSI Ber.— 1990.— № 74.— С. 1—54.— Англ.; рез. нем., фр.

Обзор данных по р-римости SiO_2 (I) в водн. р-рах с высоким pH: особенности строения тв. фазы, мономерные и полимерные формы гидроксидов; комплексы типа ионных пар $\text{NaSiO}(\text{OH})_3$ или $\text{NaSiO}_2(\text{OH})_2^-$ в водн. р-рах; константы равновесия. Соотв. аналитич. химия и ее достоверность. Р-римость I в водн. р-рах NaOH при т-рах 25 и 90°С. Образование полимеров быстро снижается с ростом т-ры, а р-римость повышается. Библ. 70. Л. В. Арсеенков

(растворимость)

X. 1991, N5.

SiO₂

[Om. 35 914]

1990

Billet P., Le Cléac'h A.,
et al.,

H₂,

nonumop - y. Geophys. Res. B 1990,
Физика

95, N 13, 635-655

SiO_2
(cristobalite)

C_p (300-1000K)
расчет
методом
Ф-МТ

1990
Grönvold F.,
Heat Capacity of Cristobalite in the region 300 to 1000 K and Transition Behaviour

45th Annual Calorimetry Conference USA, Ann Arbor 1993

Michigan, 1990 July 22-27, p. 143.

SiO₂

(Dm. 38481)

no cat 1989

Hildenbrand D.H., Lau K.H.,

J. Chem. Phys., in press

Sp.

(ΔH_f) Thermochemistry of gaseous
SiO(OH), SiO(OH)₂ and
SiO₂

LiO_2

(DM 34616)

1990

Jin Y., Wunderlich B.,

(G) J. Therm. Anal., 1990,
36, n 2, 765-789.

SiO_2

1990

11 E647. Плавление окиси кремния до 7 ГПа. Melting of silica up to 7 GPa / Kanzaki Masami // J. Amer. Ceram. Soc.— 1990.— 73, № 12.— С. 3706—3707.— Англ.

Методами порошковой рентгенографии и оптич. микроскопии изучена структура образцов SiO_2 , закаленных после выдержек при давлениях (P) от 3 до 7 ГПа и т-рах (T) 2300—2800°С в капсулах из графита, Re или Mo. Установлено наличие тройной точки β -кварц—коэзит—жидкость при $P=4,5$ ГПа и $T=2450^\circ\text{C}$. Наклон кривой плавления при $P>4,5$ ГПа возрастает и при $P=7$ ГПа $T_{\text{пл}}$ достигает $\sim 2700^\circ\text{C}$. На зависимости плотности закаленных образцов d_3 от P обнаружен скачок вблизи 4 ГПа. Значения d_3 сопоставлены с величинами d , полученными обработкой SiO_2 при т-рах $20 \leq T \leq 500^\circ\text{C}$. Е. З. С.

(T_m)

ф. 1991, № 11

SiO_2 (аморфн.)

1990

(SH, A-Ho)

113: 159596e Thermochemistry of the amorphous system silicon dioxide-germanium dioxide: comparison of flame hydrolysis materials to high temperature fused glasses. Maniar, P. D.; Navrotsky, A.; Draper, C. W. (Dep. Geol. Geophys. Sci., Princeton Univ., Princeton, NJ 08544 USA). Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1990, 172(Opt. Fiber Mater. Process.), 15-20 (Eng). Energetics and structure of germania doped silica prepd. from high temp. melts and

④ GeO_2 (аморфн.)

C. A. 1990, 113, N 18

by flame hydrolysis were investigated using transposed temp. drop and soln. calorimetry. Heat contents (H_{298}° - H_{1298}°) are similar for first and second drops for the flame hydrolysis preforms reflecting the effect of temp. of deposition (1073 K) in creating a relaxed structure which is not easily rearranged. Heats of soln. at 973 K in molten lead borate, of fused glasses along the SiO_2 - GeO_2 binary show ideal heats of mixing between the end members. This indicates that fused glasses behave in a simple manner, with ideal substitution of Ge for Si in the tetrahedral framework. Flame hydrolysis samples (preform and annealed glasses) also show ideal heats of mixing. This suggests that the flame hydrolysis materials are energetically very similar to their bulk-melted counterparts. This insensitivity of energetics to prepn. conditions is consistent with the previous studies on silica prepd. at various temps.

SiO₂

1990

(ΔH)

113: 90337u Molecular silica dioxide, matrix IR investigations and ab initio SCF-calculations. Mehner, T.; Goecke, H. J.; Schunck, S.; Schnoekel, H. (Anorg.-Chem. Inst., Westfälischen Wilhelms-Univ., D-8000 Muenster, 2 Fed. Rep. Ger.). *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1990, 580, 121-30 (Ger). Dimeric SiO₂ is formed in a matrix reaction between (SiO)₂ and O₂. Its structure, O:Si(μ-O)₂Si:O, can be deduced from the IR spectra of different ¹⁸O-substituted isotopomers. The obsd. frequency shifts (¹⁶O/¹⁸O and ²⁸Si/²⁹Si) are in accordance with those calcd. by a normal coordinate anal. The structure concluded from exptl. data is also confirmed by quantum chem. calcs. With the help of these calcs. the dimerization energy, 2SiO₂ → (SiO₂)₂ is obtained: -453 kJ mol⁻¹. The mechanism of formation of (SiO₂)₂ from (SiO)₂ and O₂ is discussed with respect to some similarities to the elementary process during oxidn. of the surface of Si wafers.

①₁₇ (SiO₂)₂

C.A. 1990, 113, N10

SiO_2

OM · 33648

1990

Richert P.,

Co, Ti_2 ,

ΔH_{Ti} ,

Phys. Chem. Min., 1990,
17, N 1, 79-88

SiO_2

1990

114: 49973f Mathematical modeling of an ionic liquid in a supercooled state. Shiff, V. K. (GIO, Leningrad, USSR). *Teplofiz. Vys. Temp.* 1990, 28(4), 672-6 (Russ). The isobaric and isochoric supercooling of ionic models for SiO_2 and BeF_2 melts at lower than m.p. temps. was studied by Monte Carlo calcns. on $N_p T$ - and $N_v T$ -ensemble. Based on the anomalous behavior of the heat capacity and breaking of the ρ vs. T isobar, an ionic liq.-supercooled state transition is deduced.

Gr

(4) ~~18~~ BeF_2

C.A. 1991, 114, N6

SiO_2

1990

Сейткаев В. А.

Менделеевко Н. Я. и др.

Изв. АН СССР. Георг. и др.

Матер. 1990. 26, № 1.

С. 118 - 120.

(сер.  MnO ; I)

ΔH_{soln} .

SiO_2

1990

Stukalo V. A., Neshchi-
menko N. Ya., et al.

IZV. Akad. Nauk SSSR,
Neorg. Mater. 1990, 26
(1), 121-4.

(cell. MnO ; I)

(ΔH_{mix})



1990

113: 160021n Gibbs energy of formation of some silicon compounds. Tolstoguzov, N. V. (Sib. Metall. Inst., USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Chern. Metall.* 1990, (8), 25-6 (Russ). Literature data were used to calc. the free energies of formation of SiO_2 (c,liq), SiO(g) , and SiC(c) for various temp. intervals. Two- and three-parameter correlation equations are presented.

 (Δf)

(+2) $\square$ SiO , SiC

C. A. 1990, 113, N 18

1990

 SiO_2

4 E740. Новые индуцированные давлением превращения окиси кремния при комнатной температуре. New pressure-induced transformations of silica at room temperature / Tsuchida Yoshihiko, Yagi Takehiko // Nature.— 1990.— 347, № 6290.— С. 267—269.— Англ.

На установке высокого давления при комн. т-ре рентгенографически изучено поведение SiO_2 . Показано, что при давл. ~ 10 ГПа происходит переход фазы SiO_2 со структурой кристобалита в кристаллич. фазу XI, а затем при ~ 30 ГПа возникает еще одна фаза XII, которая сохраняется до 60 ГПа. При нагреве выше 1000°C при давл. 15 ГПа фаза XI переходит в фазу со структурой стишовита. Предполагается, что новые фазы являются метастабильными.

Е. С. Алексеев

 (T_2)

ф. 1991, № 4

SiO_2

1990

Д 10 Е526. Исследование методом молекулярной динамики структурного фазового перехода $\alpha \rightarrow \beta$ в кварце. Molecular-dynamics study of the α to β structural phase transition of quartz / Tsuneyuki Shinji, Aoki Hideo, Tsukada Masaru // Phys. Rev. Lett.— 1990.— 64, № 7.— С. 776—779.— Англ.

Методом молекулярной динамики с использованием первопринципного неэмпирич. потенциала вида $U_{ij} = Q_i Q_j / (r + t_0(b_i + b_j)) \cdot \exp[(a_i + a_j - 1)/(b_i + b_j)] - c_i c_j / r^6$, где r — расстояние между атомами i и j , исследован фазовый переход из α -кварца в β -кварц. Показано, что переход происходит при $T = 850$ К, плотность α -кварца при $T = 300$ К равна $2,47 \text{ г/см}^3$, что на 7% отличается от эксперим. значения ($2,65 \text{ г/см}^3$). Показано, что β -кварц нестабилен и реализуется как среднее между фазами α_1 и α_2 с зависящими от T -ры длиной и временем корреляции.

Е. С. Алексеев

(17/12)

ср. 1990, № 10

SiO_2

1990

11 E291. Температурные коэффициенты линейного расширения поликристаллических фаз кремнезема при полиморфных превращениях / Вишневский И. И., Киреева Н. Л., Литвин М. Л., Сазонов Ю. И. // Изв. АН СССР. Неорганич. матер.— 1990.— 26, № 7.— С. 1476—1480

На основании дилатометрич. измерений, выполненных с температурным шагом $1-2^\circ\text{C}$, рассчитаны температурные коэф. линейного расширения (α) поликристаллических однофазных образцов кремнезема и механич. смесей различных его фаз, также определены максим. значения температурных коэф. линейного расширения при т-рах полиморфных превращений $\alpha \rightarrow \beta$ кристобалита и кварца и $\alpha \rightarrow \beta \rightarrow \gamma$ -тридимита. Продемонстрирована возможность использования значений $\alpha(t)$ для качественного и количественного фазового анализа кремнеземистых материалов. Резюме

ср. 1990, № 11

SiO_2

1990

16 Б3091. Система кремний — кислород. The O-Si (oxygen-silicon) system / Wriedt H. A. // Bull. Alloy Phase Diagr.— 1990.— 11, № 1.— С. 43—61.— Англ.

Обобщены лит. данные по фазовым соотношениям в системе кремний — кислород. Представлена фазовая диаграмма системы, в к-рой образуется единственное устойчивое соединения SiO_2 , существующее в нескольких модификациях: низкот-рный кварц (т-ра превращения $\sim 574^\circ \text{C}$), высокот-рный кварц ($\sim 870^\circ \text{C}$), тридймит ($\sim 1417^\circ \text{C}$), кристобалит (1470°C). Т. пл. SiO_2 1726°C . Охарактеризованы метастабильные фазы. Приведены кристаллографич. и термодинамич. х-ки полученных фаз. Библ. 247. Л. Г. Титов

(T_{t2}, T_m)

Х. 1991, N 16

SiO_2

1991

23 Б2533. Теплоемкость кварцевого стекла, облученного нейтронами / Давронов О., Касимов К., Касимов Н. А. // Радиационная физика твердого тела: Тез. докл. 1 Регион. конф. респ. Сред. Азии и Казахстана, Самарканд, 21—23 мая, 1991. Ч. 3.— Самарканд, 1991.— С. 892.— Рус.

Gr;

X. 1991, N 23

SiO_2

[Am. 35536]

1991

Дорогокупцев П. И.,

Докл. АН СССР, 1991,
317, N 6, 1450-1454

Cr , Ti ,
 ΔHt ,
ур-не соот.

SiO_2

[Омск 35716]

1991

Дорогокунов П.И.,

(А-ахоним-
лине) Золотые, 1991, №,
1230 - 1239.

SiO_2 ,
краснод.
Звонимов В. Б.
(ИГУ, химик)

Ом. 41892

1991

ЖФХ, 1991, 65, №2, с. 327 - 336

I. Температурное образование SiO_2
и кристаллита

$$\Delta H_f(\text{SiO}_2, \text{крас.}) = -51,247 \times 15 = -922,446 \text{ кДж/моль}$$

$$\begin{aligned} \Delta H_f(\text{крас.}) &= -896,49 - 1,33 \times 9 = -908,46 \text{ кДж/моль} \\ &= -217,13 \text{ кДж/моль} \end{aligned}$$

LiO₂

1991

11 Б3112. Порошковые рентгенограммы и фазовое отношение модификаций тридимита. X-ray powder diffraction patterns and phase relationship of tridymite modifications / Graetsch H., Flörke O. W. // Z. Kristallogr.— 1991.— 195, № 1—2.— С. 31—48.— Англ.

Рентгенографически изучены (λ Cu, камера Гинье и дифрактометр при t -ре 25—700° С) полиморфы тридимита (Т): упорядоченный низкот-рный Т (УНТ), разупорядоченный низкот-рный Т (РНТ) и модификация УНТ—УНТ1. Найдено, что при t -ре выше 160° С полиморфы УНТ и УНТ1 претерпевает переход в монокл. фазу — высокот-рный Т, при 210° С — в ромбич. высокот-рный Т, а выше 400° С — в гексагон. высокот-рный Т. Полиморф. РНТ обнаруживает только 1 фазовый переход при 170° С. Все изученные переходы обратимы. Приведена таблица значений d, I_{hkl} для УНТ, РНТ, УНТ1 и высокот-рного гексагон. Т, а также параметры элементарной ячейки всех изученных модификаций.

С. С. Мешалкин

(T₂)

X. 1992, N 11

SiO₂

1991

15 Б3104. Фазовый переход α — β в кристобалите, SiO₂. Анализ симметрии, доменная структура и динамическая природа β -фазы. The α — β phase transition in cristobalite, SiO₂. Symmetry analysis, domain structure, and the dynamical nature of the β -phase / Hatch D. M., Ghose S. // Phys. and Chem. Miner.— 1991.— 17, № 6. — С. 554—562.— Англ.

На основе формализма теории Ландау и методом проекции операторов выполнен анализ изменения симметрии при переходе кристобалита из β -фазы (пр. гр. $Fd\bar{3}m$ при 220° С в тетрагон. структуру с пр. гр. $P4_32_12$ (или $P4_12_12$). За стартовую точку берется идеальная кубич. ($Fd\bar{3}m$) структура типа C9 с параметром решетки a (7,432 А) слегка большим, чем известный a (7,195 А при 205° С) β -фазы, так, чтобы угол связи Si—O—Si оставался 180°, но длина связи Si—O была 1,609 А. Механизм превращения 1-го рода (инду-

(Tt2)

X: 1991, N 15

цированный флуктуациями) включает одновременно трансляцию и вращение тетраэдров SiO_2 , взаимодействующих вдоль направления $[110]$. Вследствие перехода в α -фазе ожидается три типа доменов, к-рые в α -фазе имеют макроскопич. размеры и статич. характер, а в β -фазе микроскопич. размеры и динамич. характер.



SiO₂ Jin Y., Wunderlich B. 1990

g. Therm. Anal. 1990,

(Cp, 348-548K) 36 (2), 765-789.

(Cor. ● Al; I)

SiO_2

DM 35704

1991

24 Б3025. Термодинамика полиморфных модификаций кремнезема / Кусков О. Л., Жидикова А. П., Семенов Ю. В., Бабич Ю. В., Фабричная О. Б. // Геохимия.— 1991.— № 8.— С. 1175—1185.— Рус. рез. англ.

Методом высокотемпературной калориметрии определены энтальпии образования синтетических образцов кварца (I) (23 опыта) и коэсита (II) (16 опытов) при 973 К и вычислена энтальпия фазового превращения $\beta\text{-I} \rightarrow \text{II}$: $\Delta H_{973,15}^\circ = 1,65 \pm 0,42$ кДж/моль. На основе данных по теплоемкости минералов с учетом калориметрических определений Акаоги и Навроцкой рекомендована новая величина энтальпии перехода $\alpha\text{-I} \rightarrow \text{коэсит}$: $\Delta H_{298,15}^\circ = 3,07 \pm 0,57$ кДж/моль. Из калориметрических определений, данных по фазовым равновесиям и уравнениям состояния минералов вычислены энтропия перехода $\alpha\text{-I} \rightarrow \text{II}$: $\Delta S_{298,15}^\circ = 2,91 \pm 0,60$ Дж/(моль·К), а также термодинамические функции II, $\Delta_f H_{298,15}^\circ = -907,63 \pm 1,5$ кДж/моль, $S_{298,15}^\circ = 38,55 \pm 0,63$ Дж/моль·К. Из P - T -данных по

($\Delta H_{\text{I-II}}$, ΔH_{II})

Х. 1991, № 24

фазовым равновесиям, калориметрич. определений и
ур-ний состояния минералов вычислены станд. значе-
ния энтальпии и энтропии перехода II — стишовит (III)
и термодинамич. ф-ции III.

гичес
порим
nir

SiO_2

1991

(T_{t2})

, 115: 80047b Low-temperature transient thermal anomalies in vitreous quartz. Madsen, James M.; Trefny, John U. (Phys. Dep., Colorado State Univ., Golden, CO USA). *J. Low Temp. Phys.* 1991, 83(3-4), 195-215 (Eng). Fast-time (10-100 μs) heat-pulse methods were employed to obtain simultaneously the sp. heats and thermal diffusivities of vitreous quartz at low temps. The expts. were designed to look for a time dependence in the sp. heat as predicted by the tunneling model used to describe the low-temp. thermal properties of amorphous materials. No time dependence was obsd. over the range 0.6 to 3.4 K when the pulses were analyzed using the response predicted by std. heat-diffusion theory. However, a large, reproducible, and systematic dependence on the input energy of the heat pulse was obsd. in the measured properties of the samples.

C.A. 1991, 115, #8

SiO_2

1990

6 E290. Теплоемкость аэрогелей двуокиси кремния при очень низких температурах. Specific heat of silica aerogels at very low temperatures / Sleator T., Bernasconi A., Felder E., Posselt D., Ott H. R. // Physica. B.— 1990.— 165—166, Pt 2.— С. 907—908.— Англ.

С помощью нового динамич. метода в интервале т-р от 0,07 до 25 К измерена теплоемкость C_p трех образцов аэрогелей SiO_2 с плотностями 0,145; 0,195 и 0,27 г/см³. Установлено, что величина C_p почти не зависит от плотности выше 1 К. Ниже 1 К для двух менее плотных образцов $C_p \sim T^{0,9}$ до $T=0,12$ К, а для более плотных $C_p \sim T^{1,0}$ в интервале от т-р 0,13 до 0,6 К. В. О.

(C_p)

ф. 1991, № 6

SiO_2

1990

18 Б3183. Исследование методом молекулярной динамики структурного фазового перехода $\alpha \rightarrow \beta$ в кварце. Molecular-dynamics study of the α to β structural phase transition of quartz / Tsuneyuki S., Aoki H., Tsukada M. // Phys. Rev. Lett.— 1990.— 64, № 7.— С. 776—779.— Англ.

Методом молек. динамики, с использованием межатомного ПТ для вычисления кластеров, исследован переход в SiO_2 от низкот-рной α -фазы с пр. гр. $P3_121$ при 846 К в высокот-рную β -фазу с пр. гр. $P6_222$. Использована аппроксимация ПТ жесткого иона и, поскольку т-ра перехода намного выше т-ры Дебая (470 К), применена классич. динамика. Однако в модели не обсуждается проблема существования промежут. несоразмерной фазы. Моделирование показало резкое изменение коэф. линейного расширения при $T_0 = 850\text{—}900$ К. Абс. величина равновесной плотности α -фазы при 300 К составила $2,47 \text{ г/см}^3$, что близко к

фазный
переход

X. 1990, N 18

эксперим. величине ($2,65 \text{ г/см}^3$). Никакого гистерезиса при переходе не обнаружено. При 850 К атомная конфигурация системы скачками меняется между двумя эквивалентными α_1 и α_2 структурами путем негармоничных движений с T -но зависимым временем корреляции.

В. А. Ступников



SiO₂

1990

12 Б3232. Растворимость аморфного кремнезема в щелочной водной среде при постоянной ионной силе Т Зарубин Д. П., Немкина Н. В. // Ж. неорган. химии. — 1990. — 35, № 1. — С. 31—38. — Рус.

Изучена р-римость аморф. осажженного SiO₂ при 25°С в водн. р-рах в обл. рН 8—11 при постоянных значениях ионной силы 1,0 и 3,0, поддерживаемых NaCl. Проведены также потенциометрич. измерения [H⁺] и вычислены значения средн. титруемого заряда на атом Si в жидк. фазе (Z) и в тв. фазе (Z_s) при стабильном равновесии р-римости. Зависимость Z_s от рН и результаты исследования осадков методами рентгенографии и низкот-рной адсорбции азота (БЭТ) показали, что структура тв. фазы, находящейся в равновесии с р-ром, меняется в обл. рН > 10. Зависимости р-римости от рН, конц-ии насыщения Si(OH)₄ в обл. рН > 10 также меняются. На основе данных в обл. рН < 10 установлены константы р-римости кремнезема в виде Si(OH)₄, обсуждается стабильность в р-ре анионов с зарядом —1 и —2 и полядерностью 2, 3 и 4.

растворимость

X. 1990, N 12

Показано, что аннион $\text{Si}_4\text{O}_6(\text{OH})_6^{2-}$ не является доминирующим в насыщ. щел. р-рах SiO_6 . Резюме

SiO_2

(стекло.)

C_p

(1.5-17K)

1991

22 Б318. Теплоемкость и низкочастотные колебательные состояния стекловидного кремнезема типа Spectrosil-WF. Heat capacity and low-frequency vibrational states of Spectrosil-WF / Ahmad N. // Pakistan J. Sci. and Ind. Res. — 1991. — 34, № 5. — С. 373—376. — Англ.

С использованием метода тепловых импульсов при T -рах 1,5—17K измерена теплоемкость Spectrosil-WF (стекловидного кремнезема, содержавшего менее 20 млн. д. OH). Кратко описан метод, к-рый м. б. использован для определения плотности низкочастотных колебат. состояний g из низкот-рой теплоемкости стеклообразных в-в. Найдено, что Spectrosil-WF имеет неквадратичную форму зависимости g от частоты (ν). С использованием величин $g(\nu)$, определенных из измерений теплоемкости и комбинац. рассеяния света, рассчитаны константы рамановского вз-вия $S(\nu)$. Установлено, что форма $S(\nu)$ не может быть объяснена в рамках теории Мартина—Бренига. В. Ф. Байбуз.

X. 1995, N 22

SiO_2

(От. 35 400)

1991

Дуровинский Л.С., Пило-
м Г.О. и др.,

Докл. АН СССР, 1991,

316, N 6, 1465-1468

Фазовое равнове-
сие. Сил-

шовит - Коттунисловская
модификация SiO_2 и SiO
термод. параметры

SiO₂ (аморфн.)

OM 36701

1992

117: 119518z Thermal conductivity and heat capacity of amorphous silica: pressure and volume dependence. Andersson, Staffan; Dzhavadov, Leonid (Dep. Phys., Univ. Umea, S-90187 Umea, Swed.). *J. Phys.: Condens. Matter* 1992, 4(29), 6209-16 (Eng). The thermal cond. (λ) and heat capacity per unit vol. (ρc_p) of amorphous SiO₂ were measured under hydrostatic pressure up to 1 GPa at room temp. by using a transient two-strip method. The thermal cond. was found to decrease slightly with increasing pressure. For the vol. dependence of λ expressed by the Bridgman parameter, $g = -(\partial \ln \lambda / \partial \ln V)_T$, the authors obtained $g = -1.5$. The exptl. value of g is discussed in conjunction with predicted g -values based on theor. models of $\lambda(T)$. The sp. heat capacity (c_p) calcd. from measured ρc_p was found to be almost const. with increasing pressure.

(G)

C.A. 1992, 117, N12

SiO_2
(aerogel)

(DM-37038)

1992

117: 176566n Low-temperature specific heat and thermal conductivity of silica aerogels. Bernasconi, A.; Sleator, D.; Posselt, D.; Kjems, J. K.; Ott, H. R. (Lab. Festkoerperphys., ETH Hoenggerberg, 8093 Zurich, Switz.). *J. Non-Cryst. Solids* 1992, 145(1-3), 202-6 (Eng). Sp. heat, C_p , and thermal cond., λ , were detd. on a series of base-catalyzed silica aerogels at 0.05-20 K. Results for both $C_p(T)$ and $\lambda(T)$ confirm that the different length scale regions obsd. in the aerogel structure are reflected in their dynamic behavior.

(6)

C.A. 1992, 117, N 18

SiO_2

1992

5 E494. Новая модель вызванного ударом фазового перехода α -кварц $\rightarrow$ стишовит в кремнеземе. New model for the shock-induced α -quartz $\rightarrow$ stishovite phase transition in silica / Boettger F. C. // J. Appl. Phys. — 1992 .—

(T₁₂)

ф. 1993, N5

состояния (позади фронта) может быть охарактеризована одним параметром $\lambda(r, t)$ — объемной долей стишовита в данный момент времени t в данном месте. Допускается, что в процессе нагружения λ может быть описана функцией плотности Гюгонио: $\lambda(r, t) = \lambda_H[\rho(r, t), t]$. Предполагается также, что вызванное ударом фазовое превращение начинается на равновесной фазовой границе ($\Delta G = 0$). Соответствие точности расчетов с экспериментом зависит от точности предсказания зависимости λ от ΔG . Если предположить, что $\Delta G \sim \lambda^{1/3}$, то характер превращения соответствует общей теории зарождения и роста фаз. Библ. 42.

Н. Т.

SiO_2

1992

1) 2 E256. Теплопроводность тонких пленок SiO_2 . Thermal conductivity of thin SiO_2 films / Brotzen F. R., Loos P. J., Brady D. P. // Thin Solid Films .— 1992 .— 207 , № 1—2 .— С. 197—201 .— Англ.

(тепловая
проводность)

ф. 1993, № 2

SiO_2

1992

Dembovskii S. A.

(4_{t_2}P , T_{t_2}) Solid State Commun.
1992, 82 (9), 641-4.

(cell. ● B_2O_3 ; $\overline{I}$)

SiO_2

1992

2 Е603. Синтез высокоплотной фазы двуокиси кремния в ударных волнах / Герман В. Н., Подурец М. А., Трунин Р. Ф. // Свойства конденсир. веществ при высок. давлениях и температурах / М-во атом. энерг. и пром-сти. ЦНИИ упр., экон. и инф. — Б.м., 1992. — С. 287—288. — Рус.

Методом рентгеноструктурного анализа исследована кристаллич. структура SiO_2 после обжатия ее ударными волнами с конечной амплитудой 350, 500, 700 и 900 кбар. Установлено, что воздействие на образцы SiO_2 ударной волной амплитудой 700 и 900 кбар приводит к перестройке решетки α — кварца в ромбич. решетку с параметрами $a=4,30$ Å, $b=4,70$ Å и $c=4,50$ Å. Кристаллич. плотность новой фазы SiO_2 , вычисленная из параметров решетки. $\rho=4,435$ г/см³.

(T_{t2})

ф. 1993, №2

1992

F: SiO₂

P: 1

10Б225. Структурные свойства девяти полиморфных модификаций диоксида крем
Structural properties of nine silica polymorphs / Keskar
Nitin R., Chelik James R. // Phys. Rev. B. - 1992. - 46, N 1. - С. 1-13. -
Англ.

РЖХ 1997

SiO_2

1992

/ 8 E552. Структурные свойства девяти полиморфных фаз двуокиси кремния. Structural properties of nine silica polymorphs / Keskar N. R., Chelikowsky J. R. // Phys. Rev. B .— 1992 .— 46 , № 1 .— С. 1—13 .— Англ.

Рассмотрены структурные и упругие свойства полиморфных фаз SiO_2 . На основе неэмпирич. подхода изучен λ -кварц, стишовит, структуры типа $CaCl_2$, флюорита, структура с пр. гр. Pa 3. Они соответственно являются представителями структур с координацией катионов, равной 4, 6 и 8. С помощью полевой модели с парными межатомными силами изучены эти структуры, а также другие полиморфные фазы типа β -кварца, λ - и β -кристобалита, β -тридимита. Для всех структур определены изменения параметров решетки и внутренних координат в зависимости от давления, а также получены ур-ния состояния. Проведено сравнение с эксперим. данными.

Е. С. А.

(Tt2)

Ф. 1993, N 8

SiO_2

1992

17 Б2036. Статическое разупорядочение в додекасиле 3С. Монокристалльное исследование на синхротронном излучении. Static disorder of dodecasil 3C. A single-crystal study with synchrotron radiation /Könncke M., Miehе G., Fuess H. //Z. Kristallogr. —1992 .—201 ,№ 1—2 .—С. 147—155 .—Англ.

Проведен РСТА (λ 0,593 А (синхротронное излучение), анизотропный МНК по 544 отражениям до R 0,057) при 573 К додекасила 3С 136SiO_2 (I), синтезир. гидротермально при 200° С. Кристаллы I кубич., а 19,369 А, ф. гр. $Fd\bar{3}m$. Найдено расщепление позиций трех атомов О, меж-
атомные расстояния в структуре I Si—О 1,569—1,598 А, углы SiOSi 157,50—175,78°. Обсуждается выбор ф. гр. для I.
С. С. Мешалкин

X. 1993, N 17

SiO₂

1992

9E290. Тепловые свойства аэрогелей кремнезема между 1,4 и 330 К. Thermal properties of silica aerogels between 1,4 and 330 K / Scheuerpflug P., Hauck M., Fricke J. // J. Non - Cryst. Solids. — 1992. — 145, № 1—3. — С. 196—201. — Англ.

Теплоемкость C_p и теплопроводность λ аэрогелей SiO₂ (I) с плотностью 62—262 кг/м³ измерены в интервалах T -р 5—330 и 1,4—330 К соответственно. Определены теплофиз. свойств пористого I как возможного теплоизоляционного конструкционного материала в космич. технике и эффективного адсорбента в вакуумной технике.

Зависимость $\lambda(T)$ I аналогична λ SiO₂, vit в интервале 100—330 К и λ , викор в интервале 20—330 К, но по

(Cp)

Ф. 1993, № 9

SiO_2

1992

7E490. Свободная энергия Ландау и поведение параметра порядка при фазовом переходе α/β в кристобалите. Landau free energy and order parameter behaviour of the α/β phase transition in cristobalite / Schmahl W. W.; Swainson I. P., Dove M. T., Graeme-Barber A. // Z. Kristallogr.. — 1992. — 201, № 1—2. — С. 125—145. — Англ.

Исследован фазовый переход 1-го рода от кубич. структуры с пр. гр. $\text{Fd}\bar{3}\text{m}$ к тетраг. структуре с пр. гр. P4_12_12 при t -ре 533K в кристобалите со скрытой теплотой 1256 Дж/моль. Переход происходит с большим (5%) скачком объема. Методами нейтронографии и порошковой рентгенографии изучено поведение во времени структурного параметра порядка при α — β -переходе в кристобалите. Система хорошо описывается с помощью однодоменного приближения с единственной активной компонентой параметра порядка и не получено под-

(T_2)

ф. 1993, N 7

тверждения существования связи между возможными остальными шестью компонентами. Показано, что теория Ландау может быть успешно применена для количественного анализа фазовых переходов 1-го рода. Хотя скачок ΔQ параметра порядка при разрывности 1-го порядка составляет 0,8, тепловое расширение низкотемпературной фазы, а также скачок деформации количественно определяются линейной связью между деформацией и квадратом амплитуды параметра порядка, соответствующим несобственному сегнетоупругому поведению. Е. С. А.



SiO_2

1992

7E489. Изучение фазового перехода кристобалита в стишовит псевдопотенциальным периодическим методом Хартри—Фока. Pseudopotential periodic Hartree—Fock study of the cristobalite to stishovite phase transition / Silvi B., Jolly L.-H., D'Arco Ph. // J. Mol. Struct. Theochem.. — 1992. — 260. — С. 1—9. — Англ.

Silicon is tetracoordinated in most silica polymorphs except stishovite, in which it is hexacoordinated. Pseudopotential periodic Hartree—Fock calculations have been performed to study a possible reaction pathway between cristobalite and stishovite. The calculated transition pressure (6 GPa) is consistent with the stishovite synthesis pressure range, whereas the activation enthalpy at 0 K is predicted to be of the order of 125 kJ per SiO_2 mole under that pressure. Electron density has been plotted for different geometries intermediate between low-cristobalite and stishovite equilibrium structures. The ionicity increases and the electron density around oxygen and silicon atoms becomes more spherical as the system becomes hexacoordinated.

(Tt2)

dp 1993, N7

SiO_2

See John S., Aug D.D., 1992
Le Page Y.,

(Hz) Phys. Rev. B. - 1992,
46, N 10, C. 5933 - 5938

Умножение алгебраического квантума
ли фазового  гравитации

P.A.P. N 10, 1993, 10E601

SiO₂

1993

19 Б3108. Применение термомеханического и дифференциально-термографического анализа для изучения поведения кристаллизации SiO₂ в процессе термического превращения каолинита. Application of TMA and DTA for study of the crystallization behaviour of SiO₂ in the thermal transformation of kaolinite /Chakravorty A. K. //J. Therm. Anal. — 1993. — 39, № 3. — С. 289—299. — Англ.; рез. нем.

С помощью ТМА, ДТМА, ДТА, РФА исследовано термич. поведение каолинита, в частности, кристаллизация аморф. SiO₂. В экспериментах глину формовали в цилиндрич. образцы массой 5 г. Превращения соответствуют

процессу $\text{SiO}_{2(\text{аморф.})}$ $\xrightarrow{1420^\circ \text{C}}$ α -кристобалит ($\rho = 2,22 \text{ г/см}^3$) $\xrightarrow{\text{охлаждение}}$ β -кристобалит ($\rho = 2,38 -$

$2,34 \text{ г/см}^3$).

Б. Г. Коршунов

X. 1993, № 19

SiO_2

1993

7 Б3088. Растворение кварцевого стекла в расплаве высокочистого кремния /Девятых Г. Г., Еремин А. И., Львов А. Ю., Михеев В. С., Прончатов А. Н. //Высокочист. вещества. — 1993. — № 5. — С. 7—14. — Рус.; рез. англ.

Изучен процесс р-рения кварцевого стекла в расплаве высокочистого кремния в интервале t -р 1430—1520° С. За интенсивностью процесса следили по убыли толщины кварцевых пластинок, помещенных в жидк. кремний. Скорость р-рения кварцевого стекла вблизи открытой поверхности расплава в зависимости от t -ры изменялась от 25,5 до 73,7 мкм/ч, в глубине жидк. кремния — от 5,4 до 8,5 мкм/ч.

X. 1994, № 7

SiO_2

1993

7 Б2006. **Высокотемпературные фазовые переходы в тридимите Штайнбаха.** High-temperature phase transitions in Steinbach tridymite /de Dombal R. F., Carpenter M. A. //Eur. J. Miner. .—1993 .—5 ,№ 1—6 .—С. 607—622 .—Англ.

Методами рентгеновской дифракции высокого разрешения (высокот-рная камера-монокроматор Гинье), ДСК и ИК-спектроскопии исследованы фазовые переходы в тридимите Штейнбаха. При охлаждении образцов обнаружены 2 перехода. 1-й из них при 465°C , связанный с изменением симметрии $P6_3/mmc$ в $P6_322$, 2-го рода и характеризуется значит. деформацией объема. При 2-м переходе ($T_c \approx 353^\circ\text{C}$) становится стабильной ромбич. решетка C (симметрия $C222_1$). Предложенная для него модель перехода 2-го рода согласуется с наблюдаемыми фактами. Для обоих переходов определены небольшие

(T_{t2})

X. 1995, № 4

SiO₂

1993

17 Б3013. Химия фрагментов, элементов и границ в приложении к термодинамическому описанию кремнезема как твердого тела. 1. Определения и общие вопросы /Евдокимов В. Б. //Вестн. МГУ. Сер. 2 .—1993 .—34 ,№ 1 .—С. 49—54 .—Рус.

Предполагается, что кремнезем и родственные ему тв. тела можно представить как совокупность фрагментов с присущими им характерными колебаниями. Каждый фрагмент можно разложить по элементам и границам. Система фрагментов не обменивается с окружающей средой в-вом, а внеш. магнитные и электр. поля отсутствуют. Между фрагментами возникают условные хим. р-ции, к-рые сопровождаются обменом фононами. Поэтому рассматривается установление термич. равновесия в системе фрагментов.

X, 1993, N 17

SiO_2

1993

8 БЗ003. Химия фрагментов, элементов и границ в приложении к термодинамическому описанию кремнезема как твердого тела .2 .Фундаментальные соотношения /Евдокимов В. Б. //Вестн. МГУ. Сер. 2 .—1993 .—34 ,№ 3 .—С. 266—272 .—Рус.

Рассмотрена замкнутая система при наличии в ней хим. р-ций на t -ном интервале $0 < T < T_p$. Непрерывный колебат. континуум тв. тела представляется совокупностью колебаний фрагментов. Показано, что скорость произ-ва энтропии при $T \rightarrow 0$ равна нулю. Поэтому если на том же t -ном интервале есть минимум произ-ва энтропии, то тогда на том же t -ном интервале имеется такая t -ра $T = T_m$, при к-рой достигается максимум произ-ва энтропии. Показано, что t -ная зависимость константы скорости произ-ва энтропии определяется функцией $G(T)$, уста-

X.1994, n8

новлен ее физич. смысл, связь с t -ной зависимостью констант скорости р-ции и со средством. Рассмотрены св-ва функций $G(T)$ и показано, что константы скорости с t -ной зависимостью по Аррениусу не удовлетворяют св-вам функции $G(T)$.

SiO₂

1993

17 Б3012. Химия фрагментов, элементов и границ в приложении к термодинамическому описанию кремнезема как твердого тела .3 .Модель кремнезема, тепловые эффекты условных реакций и теплоты образования фрагментов, границ и элементов /Евдокимов В. Б. //Вестн. МГУ. Сер. 2 .—1993 .—34 ,№ 5 .—С. 451—464 .—Рус.

Предлагается модель кремнезема, для которой можно записать миним. число условных р-ций, достаточное для описания модели. Показано, что эти р-ции являются взаимосвязанными, благодаря чему определение параметров для вычислений достигается методом многомерной минимизации функции $G(T)$ и является самосогласованной задачей. Для отбора колебаний используются результаты эксперим. и теор. работ; приведен список условных р-ций и их тепловые эффекты.

(165)

X.1994, N17.

SiO_2 (кварц)

1993

Groenveld Fredrik.

Pure Appl. Chem. 1993,

65 (5), 927-34.

Ср в 2х
компонент-
ных системах
и переход
конд/конд

(св α - Al_2O_3 ; I)

SiO₂ (vitr.)

1993

119: 57285b Time-dependent specific heat in vitreous silica using diffusivity measurement. Ikari, Hiroshi (Fac. Educ., Shizuoka Univ., Shizuoka, Japan 422). *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1* 1993, 32(5B), 2220-2 (Eng). Pulsed diffusivity measurements on samples of vitreous silica immersed in liq. helium were performed. The obsd. short-time diffusivity is in good agreement with the dc diffusivity over the temp. range 1.5-3.9 K, which is consistent with the earlier diffusivity measurements. The result at 1.5 K is, however, not consistent with the time-dependent sp. heat measurement in an adiabatic sample arrangement. This may be due to the different sample-to-bath time consta. The diffusivity at low temps. seems to remain an unsolved problem.

(Cp)

C. A. 1993, 119, N 6

SiO_2

1993

23 Б2295. Структура стеклообразного кремнезема
/Леко В. К. //Физ. и химия стекла .—1993 .—19 ,№ 5
.—С. .—Рус.

Рассмотрены результаты эксперим. (дифракц. методы, ЯМР, рентгеноэлектронная и ИК-спектроскопии, растворимость газов) и теор. (квантово-мех. расчеты, мех. и компьютерное моделирование) исследований структуры стеклообразного кремнезема. Обсуждены вопросы, связанные с природой хим. связей $\text{Si} - \text{O}$, распределением углов $\text{Si} - \text{O} - \text{Si}$, топологией сетки, ролью малых колец, дефектами сетки, влиянием на структуру стекла т-ры и давления. Проведено сопоставление структуры стекла со структурами различных крист. и аморф. фаз кремнезема.

х. 1994, №23

SiO₂

1993

3 Б2035. Атермическое поведение и термический гистерезис при фазовом переходе SiO₂ — α/β-кристобалит. Athermal transformation behaviour and thermal hysteresis at the SiO₂—α/β-cristobalite phase transition /Schmahl W. W. //Eur. J. Miner. .—1993 .—5 ,№ 1—6 .—С. 377—380 .—Англ.

Проведено рентгенодифракц. исследование α/β-фазового перехода в кристобалите и обнаружена стабильная и воспроизводимая гистерезисная петля с сосуществованием фаз на обеих ветвях. Превращение является т-рно зависимым, а не изотермич. Атермич. поведение аналогично мартенситным переходам в металлах и сплавах и сходно с гистерезисом для магнитных материалов во внеш. полях.

В. Л. Лебедев

фаз. переход

X.1995, №3

SiO_2

1993

2) 6 БЗ071. Кинетика атермического перехода и термический гистерезис при слабовыраженных фазовых переходах первого рода. Athermal transformation kinetics and thermal hysteresis at weakly first order Phase transitions /Schmahl W. W. //16th Congr. Int. Union Crystallogr., Beijing, 21—29 Aug., 1993: IUCrXVI: Collect. Abstr. Aug. 21 Aug. 29, 1993.—Beijing, 1993.—С. MS—21.03.93.—Англ.

($T_{\pm 2}$)

Методами РФА (скорость сканирования по t -ре 0,03 К/мин) и ДСК (сканирование 5 К/мин) исследована природа α — β -фазового перехода в кристобалите вблизи 520 К. Обоими методами наблюдалась область сосуществования фаз с гистерезисной петлей ± 15 К. Превращение обладает атермич. характером, подобно мартенситным переходам в металлах. В. А. Ступников

Х. 1994, № 6

SiO₂

1993

14 Б3015. Стандартная молярная энтальпия образования жидкого тетраэтоксисилана $\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$. The standard molar enthalpy of formation of tetraethoxysilane: $\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$ (l) /van der Vis M. G. M., Cordfunke E. H. P. //J. Chem. Thermodyn. — 1993. — 25, № 10. — С. 1205—1210. — Англ.

При температуре 298,15 К в изопериболич. калориметре измерены станд. энтальпии р-рения жидк. $\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$ и $\text{C}_2\text{O}_5\text{OH}$ и аморф. SiO_2 в водн. р-рах смеси HF и HCl. На основе результатов измерений получены следующие значения станд. теплот образования: $\Delta_f H^\circ(\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4, \text{l}, 298,15 \text{ K}) = -1408,0 \pm 2,4 \text{ кДж/моль}$ и $\Delta_f H^\circ(\text{SiO}_2 \text{ ат.}, 298,15 \text{ K}) = -899,63 \pm 1,18 \text{ кДж/моль}$. В. Ф. Байбуз

$\Delta_f H^\circ$

(7) $\square$

X. 1994, N 14.



$\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$

SiO₂

1993

4 Б2016. Фракционирование изотопов кислорода в полиморфных модификациях SiO₂ и Al₂SiO₅: влияние кристаллической структуры. Oxygen isotope fractionation in SiO₂ and Al₂SiO₅ polymorphs: effect of crystal structure /Zheng Yong-Fei //Eur. J. Miner. .—1993 .—5 ,№ 4 .—С. 651—658 .—Англ.

полиморфная
модификация

Модифицированным методом инкрементов проведены расчеты фракционирования изотопов кислорода в полиморфных модификациях SiO₂ (I) и Al₂SiO₅ (II). Моделированием выявлена тенденция изотопа ¹⁶O концентрироваться в более плотных фазах модификаций высокого давл. В модификациях I, Si^{IV} O₂^{II}, изотопное фракционирование между ними при высоких т-рах мало. Однако, стишовит (КЧ Si6) по отношению к др. модификациям I, характеризуется существенным обеднением по ¹⁸O, обусловленным значит. изменением крист. структуры. Порядок

Х. 1994, №4

истощения модификаций II по ^{18}O следующий: силлиманит $\rightarrow$ андалузит $\rightarrow$ кианит. По-видимому, влиянием давл. на фракционирование изотопов кислорода в тв. минералах нельзя пренебрегать на глубине нижних слоев земной коры и мантии, если изменения давл. в геологич. процессах вызывают значит. модифицирование таких кристаллографич. параметров минералов, как КЧ катиона по кислороду и межатомным расстояниям. Ф. М. Спиридонов



SiO₂

1994

Akaogi M., Kojitani H.,
et al.,

16th Gen. Meet., Pisa,
Sept. 4-9, 1994: Abstz.
Int. Mineral. Assoc. - [Pi-
sa], 1994, C. 1-10.

P.A.X.N 11, 1995, 11 58032

SiO_2

1994

5 Б2014. Возможность [существования] «постстишовитовых» фаз кремнезема при давлениях до 100 ГПа. The possibility of «post-stishovite» phases of silica at pressure up to 100 GPa /Dubrovinsky L. S., Saxena S. K., Belonoshko A. B. //16th Gen. Meet., Pisa, 4 — Sept., 1994: Abstr./Int. Mineral. Assoc. — Pisa, 1994. — С. 105—106. — Англ.

При экспериментах со смесью Fe и аморф. SiO_2 при 800 кбар методом РФА обнаружены рефлексы при 1,50, 1,49, 1,42 Å, к-рые интерпретированы как наличие фазы со структурой типа $\alpha\text{-PbO}_2$. Расчеты сравнит. устойчивости этой фазы и стишовита методами молек. динамики и минимизации энергии Гиббса дали противоречивые результаты. П. П. Федоров

(Tt₂)

X. 1995, n5

SiO_2

1994
15 Б23. Фазовые переходы в кристобалите и родственных структурах, изученные с помощью инфракрасной эмиссионной спектроскопии при изменяемой температуре. Phase transitions in cristobalite and related structures studied by variable temperature infra-red emission spectroscopy / Finnie K. S., Thompson J. G., Withers R. L. // J. Phys. and Chem. Solids .— 1994 .— 55 , № 1 .— С. 23—29 .— Англ.

(T₂)

Фазовые переходы α -формы в β -форму, характерные для кристобалита и родственных ему структур изучены на примере SiO_2 , AlPO_4 , NaAlSiO_4 , NaAlO_2 с помощью инфракрасной эмиссионной спектроскопии для диапазона температур 100—1200 °С. Кристобалитная форма SiO_2 получена отжигом кварцевого стекла при 1600 °С 48 ч, кристобалитная форма AlPO_4 получена отжигом AlPO_4 при 1600 °С 24 ч, NaAlO_2 синтезирован при отжиге при 1000 °С 16 ч и при 1200 °С 16 ч. Для спектров диффузного отражения, зарегистрированных при комнатной температуре отмечено смещение всех средних частот кроме одной при замещении Si на Al или заполнении пустот структуры кристобалита атомами Na. Для ИК эмиссионных спектров отмечены резкие изменения при фазовых переходах в области 550—850 см⁻¹.

43

X. 1996, N 15

В. П. Сиротинкин

F: SiO₂

P: 1

1994

9B214. Структура и химия полиморфов SiO₂ низкого давления. Structure and chemistry of the low-pressure silica polymorphs / Heaney P. J. // Rev. Miner. - 1994. - 29. - С. 1-40. - Англ.

Обзор. Рассматривается местонахождение в природе, структура, фазовые превращения полиморфов SiO₂ низкого давления (кварц, тридимит, кристобалит). Во всех этих фазах при переходах происходит смещение атомов со структурным сжатием при понижении температуры. Изучен механизм, контролирующий эти превращения. Переход 'бета'-'альфа' кварц осуществляются через промежуточную фазу (I) устойчивую при 573-574,3 °С. Методами рентгенографии и просвечивающей электронной микроскопии показано, что I состоит из дофинейских микродвойников, которые несоразмерномодулированы. Метеоритный и синтетический тридимит при понижении температуры меняет симметрию от гексагональной к ромбической (OC, OS, OP) до моноклинной. Фазовые переходы между тридимитами (PO-n и MX-1) Земли более сложные. Библ. 271.. Полиморфизм, Ttr.

X. 1996, №9

SiO_2

1994

Hildenbrand D. L.,
Lau R. H.

ΔH_f

J. Chem. Phys. 1994,
101, N7. C. 6076-6079.

(see  $\text{SiO}(\text{OH})$; I)

SiO_2

1994

13 B212. Структурный фазовый переход в тридимите [между] гексагональной и ромбической модификациями. The hexagonal $\longleftrightarrow$ orthorhombic structure transition in tridymite / Kihara K. // 15th Eur. Crystallogr. Meet. (ECM-15), Dresden, 28 Aug. — 2 Sept., 1994: Book Abstr. — Munchen, 1994. — С. 544. — Англ.

Тщательное измерение параметров решётки кристаллов тридимита, выросших на ПВ бруска плавленого кварца, вблизи 420°C — т-ры фазового перехода между ромбич. $\text{C}222_1$ — гексагон. $\text{P}6_3/\text{mmc}$ модификациями не выявило никаких указаний на существование промежуточной гексагон. модификации с ф. гр. $\text{P}6_322$, описанной в работе De Dombal R. F., Casrpenier M. A., Eur. J. Mineral, 1993, v.5, p. 607—622. Переход заключается в постепенном повороте SiO_4 -групп вокруг осей второго порядка, в то время как предлагавшаяся ф. гр. $\text{P}6_322$ требует смещения вдоль (001). П. П. Федоров

(T_{t2})

X. 1995, N 13

1994

F: SiO₂

P: 1

10Б2374. Термохимия кристаллической и аморфной окиси кремния. Thermochemi of crystalline and amorphous silica / Navrotsky A. // Rev. Miner. - 1994. 29. - С. 309-329. - Англ.

Представлен обзор имеющихся к настоящему моменту времени термодинамически данных для стабильных (стишовит, коэзит, кварц, тридимит, кристобалит) и метастабильных (моганит, цеолиты, стекла, аморфные гели и микропористые материалы) форм окиси кремния. Разнообразие форм окиси кремния объясняется большим числом возможных сочетаний тетраэров SiO₂ в различных кристаллических структурах, а также малой величиной энтальпии (15 кДж/мол относительно кварца), присущей большинству полиморфных превращений. □

РЖХ 1994

SiO₂

1994

11 Б3057. Гомогенная химия термического разложения метилтрихлорсилана. Термодинамический анализ и моделирование кинетики. On the homogeneous chemistry of the thermal decomposition of methyltrichlorosilane: Thermodynamic analysis and kinetic modeling / Papasouliotis George D., Sotirchos Stratis V. // J. Electrochem. Soc. .—1994 .—141, № 6 .—С. 1599—1611 .—Англ.

Выполнены расчеты равновесия в газ. фазе системы Si—Cl—C—H применительно к условиям осаждения SiC путем термич. разл. метилтрихлорсилана (I). Выявлена природа основных компонентов газ. фазы, определяющих химизм процесса. Предложены условия (т-ра, давл., ис-

$\Delta H_{t2}, \Delta H$

⑦ Mg_2SiO_4 ●

X. 1995, № 11

ходный состав системы), приводящие к получению стехиометрич. SiC. На основе результатов расчетов предложена кинетич. модель разл. 1. Рассмотрена последовательность р-ций, приводящих к получению C и Si. — Б. Г. Коршунов

SiO₂

1994

Д 12 Б386. Структура новой фазы высокого давления в α -кварце, исследованная методами молекулярной динамики. Structure of a new high pressure phase in α -quartz determined by molecular dynamics studies / Somayazulu M. S., Sharma S. M., Sikka S. K. // Phys. Rev. Lett. — 1994. — 73, № 1. — С. 98—101. — Англ.

Методом молекулярной динамики подтверждено существование структурного фазового перехода α -фазы кварца при давл. 20 ГПа. Моделирование порошковых рентгеновских профилей при 19 и 21 ГПа показало, что новая фаза является предшественником на пути к аморфизации. Предсказываемая дифракц. картина хорошо согласуется с лит. эксперим. данными и указывает на утроение элементарной ячейки в базовой плоскости а—b α -фазы (а 3,87, b 4,31, c 5,11 Å, α 83,2, β 83,8, γ 117,4° при 21 ГПа), однако рентгенограмма м. б. также индексирована в монокл. ячейке с $a' = a + 2b$, $b' = 3b$, $c' = c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$.

В. А. Ступников

(T₁₂)

X. 1995, N 12

SiO₂

[Om. 37781]

1994

Swamy V., Saxena S. K.,
Sundman B., et al.,

J. Geophys. Res., 1994,
99, N B6, 11787-11794

A thermodynamic assessment

of silica phase diagram.

SiO₂-тридимит

1994

9 Б2011. Исследование полиморфных модификаций SiO₂-тридимита с помощью дифракции электронов. An electron diffraction study of the polymorphs of SiO₂-tridymite /Withers R. L., Thompson J. G., Xiao Y., Kirkpatrick R. J. //Phys. and Chem. Miner. .—1994 .—21 ,№ 7 .—С. 421—433 .—Англ.

С помощью трансмиссионной электронной микроскопии изучены низкочастотные моды искажения высокот-рного SiO₂-тридимита (I) и их связь со структурным полиморфизмом I. Обнаружено, что обладающие низкой энергией моды искажения идеальной тетраэдрич. сетки I приводят к характеристичному диффузному распределению интенсивностей для двух наиболее высокот-рных полиморфов. Это диффузное распределение является не следствием повреждения пучком электронов, а характерной особенностью структуры. Диффузное распределение интенсивностей тесно связано с более низкот-рным полиморфом.

Н. А. Лебедева

(T₂)

X. / 1995, № 9.

SiO₂

1995

F: SiO₂

P: 1

05.Д.0150. Теоретическое изучение термохимических свойств молекул в системе Si-O-H. Theoretical study of the thermochemistry of molecules in the Si-O-H system / Allendorf Mark D., Melius Carl F., Ho Pauline, Zachariah Michael R. // J. Phys. Chem. - 1995. - 99, N 41. - С. 15285-15293. - Англ.

A self-consistent set of thermochemical parameters for 47 molecules in the Si-O-H system are obtained from a combination of ab initio electronic structure calculations and empirical corrections. Both stable and radical species are included in the study. Good agreement between the calculations and experimental data for the heat of formation of SiO is found, while the prediction for SiO[2] suggests that accepted literature values for the heat of formation of this molecule are too low, in agreement with a recently reported experimental measurement. Results for other species in this system are also compared with the literature and are found to be in acceptable agreement. Polynomial fits of the predicted thermodynamic data over the 300-4000 K temperature range are included in the supporting information.

X.1996, N 5

SiO₂

1995

Федотов В.М., Инст. гос. горно-
металлург. акад. - Новокузнецк,
1995. - 9 с.

(Кр) Дел в Ветхире 09.03.95,
N 644-В95

Р.м.х. N 12 1995, 12 5 334

1995

F: SiO₂

P: 1

2Б2248. Изучение полиморфного коэсита SiO[2] [методом] твердотельного ЯМР {17}O при вращении под магическим углом и динамическим углом. Solid-state {17}O magic-angle and dynamic-angle spinning NMR study of the SiO[2] polymorph coesite / Grandinetti P. J., Baltisberger J. H., Farnan I., Stebbins J. F., Werner U., Pines A. // J. Phys. Chem. 1995. - 99, N 32. - С. 12341-12348. - Англ.

Для полиморфного SiO[2] получены спектры ЯМР {17}O при вращении образца под магическим или динамическим углами. Из анализа спектров установлено шесть позиций атомов кислорода, различающихся параметрами квадрупольного взаимодействия, коррелирующими с величиной углов связей Si-O-Si. Отрицательный знак константы квадрупольного взаимодействия при ориентации градиента электрического поля на кислороде вдоль направления цепей Si-O-Si определен из условия Таунса-Дейли.. Коэсит, структура.

X. 1996, NL

SiO_2

1995

) 19 Б2111. Рост и морфология кристаллов кварца, синтезированных при температуре выше температуры перехода. Growth and morphology of quartz crystals synthesized above the transition temperature / Hosaka Masahiro, Miyata Takéshi, Sunagawa Ichiro // J. Cryst. Growth .— 1995 .— 152 , № 4 .— С. 300—306 .— Англ.

С помощью РЭМ изучена морфология кристаллов кварца, полученных гидротермальным методом при t -ре выше t -ры перехода из низкотемпературной фазы в высокотемпературную. Обнаружены различные гексагональные бипирамидальные морфологии, большая часть которых содержит призматич. грани, которые иногда искривлены, что приводит к веретенообразной форме.

В. Л. Лебедев

X. 1996, N 19

SiO_2 (d-quartz)

1995

122: 249454q Ab initio calculation of the thermodynamic properties and atomic temperature factors of SiO_2 α -quartz and stishovite. Lee, Changyol; Gonze, Xavier (Lab. Atomic Solid State Phys., Cornell Univ., Ithaca, NY 14853-2501 USA). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1995, 51(13), 8610-13 (Eng). The const.-vol. sp. heat, the entropy, the phonon contributions to internal energy and Helmholtz free energy, and the at. temp. factors of α -quartz and stishovite, two allotropic forms of SiO_2 , are calcd. as a function of temp. from ab initio phonon band structures. Available exptl. data agree with our calcd. values over a wide range of temp. α -Quartz has more accessible phonon states at low temps., while stishovite has larger contributions to the thermodyn. functions from the zero-point motion.

(G.S.)

C.A. 1995, 122, N 20

SiO₂

Ом. 38 103

1995

(РТ диаграммы
при высок.
давл-ниях)

Островский И.А.,

РТ диаграм-
ма при 754-759.
Гохман, 1995, N5,

высоких

давлений

для высоко
сметы со

Цобартыне

потенциаль
давления,
схематической

РТ-гидранты (на примере
кремнекислоты).

F: SiO₂

P: 1

1985

2Б2338. Исследование аморфного диоксида кремния с помощью дифракции жестких рентгеновских лучей. Amorphous silica studied by high energy X-ray diffraction : [Pap.] 1st Eur. Conf. Synchrotron Radiat. Mater. Sci., Chester, 3-8 Juli, 1994 / Poulsen H. F., Neuefeind J., Neumann H.-B., Schneider J. R., Zeidler M. D. // Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B. - 1995. - 97, N 1 - 4. - С. 162-165. - Англ.

С использованием дифракции жестких рентгеновских лучей с энергией 95 кэВ исследован аморфный диоксид кремния. Результаты показали, что с использованием жестких рентгеновских лучей для неупорядоченных материалов можно получить структурные факторы с точностью, к-рая сравнима с точностью, получаемой в нейтронографич. исследованиях, при условии, что м. б. устранены неточности, связанные с теор. фактором. Полученные результаты проанализированы на основе модели ближнего порядка структуры.. Структура аморфной фазы.

Р. Ж. Х. N 2, 1996

α -SiO₂

Kc

1995

13 Б3147. Растворимость кварца в водных растворах NaOH при повышенных температурах и давлениях / Румянцев В. Н. // Ж. неорган. химии .— 1995 .— 40 , № 1 .— С. 42—48 .— Рус.

Приведены эксперим. данные по р-римости кварца (α -SiO₂) в водных р-рах NaOH (конц-ия 0,1—1 М) при т-рах 150—450 °С (давление 500—2200 бар). Р-римость кварца с т-рой непрерывно возрастает, что является следствием усиления полимеризации гидроксокомплексов кремния. Этой же особенностью объясняется смена линейной зависимости р-римости кварца от конц-ии электролита параболической при конц-ии р-ра выше 0,5 М. Кривые температурной зависимости р-римости (ТЗР) кварца распадаются на две ветви, в пределах которых увеличение р-римости с т-рой в координатах $\lg m - 1/T$, К (m — р-римость кварца, моль/кг р-рителя) характеризуется линейной или близкой к ней зависимостью. Происхождение перегиба на кривых ТЗР, наблюдающегося при т-ре примерно 300 °С, связывается с дегидратацией силикатных частиц и усилением вследствие этого межмолекулярных взаимодействий в растворе.

X. 1995, N 13

1995

F: SiO₂

P: 1

3Б377. Кинетические исследования кристаллизации коэзита при использовании синхротронного излучения. Kinetic studies of the crystallisation of coesite using synchrotron radiation : [Pap.] 1st Eur. Conf. Synchrotron Radiat. Mater. Sci., Chester, 3-8 Juli, 1994 / Zinn P., Lauterjung J., Hinze E. // Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B. - 1995. - 97, N 1 - 4. - С. 89-91. - Англ.

В диапазоне т-р 870-1170К и давл. 30-50 кбар (кубич. аппарат высокого давл.) методом энергодисперсионного синхротронного излучения исследована *in situ* кинетика фазового перехода кварц-коэзит. Длительность каждого измерения составляла 20-200 с. Эксперим. результаты позволили рассчитать константу скорости $K[s]$ для роста коэзита (пр. гр. C2/c) из кварца (пр. гр. P3[1]21) при отсутствии влаги. Для различных Р-Т-условий величины $K[s]$ колеблются от $6,0 \cdot 10^4$ до $2,2 \cdot 10^4$ с⁻¹.. Тгр.

X. 1996, N 3

SiO₂,

1995

Curriculum
Khan

124: 38947f Phase transitions of quartz studied by a.c. calorimetry. Yao, Haruhiko; Hatta, Ichiro (Department of Physics, Tokyo Institute of Technology, Oh-okayama, Meguro, Tokyo, Japan 152). *Thermochim. Acta* 1995, 266, 301-8 (Eng). An a.c. calorimetric heat capacity measurement was performed on high-quality synthetic quartz. At the incommensurate (IC)- β -phase transition, the heat capacity C_p of as-grown samples show crit. behavior, i.e. there is a sharp peak at the IC- β transition. The shapes of the C_p are almost identical in both heating and cooling runs. However, when as-grown samples were annealed in the α -phase just below the α -IC transition, the C_p peak became considerably rounded and, at the same time, the transition temp. slightly increased. The shapes of the C_p peaks on heating and cooling became dissimilar for the annealed samples.

(C_p , T_{t2})

C. A. 1996, 124, N4

SiO₂

1996

10Б337. Фазовая диаграмма и свойства кремнезема: изучение методами решеточной и молекулярной динамики / Белоношко А. Б., Дубровинский Л. С., Дубровинская Н. А., Саксена С. К. // Петрология (Россия). — 1996. — 4, № 6. — С. 563—580. — Рус.

(T₂)

Методами решеточной и молекулярной динамики изучены свойства и фазовая диаграмма кремнезема в широком диапазоне давлений и т-р с использованием ранее полученного потенциала межатомного взаимодействия. Расчеты показали хорошее соответствие теоретически полученных и доступных структурных, калометрических и спектроскопических экспериментальных данных. Хорошо воспроизводятся фазовые равновесия кварц-коэсит, коэсит-стишовит, стишовит-расплав. При давлении выше 83 ГПа предсказан переход стишовита в фазу со структурой CaCl_2 , а при давлении выше 93 ГПа (по данным решеточной динамики) и 110 ГПа (по данным молекулярной

X. 1997, N 10

динамики) — в новую фазу со структурой, имеющей пространственную группу $Pnc2$, которую мы называли SBAD. Анализ рассчитанных дифракционных картин различных гипотетических постстишовитовых фаз показывает, что эту новую фазу следует учитывать при высокобарических экспериментах с кремнеземом. Появление новой фазы согласуется с сейсмическими наблюдениями. Ранее полученные экспериментальные результаты по постстишовитовым фазам при высоких давлениях могут быть объяснены как появлением SBAD так и небольшим отклонением от гидростатических условий.

SiO₂

1996

9Б2313. Постепенное превращение кварца в аморфный кремнезем при ударном нагружении: роль $\alpha \rightarrow \beta$ -перехода. Progressive transformation from quartz to amorphous silica by shock pressure: Role of the $\alpha \rightarrow \beta$ transition / Chemarin C., Panczer G., Badjukov D. D., Champagnon B. // Ber. Bunsen-Ges. phys. Chem.— 1996 .— 100, № 9 .— С. 1396—1398 .— Англ.

При исследовании превращения крист. α -кварца в кварцевое стекло под действием ударного нагружения с помощью микроспектроскопии КР обнаружена промежут. фаза, где присутствуют как крист., так и аморф. SiO₂. С использованием метода постепенно увеличивающегося максим. давл. получены новые образцы ударносжатого SiO₂, а их спектры КР сравнены со спектрами КР образцов, полученных в результате $\alpha \rightarrow \beta$ -перехода, вызванного изменением т-ры. Выделение крист. фазы сравнено с выделением α -кварца при термич. отжиге. В. Ф. Байбуз

(фазу перехо)

Х. 1997, 149

SiO₂

1996

10Б39. Вычисления по модели свободной энергии термодинамических, колебательных, упругих и структурных свойств α -кварца при переменных давлениях и температурах. Free-energy calculations of thermodynamic, vibrational, elastic, and structural properties of α -quartz at variable pressures and temperatures / De Boer K., Jansen A. P. J., Van Santen R. A., Watson G. W., Parker S. C. // Phys. Rev. B. — 1996. — 54, № 2. — С. 826—835. — Англ.

термод-
св-ств

Путем сравнения существующих лит. эксперим. данных с предсказанными величинами для большого числа св-в α -кварца в области давл. до 25 ГПа и в диапазоне т-р 100—813К исследована надежность модели двухоболочечного ПТ и модели ПТ жесткого иона. Вычисления выполнены в рамках ур-ний минимизации свободной энергии. Анализ показал, что каждый ПТ точно описывает атомные вз-вия. Обсуждены области применимости модельных ПТ для вычислений конкретных х-к соединений.

В. А. Ступников

Х. 1997, N 10

d - SiO_2 (кварц)

1996

125: 100658p Free-energy calculations of thermodynamic, vibrational, elastic, and structural properties of α -quartz at variable pressures and temperatures. de Boer, K.; Jansen, A. P. J.; van Santen, R. A.; Watson, G. W.; Parker, S. C. (Lab. Inorg. Chem. Catalysis, Eindhoven Univ. Technol., 5600 MB Eindhoven, Neth.). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1996, 54(2), 826-835 (Eng). The reliability of two shell model potentials and a rigid-ion model potential was studied by comparing available exptl. data with predicted values for a large no. of α -quartz properties at variable temps. and pressures. Calcns. were done with a recently developed free-energy minimization code. Predictions for the structure, Raman modes, and elastic consts. of α -quartz at elevated temps. and pressures are discussed. Calcns. of the const. pressure entropy and heat capacity as a function of temp. are presented. Calcd. low-frequency phonon dispersion curves in the $[\xi \xi 0]$, $[\xi 0 0]$, and $[0 0 \xi]$ direction are also discussed. Anal. of these predictions show which at. interactions are most accurately described by each potential. Also, the conditions are discussed under which the predictions of each potential are the most reliable.

непринят
d - PR

C. A. 1996, 125, v8

F: SiO₂

P: 1

10B210. Реконструктивные превращения в
кристаллических структурах. Reconstructive
transformations in crystal structures : Collec.
Abstr. Int. Union Crystallogr 17th Congr. and Gen.
Assem., Seattle, Wash., Aug. 8-17, 1966 / Dmitriev
V. P. // Acta crystallogr. A. - 1996. - 52, Suppl.
- C. 442. - Англ.

Большинство фазовых переходов в кристаллических
соединениях имеет реконструктивный характер с
отсутствием отношений группа-подгруппа. Для таких
переходов использован метод описания волн
плотности. В качестве примеров приведены переходы
при сложном полиморфизме C, льда, SiO₂,
криогенных кристаллов.

1996

F: SiO₂-new

P: 1

1996

ЗБ243. Новая SiO[2]-фаза в физических условиях нижней мантии Земли: теоретические и рентгеновские синхротронные данные. A new SiO[2] phase at physical conditions of Earth's lower mantle: theoretical and synchrotron X-ray evidences : Collec. Abstr. Int. Union Crystallogr 17th Congr. and Gen. Assem., Seattle, Wash., Aug. 8-17, 1996 / Dubrovinsky L. S., Saxena S. K., Belonshko A. B. // Acta crystallogr. A. - 1996. - 52, Suppl. - C. 534. - Англ.

При 2000 К и закалке под давлением 080 ГПа рентгенографически обнаружена новая предсказанная

теоретически фаза SiO_2 со структурой промежуточной между 'альфа'- PbO_2 и ZrO_2 , ф. гр. Pnc_2 , а 4,300, b 3,899, c 4,689 Å, V 11,84 см³/моль. Она немного более плотная, чем стишовит и возможно устойчива в нижней мантии, если там возможен свободный кремнезем.

SiO_2

1996

7Б336. Численное исследование кривой существования жидкость—пар диоксида кремния. A numerical investigation of the liquid—vapor coexistence curve of silica / Guissani Yves, Guillot Bertrand // J. Chem. Phys.— 1996.— 104, № 19.— С. 7633—7644.— Англ.

(P)

X. 1997, N 7

SiO_2

1996

8Б238. Кристаллохимия могоанита и аметиста. The crystal chemistry of moganite and amethyst / Hyde B., McLaren A. // Austral. J. Chem.— 1996.— 49, № 8.— С. 861—866.— Англ.

Детально рассмотрено строение новой двенадцатой модификации кварца: могоанита. Показано, что структура могоанита может быть представлена как дефектная структура кварца: кварцевые слои толщиной в один тетраэдр объединяются по плоскости $(1\bar{1}01)$, причем с одной стороны находятся слои левого кварца, а с другой — правого. Подобного типа двойникование имеет место для аметиста, однако в последнем случае имеет место макроскопическое двойникование в масштабе около 100 нм. Выявленная новая структура подтверждает гипотезу о том, что наличие упорядоченных дефектов в кристаллах приводит к образованию новых структурных типов.

В. П. Сиротинкин

Х. 1997, № 8

SiO₂

1996

9Б23. **Общий обзор кварцевых и кварцеподобных веществ: упаковка, искажения, температура и эффекты давления.** A general survey of quartz and quartz-like materials: packing distortions, temperature, and pressure effects / Philippo T. E., Palmier D., Pintard M., Goiffon A. // J. Solid State Chem. — 1996. — 123, № 1. — С. 1—13. — Англ.

(Обзор)

Обзор. Проведен анализ влияния давления и температуры на кварц и кварцеподобные вещества (SiO₂, GeO₂, MXO₄ с M=Al, Ga, Fe и X=P, As). Все результаты соотнесены с расстоянием M—O и углом M—O—X, влияющим на физические свойства — (плотность, пьезоэлектричность, анизотропия диэлектрических констант). Установлена возможность прогноза свойств не синтезированных еще соединений.

Н. Л. Смирнова

Х. 1997, № 9

SiO_2

1996

1) 22Б27. Различия между шести- и четырех-координированными (атомами) кремния в модификациях SiO_2 по данным спектроскопии структуры ближнего края энергетических потерь электронов (ELNES). Distinction between six- and fourfold coordinated silicon in SiO_2 polymorphs via electron loss near edge structure (ELNES) spectroscopy / Sharp T., Wu Z., Seifert F., Poe B., Doerr M., Paris E. // Phys. and Chem. Miner.— 1996.— 23, № 1.— С. 17–24.— Англ.

(Tz2)

Исследована возможность отдельного фиксирования 6- и 4-координации атомов Si в природном α -кварце, синтетическом коэзите, с одной стороны, и в синтетическом стишовите, с другой стороны, с помощью спектроскопии структуры ближнего Si K-, L- и O K-краев энергетических потерь электронов. Зафиксированные в спектрах

Х. 1997, № 22

различия связаны, согласно сравнению с расчетами мультиплетного рассеяния, с разной координацией атомов Si. Расчетами мультиплетного рассеяния для больших кластеров показано, что другие оболочки вносят относительно небольшой вклад в общую топологию спектров. Поэтому различия между 6- и 4-координированным Si можно выявить даже в нанометровом масштабе и, вероятно, в аморфных веществах.

Ф. М. Спиридонов

SiO₂

[От. 42035]

1996

■ 24 Б2432. Термические свойства кварцевого стекла в интервале температур 1200—2375K / Тягельский П. В., Станкус С. В. // Теплофиз. высок. температур .— 1996 .— 34 , № 2 .— С. 331—333 .— Рус.

(терм. св-ва)

плотность,

коэф. теплового расширения

(КТР)

X. 1996, N 24, Б2432

$$\rho_2 = (2203.7 \pm 1.1) \text{ кг/м}^3$$

(при 295 K)

T_g, K

ρ

$\beta_c \times 10^6, K^{-1}$ $\beta_m \times 10^5$

Всп. 1 окл.

2088

2199.1 ± 1.3

36 ± 1.0

Нарп.

—

2195.2 ± 0.7

2.1 ± 2.0

Всп. 2 окл.

2046

2199.6 ± 0.7

2.5 ± 0.8

2.1 ± 1.7

Равновесия Т-ра стекловатис $T_g = 2152 K$

Нанокристаллическая
структура

SiO₂

X, 1996, № 23

1996
23 Б2378. Исследование нанокристаллических структур аморфного диоксида кремния / Банин А. И., Попов К. Г., Тихонов Н. А. // Ж. техн. физ. — 1996. — 66, № 6. — С. 124—130. — Рус.

Методом спектроскопии комбинационного рассеяния света изучена структура низкочастотного участка спектра обезвоженного и девятиводного метасиликата натрия, силикагеля, растворов метасиликата натрия в интервале концентраций от 0.5 до 0.001 М/л. Зарегистрированы «бозонный пик» в интервале до 300 1/см, что свидетельствует о наличии в исследуемых образцах микронных частиц, имеющих аморфную структуру, а также система узких интенсивных эквидистантных максимумов с волновыми числами 25, 50, 751/см. Методом рентгеновской дифрактометрии обнаружены широкие максимумы, которые могут быть связаны с корреляцией относительных положений различных фрагментов диоксида кремния в нанокристаллической структуре. Предложена теоретическая модель и проведены оценки энергии состояний нанокристаллической структуры диоксида кремния, представляющей собой шестизвенные кольца из тетраэдров, в которых возбуждаются коллективные колебания флуктуирующих валентных связей.

SiO₂

1996

22 Б2266. Квантово-химический поиск «Слабых звеньев» в стеклообразном SiO_2 / Зюбин А. С., Дембовский С. А. // Ж. неорган. химии .— 1996 .— 41 , № 4 .— С. 679—685 .— Рус.

В рамках кластерного приближения с использованием полуэмпирической схемы MNDO исследованы относительные стабильности циклических структур в стеклообразном SiO_2 и их прочность к разрыву. Найдено, что удельные стабильности циклов с четырьмя-восемью звеньями SiO близки, но наиболее стабильны шестичленные кольца. Четырехчленные циклы имеют минимальную прочность к разрыву вследствие возможности их трансформации в два двучленных кольца. При разрушении циклов большего размера формирование новых связей не всегда возможно из-за необходимости существенной деформации жесткого окружения и требуемые для разделения цикла затраты энергии возрастают почти вдвое. Поэтому четырехчленные кольца являются наименее прочными участками непрерывной неупорядоченной сетки g-SiO_2 и при нагревании она будет распадаться преимущественно по этим участкам.

X. 1996, N 22

щественно вдоль поверхностей с максимальной концентрацией четырехчленных циклов на кластеры с размерами порядка 10—20 Å и лишь затем — на более мелкие фрагменты.



1997

F: SiO₂

P: 1

19B28. Изучение ab initio структурных превращений кремнезема под давлением. Ab initio studies of high-pressure structural transformations in silica / Karki B. B., Warren M. C., Stixrude L., Ackland G. J., Grain J. // Phys. Rev. B. - 1997. - 55, 6. - С. 3465-3471. - Англ.

Предсказано три последовательных фазовых превращения стимовита SiO₂ типа рутила, I в три более плотные фазы с использованием метода псевдопотенциала из первых принципов в приближении локальной плотности. При 47 ГПа происходит

превращение I в ромбический тип CaCl_2 (II), при 98 ГПа в Pnc (III), при 226 ГПа в пиритовую фазу IV. Первое превращение обусловлено упругой нестабильностью, которая появляется из сильного спаривания упругих констант и смягчения рутиловой B_{1g} моды. Полностью оптимизированные структуры 4 полиморфов получены как функции давления. Кроме того в зависимости от давления получены оптические моды. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными.

1984

F: SiO₂

P: 1

16B2286. Структура и дефекты в SiO₂, фундаментальные исследования и применение. Structure and Defects in SiO₂, Fundamentals and Applications : Proc. Fr.-It. Symp., Agelonde, Sept. 23-25, 1996 // J. Non-Cryst. Solids. - 1997. - 216. - С. 1-217. - Англ.

—

1997

F: SiO₂

P: 1

14B2169. Изучение фазового перехода 'альфа'-'бета' кварц [моделированием] динамики решетки: поведение мягкой моды и упругие аномалии. Lattice-dynamical study of the 'альфа' - 'бета' phase transition of quartz: Soft-mode behavior and elastic anomalies / Smirnov M. B., Mirgorodsky A. P. // Phys. Rev. Lett. - 1997. - 78, 12. - С. 2413-2416. - Англ.

В рамках модели динамики решетки с использованием парных ПТ Цунеюки исследован механизм термически индуцированного фазового перехода 'альфа' - 'бета' кварц. Выявлена значительная роль чисто объемного и чисто температурного вкладов в фазовый переход. Чисто объемный вклад в поведение мягкой моды в 'альфа'-кварце ассоциирован с уменьшением внутритетраэдрических деформаций при расширении решетки и с вариациями внутритетраэдрических напряжений. —

SiO₂

1998

Hildenbrand

128: 327159n Comment on "Thermochemistry of gaseous SiO(OH), SiO(OH)₂, and SiO₂," [J. Chem. Phys. 101, 6076 (1994)].
Hildenbrand, D. L.; Lau, K. H. (SRI International, Menlo Park, CA 94025 USA). J. Chem. Phys. 1998, 108(15), 6535 (Eng), American Institute of Physics. Previously published data for a gaseous reaction equil. involving the species SiO(OH) have been re-interpreted, based on other information suggesting a very weak OSi-OH bond. This reinterpretation leads to a revised value of -85 kcal mol⁻¹ for the std. enthalpy of formation at 298 K of gaseous SiO(OH).

(m.x)

(H)

SiO(OH)

SiO(OH)₂

△

C.A. 1998, 128, N26

1998

F: $\alpha\beta$ -SiO₂

P: 1

12B227. Теоретическое исследование 'альфа'- и 'бета'-переходов в кварце. Theoretical investigation of 'alpha'-'beta'-transformation of quartz : Ab 18th Eur. Crystallogr. Meet. "Mater. Struct. Chem., Biol., Phys. and Technol.", Praha, Aug. 15-20, 1998. Pt B / Oganov Artem R., Urusov Vadim Eremin Nickolai N. // Bull. Czech and Slov. Crystallogr. Assoc. - 1998. Spec. Issue B. - C. 177. - Англ.

Метод минимизации энергии атомизации применен для расчета зависимости кристаллической структуры,

упругих свойств и энергии атомизации кварца (SiO_2). Соотнесены рассчитанные и экспериментальные данные ($f(\text{Si-O})=48\%$ 4,8928, 4,91239, с 5,3542, 5,40385А, V 111,01, 112,933 А, ф. гр. P3[1] 21 2. Значения координат Si 0,9634; 0,4701, O, 0,4240, 0,2756, 0,2139; 0,413 0,2674, 0,2144. Степень ионности теоретическая и экспериментальная -18,96 -19,47 eV. Определена зависимость объема от степени ионности и установлен изменение объема (2,6%) - переход 1 рода. Тетраэдры SiO_4 ведут себя как жесткие единицы. Структура 'бета'-кварца более жесткая чем у 'альфа'-квар

SiO₂

P: 1

130:301978 Mass spectrometric study of vaporization and thermodynamic properties of silicon dioxide. I. Composition of the gas phase and partial vapor pressures of the molecular forms over silicon dioxide. Shornikov, S. I.; Archakov, I. Yu.; Shul'ts, M. M. (Grebenshchikov Institute of Chem of Silicates, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia). Russ. J. Gen. Chem., 68(8), 1171-1177 (English) 1998 Vaporization of

silicon dioxide in the 1800-2200 K range as influenced by the material of the effusion cells (Mo, W, Ir, Pt-Rh) was studied by the Knudsen high-temp. mass spectrometric effusion method. The partial pressures of mol. forms of the vapor over SiO_2 were determined by the procedure of complete vaporization and by comparison of ion currents using the partial vapor pressures of silver and gold as standards. From the enthalpies of sublimation and vaporization at 1800-1995 and 2000-2200 K, the enthalpy of SiO_2 fusion was evaluated.

SiO_2

1998

T_{t2}

F: SiO_2

P: 1

7Б317. Микроскопическое рассмотрение "мягкой" моды и упругих аномалий в о 'альфа'-'бета'-перехода в кварце / Смирнов М. Б., Миргородский А. П. // Высокотемператур. химия силикатов и оксидов: Тез. докл. 7 Междунар. конф. Санкт-Петербург, 18-21 марта, 1998. - СПб, 1998. - С. 52. - Рус.

SiO₂

1998

T_{t2}

F: α, β -SiO₂

P: 1

6B225. Теоретическое изучение кристаллической структуры, упругих свойств 'альфа'-'бета'-превращения кварца / Урусов В. С., Оганов А. Р., Еремин . // ац. кристаллохим. конф., Черноголовка, 24-29 мая, 1998: Тез. докл. Ч. Черноголовка, 1998. - С. 140. - Рус.

SiO_2

кто автор?

сб-ва

F: SiO_2
P: 1

ЗБ214. Дефектность и физические свойства кристаллов
кварца и флюорита / К Г. Н. // Нац. кристаллохим.
конф., Черногловка, 24-29 мая, 1998: Тез. до Ч. 2.
- Черногловка, 1998. - С. 257. - Рус.

LiO₂

[Om. 41528, "a"]

1999

Checchetto R. et al.,

(Tt₂, Δ Ht₂) Chem. Phys. Lett.,
1999, 306, N 5-6, 380-
384. ●

SiO₂

Horbach OT 40 161 1999

130: 317186w Specific Heat of Amorphous Silica within the Harmonic Approximation. Horbach, Juergen; Kob, Walter; Binder, Kurt. (Institut fuer Physik, Johannes Gutenberg-Universitaet, D-55099 Mainz, Germany). *J. Phys. Chem. B* 1999, 103(20), 4104-4108 (Eng), American Chemical Society. The authors investigate to what extent the sp. heat of amorphous silica can be calcd. within the harmonic approxn. For this we use mol. dynamics computer simulations to calc., for a simple silica model (the BKS potential), the velocity autocorrelation function and hence an effective d. of states $g(\nu)$. The harmonic approxn. is valid for temps. below 300 K but starts to break down at higher temps. To obtain a reliable description of the low-frequency part of $g(\nu)$, i.e., where the boson peak is obsd., it is essential to use large systems for the simulations and small cooling rates to quench the samples. The calcd. sp. heat is, at low temps. (below 50 K), about a factor of 2 smaller than the exptl. one. In the temp. range $200 \text{ K} \leq T \leq T_g$, where $T_g = 1450 \text{ K}$ is the glass transition temp., we find a very good agreement between the theor. sp. heat and the exptl. one.

(G)
particulate

C.A., 1999, 130, N23

SiO₂

1999

(amorph, cryst)

Cp

$T \leq 1K$

131: 24200q Thermodynamic properties of small amorphous and crystalline silica particles at low temperatures. Nittke, A.; Esquinazi, P.; Semmelhack, H.-C.; Burin, A. L.; Patashinskii, A. Z. (Abt. Supraleitung und Magnetismus, Universitat Leipzig, 04103 Leipzig, Germany). *Eur. Phys. J. B* 1999, 8(1), 19-30 (Eng), Springer-Verlag. We have measured the low-temp. ($T \leq 1$ K) sp. heat and heat release of small amorphous and cryst. SiO₂ particles embedded in Teflon and in Vycor. The temp. and time dependence of these properties have been interpreted in terms of the tunneling model. We found that the particle size influences the d. of states of tunneling systems of the composite. The smaller the size of the particles the larger is the d. of states of tunneling systems P_0 . Quartz grains with dimensions in the micrometer range show similar glass-like properties as vitreous silica. In comparison with bulk vitreous silica, Vycor shows a much larger P_0 in agreement with the behavior we found for small SiO₂ particles. We discuss the implication of our results on the origin of the universal low-temp. properties of glasses.



C.A., 1999, 131, N2.

1999

F: SiO₂

P: 1

131:189960 Mass spectrometric study of vaporization and thermodynamic properties of silicon dioxide. II. Determination of partial vaporization coefficients of silicon dioxide. Shornikov, S. I.; Archakov, I. Yu.; Shul M. M. (Grebenshchikov Institute of Silicate Chemistry, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia). Russ. J. Gen. Chem., 69(2), 187-196 (English) 1999 Partial coeffs. of vaporization of SiO, SiO₂, and Si₂O₂ mol. forms from silicon dioxide at 1610-1980 K were detd. by the Knudsen high-temp. mass- spectrometric effusion procedure.

SiO₂ (cryst)

(DM-40123)

1999

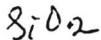
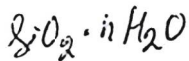
Sawai S., Tanaka H et al.,

Internat. J. Thermophys.
1999, 20, N2, 721-731.

Measurement of Heat Capacity
310K by Thermal Radiation

Specific
from 150 to
al Radiation

Calorimetry.



(иссл. ДСК)

ΔH

Шарпата 8

1999

F: SiO₂

P: 1

9B330. Исследование термодинамики и кинетики структурных превращений крем в атмосфере водяного пара методом дифференциальной сканирующей калориметр Шарпата Г. А., Панасюк Г. П., Будова Г. П., Ворошилов И. Л., Озерова З. Неорган. матер. - 1999. - 35, 10. - С. 1247-1251. - Рус.

Методом дифференциальной сканирующей калориметрии исследована термодинамика структурных превращений кремнезема (предварительно обработанного активатором кристаллизации) в атмосфере водяного пара в интервале температур 320-750 давлений (80-240)*10⁵ Па. Показано, что значения энтальпии дегидратации 'ДЕЛЬТА'[r]H₀(T) в зависимости от условий предварительной обработки кремнезема составляют от 9 до 26 кДж/моль H₂O. Соответственно приведен стандартным условиям

величины $\Delta H_{(298,15\text{ K})}$ (298,15 К) меняются от 41 д кДж/моль $H_{(2)O}$. Определены энтальпия кристаллизации ($\Delta H_{(cr)}(SiO_2 \text{ аморф.}) = -(1,63 \pm 0,04)$ кДж/моль), и значение энтальпии фазового превраще $\Delta H_{(tr)}('альфа' \rightarrow 'бета'-SiO_2) = 0,628$ кДж/моль, совпадающее с приведенным в справочной литературе. Исследована кинетика кристаллизации предварительно активированного аморфного кремнезема при водно-паровой обработке в автоклаве в изотермических условиях при давлении $110 \cdot 10^5$ Па. Критерием степени превращения кремнезема в кварц служила определяемая в к опыте величина $\Delta H_{(tr)}('альфа' \rightarrow 'бета'-SiO_2)$. Кинетические крив образования кварцевой фазы удовлетворяют уравнению Авраами-Ерофеева. Получ данные показывают, что энергия активации кристаллизации при водно-паровой обработке существенно ниже, чем при высокотемпературной кристаллизации с образованием кристобалита.



SiO₂

(матер.
кварц)

[Om 41528]

1999

Strehlow P. et al.,

Ср, при
минир.
до 0,015K

Physica, 1999, B263-264
273-275 (не стр. 274),

LiO₂

[Am. 41548]

2000

(nonmetallic)
Catti M., Civalieri B.
et al.,

J. Phys. Chem. 2000, B104,

N 31, 7259-65.

SiO₂

2000

135: 51368q Evaporation and condensation coefficients by the multiple Knudsen cell mass spectrometric method. Chatillon, C. (LTPCM-ENSEEG - (INPG-CNRS-UJF) BP.75, 38402 Saint Martin d'Heres, Fr.). *Schr. Forschungszent. Juelich, Reihe Energietechn./Energy Technol.* 2000, 15(Pt. 2, High Temperature Materials Chemistry, Part 2), 403-406 (Eng), Forschungszentrum Juelich GmbH. Hindered vaporizations are characterized by evapn. coeffs. that can be detd: either by free or Langmuir vaporizations or effusion from Knudsen cells. Condensation coeffs. can be also detd. with effusion cells under certain conditions. The multiple Knudsen cell method assocd. to a mass spectrometer is applied to the simultaneous detn. of these coeffs. mainly for the vaporization of silicon compds. SiC, SiO₂, Si₃N₄ and their related ternary systems.

Mac -
СНИП, РД,
КОЗАРОВС
КОК, РКО.

F: SiO₂

P: 1

2000

133:49522

The study of the silica vaporization:
dimerization process. Shornikov, S. I.; Archakov, I.
Yu. Grebenschikov Institute of Silicate Chemistry,
Russian Academy of Sciences Saint-Petersburg 199155,
Russia Proc. - Electrochem. Soc., 99-38 (High
Temperature Corrosion and Materials Chemistry), ~~330-338~~
(English) 2000 ~~Electrochemical Society~~

~~The gas phase reactions over silicon dioxide with the mols. of~~
~~(SiO), (SiO₂) and (Si₂O₂) were investigated by the mass~~
~~spectrometric Knudsen effusion method at 1610-1980 K.~~
The obtained data showed that the gas phase dimerization
processes caused the more complex gas phase compn. over
silica at high temps. then had been reported previously.

C.A. 2000

SiO₂

2001

фазов.
переход.

F: SiO₂ (фазовые переходы)

P: 1

549.5 02.16-19БЗ.161. Детальная структурная характеристика кварца при 'альфа'-'бета' переходе при нагревании. A detailed structural characterization of quartz heating through the 'альфа'-'бета' phase transition / Tucker M. G., Keen A., Dove M. T. // Miner. Mag. - 2001. - 65, N 4. - С. 489-507. - Англ.

Для описания зависимости структурного поведения кварца от температуры был проведено измерение общего нейтронного рассеяния с помощью модификации метода обратного моделирования Монте Карло. Установлены два основных момента. При изменении симметрии, связанное с 'альфа'-'бета' переходом, наблюдалось в обеих, дальней и ближней, корреляциях. Второе, некоторые структурные свойства такие как длина связей Si-O и термически индуцированная динамическая разупорядоченность, относительно нечувствительны к фазовому переходу. Биб 35. _

SiO_2 (опал)

2001

F: SiO_2 (опал) C_p (3 — 50 K)
P: 1

C_p (3-50K)

02.14-19Б3.28. Низкотемпературная теплоемкость и теплопроводность монокристаллов синтетического опала / Богомолов В. Н., Парфеньева Л. С., Смирнов И. А., Хисерек Х., Ежовский А., Кривчиков А. И., Веркин Б. И. // тверд. тела (С.-Петербург). - 2001. - 43, N 1. - С. 182-185. - Рус.

Измерены теплоемкость при постоянном давлении (в интервале 3-50 K) и теплопроводность кристаллич. решетки (в интервале 5-75 K) монокристалла синтетич. опала. Показано, что теплоемкость опала при этих температурах в себя аналогично пористым аморфным материалам. Из данных по теплопроводности следует, что монокристаллич. опал можно отнести к классу полукристаллич. материалов (частично закристаллизованных аморфных материалов). Однако вследствие специфики кристаллич. структуры опалы образуют нестандартный тип полукристаллич. материалов, которому авторы дали название полуаморфные материалы.

2001

SiO₂
(HAWO!)

F: SiO₂

P: 1

136:26169 Heat capacity enhancement
and thermodynamic properties of
nanostructured amorphous SiO₂.

Wang, Lan; Tan, Zhicheng; Meng,
Shuanghe; Druzhinina, Anne;
Varushchenko, Raisa A.; Li, Guanghai.

Journal of Non-Crystalline
Solids, 296(1,2), 139-142 (English)
2001

The heat capacity of
nanostructured amorphous SiO₂ (na-
SiO₂) has been measured by the
adiabatic calorimetric method over the
temp. range 9-354 K. TG and
differential scanning calorimetry

Cp
9-354K

(DSC) were also employed to det. the thermal stability. The glass transition temp. (T_g) for the two na-SiO₂ samples with the same grain sizes but with different sp. surfaces and one coarse-grained amorphous SiO₂ (ca-SiO₂) sample were detd. to be 1377, 1397 and 1320 K, resp. The low temp. exptl. results show that there are significant heat capacity (C_p) enhancements among na-SiO₂ samples and ca-SiO₂. Entropy, enthalpy, Gibbs free energy and Debye temp. (θ_D) were obtained based on the low temp. heat capacity measurement of na-SiO₂. The C_p enhancements of na-SiO₂ were discussed in terms of configurational and vibrational entropy.

SiO₂

2001

Ttr

F:SiO₂ (Ttr)

P:1 02.21-19БЗ.135. Кристаллические структуры полиморфных модификаций кремнез фазовые переходы между ними / Kihara Kuniaki // Nihon kessho gakkaiishi = Crystallogr. Soc. Jap. - 2001. - 43, N 3. - С. 218-226. - Яп.; рез. Англ.

Кремнезем существует в виде минералов, насчитывающих больше 20 различных. Большая часть минералов кремнезема может существовать при высоких температурах, при этом их коэф. теплового расширения близки к нулю и даже отрицательны. В кварце, наиболее распространенном минерале кремнезема, существует 'альфа'-переход, обнаруженный ЛеШателье в конце XIX в. и посто привлекающий внимание многих исследователей. Однако многие структурные проблемы в различных минералах кремнезема, такие как существование структ при

высокой температуре и структурные переходы, еще не решены. апр., в тридимите происходят последовательные переходы между разупорядоченными состояниями с изменением структуры при переменной температуре, но теорети аспект механизма этих превращений до сих пор не известен. Рассмотрены существующие структурные проблемы в кварце, тридимите и кристобалите, все полимерах существующих при низком давлении. Приведен пример успешного приложения методов молекулярно-динамич. моделирования к кварцу. Тем самым раз подчеркнуто значение совместного приложения, дифракционной кристаллог и компьютерного моделирования к сложным

проблемам, существующим в кремнез Библ. 63.



SiO₂

(Am. 40998)

2001

Huakai Mao[†], et al.,

Memor. J. of Alloys and Compo-
unds, 2001, 327, 253-262

Properties and
volumetric relations of silica —

thermodynamic assessment.

SiO_2

(Am. 40871)

2001

Patrick M. Piccione, Brian F.
Woodfield et al.,

$\Delta S_{\text{trans}}^{298}$

J. Phys. Chem., 2001, B105,
6025-6030.

$\Delta H_{\text{trans}}^{298}$

$\Delta f_{\text{trans}}^{298}$

Entropy &
Molecular

Pure-silica
sieves.

135: 66871x Entropy of Pure-Silica Molecular Sieves. Piccione, Patrick M.; Woodfield, Brian F.; Boerio-Goates, Juliana; Navrotsky, Alexandra; Davis, Mark E. (Chemical Engineering, California Institute of Technology, Pasadena, CA 91125 USA). *J. Phys. Chem. B* 2001, 105(25), 6025-6030 (Eng), American Chemical Society. The entropies of a series of pure-silica mol. sieves (structural codes *BEA, FAU, MFI, and MTT) are obtained by calorimetric measurements of low-temp. heat capacity. The third-law entropies at 298.15 K are (on the basis of 1 mol of SiO_2): *BEA, $44.91 \pm 0.11 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$; FAU, $44.73 \pm 0.11 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$; MFI, $45.05 \pm 0.11 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$; MTT, $45.69 \pm 0.11 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$; while the corresponding entropies of transition from quartz at 298.15 K are *BEA, $3.4 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$; FAU, $3.2 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$; MFI, $3.6 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$; MTT, $4.2 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$. The entropies span a very narrow range at 3.2-4.2 $\text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ above quartz, despite a factor of 2 difference in molar volume. This confirms that there are no significant entropy barriers to transformations between SiO_2 polymorphs. Finally, the Gibbs free energy of transformation with respect to quartz is calcd. for eight SiO_2 phases and all are found to be within twice the available thermal energy of each other at 298.15 K.

2001

SiO₂non-
copy

SiO₂ (cmil) (OM 41444)

2001

Sahling S., Aris S.,

Co Solid State Comm. .
2001, 120, N 5-6, 249-254.

SiO₂

2004

F: SiO₂ $\Delta H_m = \frac{10,5}{21,8} \text{ кДж/моль}$
P: 1

02.22-19БЗ.148. К вопросу об энтальпии плавления диоксида кремния / Шорни И., Арчаков И. Ю. (167610, ГСП, г. Сыктывкар, ул. Первомайская, 48) // Физико-химические проблемы создания новых конструкционных керамических материалов. Сырье, синтез, свойства : Тезисы докладов IV Всероссийской конференции, Сыктывкар, 2001. - Сыктывкар, 2001. - С. 94-95. - Рус.

Энтальпия плавления SiO[2] $21,8' + - '7,4$ кДж/моль
вычислена по данным гетерогенных равновесий реакций
SiO[2] (крст.) = SiO (газ) + O (газ) и SiO[2]
(крст.) = SiO[2] (газ). Рекомендованное значение
T[пл] = 1996' + - '5 К. Новое определение 'ДЕЛЬТА'Н[пл]
SiO[2] вдвое выше величины 10,5 кДж/моль, используемой в
справочной литературе и найденной как разность
'ДЕЛЬТА'[f] 'бета'-кристобалита и стеклообразного
диоксида при 970 К.

издана
Кришна

[Om. 41431.]

2002

Bernot Katzer et al.,

Гематолог,
Гематолог,
Медицинск.
Медицинск.
Мед.
Пациент

J. Phys. Chem. 2002,
A106, 7204-7215.

Beyond the Harmonic

Approximation: Impact
of Anharmonic Vibrations
on the Thermochemistry
of Silicon Hydrides

SiO₂

2001

F: SiO₂ (аморф.) фазовый переход
P: 1

03.06-19БЗ.74. Прямое наблюдение фазового перехода по типу I рода из амор. состояния в аморфное в плавленном кварце. Direct observation of amorphous amorphous apparently first-order phase transition in fused quartz / Mukhe G. D., Vaidya S. N., Sugandhi V. // Phys. Rev. Lett. - 2001. - 87, N 19. 195501/1-195501/4. - Англ.

С помощью дилатометрич. измерений наблюдался фазовый переход явно 1-го ро аморфном SiO[2] от аморфной фазы низкой плотности в аморфную фазу высокой плотности. При этом происходило резкое изменение объема на 'ЭКВИВ'20% при 680pC и давлении 'ЭКВИВ'36,3 кбар. Анализ спектров комб. рас. показал, чт этом никаких заметных изменений в промежуточном порядке структуры аморфно SiO[2] не происходит. Библ. 25.

SiO_2 (ж, стекло)

Imm. 42026

2004

SiC (ам)

Schnurze S.M., Gröbner J.,
Schmid-Fetzer R.

Thermodynamics and phase stability
in the Si-O system.

J. Non-Cryst. Solids, 2004, v. 336, p. 1-25

SiO₂

2002

F: SiO₂ (4, 20 - 400 K)
P: 1

03.09-19Б3.24. Теплоемкости, энтропии по третьему закону и термодинамичес функции молекулярных сит SiO[2] от 0 K до 400 K. Heat capacities, third-1 entropies and thermodynamic functions of SiO[2] molecular sieves from T=0 400 K / Boerio-Goates Juliana, Stevens Rebecca, Hom Ben K., Woodfield Bri F., Piccione Patrick M., Davis Mark E., Navrotsky Alexandra // J. Chem. Thermodyn. - 2002. - 34, N 2. - С. 205-227. - Англ.

Теплоемкость четырех цеолитных полиморфных модификаций SiO[2] BEA, FAU, M MTT определена методом адиабатической калориметрии в интервале температур 20-400 K. Из результатов измерений получены термодинамические функции для четырех фаз, включая энтропию, инкременты энтальпии и функцию

Ср,

20-400 K

свободной энергии Гиббса. Энтропия и энтальпия структурного фазового перехода при Т К найдены равными $0,385 \pm 0,001 \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}$ и $134,8 \pm 0,5 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1}$ соответственно теплоемкости трех полиморфных модификаций (FAU, MFI и MTT) больше, чем теплоемкость кристаллического кварца во всем исследованном температурном интервале, в то время как теплоемкость модификации BEA становится меньше теплоемкости кристаллического кварца при температурах в 240 К. Библ. 32.

SiO₂

2001

T(t_r)

F: SiO₂ (T_{t₂})
P: 1

03.09-19БЗ.93. Кристаллическая посткварцевая фаза кремнезема при высоких давлениях. Crystalline post-quartz phase in silica at high pressure / Hai J., Leger J. M., Gorelli F., Hanfland M. // Phys. Rev. Lett. - 2001. - 87 15. - С. 155503/1-155503/4. - Англ.

Установлен переход 'альфа'-кварца в моноклинную кристаллическую фазу при 20pC. Новая модификация имеет пр. гр. P2[1]/с, построена из 3*2 зигзагообразных цепей из октаэдров SiO[6]. Метастабильная модификация явл одной из возможных плотных модификаций кремнезема. Библ. 28. Библ. 28.

F: (SiO₂) SiH₄ SiCl₄

P: I

2002

03.09-19B1.54. Предсказание в
приближении ВАС-МР4

термохимических свойств

газофазных соединений системы Si-

H-O-Cl. ВАС-МР4 predictions of

thermochemistry for gas-phase

compounds in the Si-H-O-Cl system

/ Allendorf Mark D., Melius Carl

F. // J. Phys. Chem. A. - 2002. -

106, N 26. - С.6370-6380. - Англ.

В рамках приближения ВАС-МР4,

представляющего собой комбинацию

неэмпирических расчетов с

эмпирическими поправками для

расчета теплот образования,

определена самосогласованная

система термохимических

параметров для 39 соединений

кремния, содержащих связи с H, O

и Cl. Обсуждены тенденции в

изменении энергии связей в

рассмотренном ряду соединений.

Проведено сопоставление

полученных результатов с данными

Cs2-расчетов для отдельных

систем. Полученные

термодинамические данные

использованы для оценки

энергетики реакций, связанных

с окислением и гидролизом

тетрахлорида кремния. Библ. 51.