

УДК 666.7

Д.В. Сидоров¹, А.А. Шавнев¹, П.В. Солодкин¹, А.Д. Кирилин²

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕТИЛСИЛАНА В ПРОЦЕССЕ ПИРОЛИЗА

DOI: 10.18577/2307-6046-2019-0-11-44-52

Статья посвящена теоретическому исследованию образования наиболее вероятных соединений из двух молекул метилсилана методом квантово-химического расчета. Расчет выполнен неэмпирическим способом с использованием базисного набора 6-311+G (d) и теории возмущений Меллера–Плессета второго порядка. Осуществлена оптимизация геометрических параметров молекулярных структур, рассчитаны термодинамические данные реагентов и продуктов химических реакций, проведена оценка энергетических параметров химических реакций. Выявлено наиболее вероятное взаимодействие молекул метилсилана, приводящее к образованию метил(силилметил)силана.

Ключевые слова: метилсилан, квантово-химический расчет, молекулярное строение, термодинамическая характеристика.

D.V. Sidorov¹, A.A. Schavnev¹, P.V. Solodkin¹, A.D. Kirilin²

QUANTUM CHEMICAL CALCULATION OF INTERMOLECULAR INTERACTION METHYLSILANE MOLECULES DURING THE PYROLYSIS PROCESS

The article describes theoretical investigation for produce more favorable chemical structure from two molecules methylsilane during the pyrolysis process. In this investigation, we used quantum chemical calculation by second order Moller–Plesset perturbation theory with 6-311+G (d) basis set. It was used for chemical structure geometry optimization, computation thermodynamic data and estimate intermolecular interaction energies of chemical reactions. The calculated results showed that reaction with produce methyl(sililmethyl)silane are more favorable in case of the intermolecular interaction.

Keywords: methylsilane, quantum chemical calculation, molecular structure, thermodynamic parameter.

¹Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов» Государственный научный центр Российской Федерации [Federal State Unitary Enterprise «All-Russian Scientific Research Institute of Aviation Materials» State Research Center of the Russian Federation]; e-mail: admin@viam.ru

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет» [MIREA – Russian Technological University]; e-mail: rector@mirea.ru

Введение

Технический прогресс при разработке существующих и новых образцов перспективной техники неразрывно связан с применением передовых технологий и современных высококачественных конструкционных материалов [1, 2]. В настоящее время преимущества использования композиционных материалов (КМ), необходимых для создания узлов и агрегатов перспективной авиационной и космической техники, для применения в качестве уникальных материалов в энергетике, включая атомную, а также в современном машиностроении и металлообработке, являются неоспоримыми

[3–6]. В связи с этим задача создания новых и совершенствования существующих КМ актуальна с середины прошлого века – с момента получения первого образца на основе КМ.

Среди большого многообразия КМ отдельную область занимают высокотемпературные керамические КМ из карбида кремния, которые перспективны для использования в теплонагруженных узлах изделий космической и авиационной техники (насадки радиационного охлаждения, неохлаждаемые сопловые насадки, камеры сгорания двигателей, кромки, защитные панели и т. д.) [7, 8]. Изготовление таких материалов может осуществляться с помощью различных технологических приемов, которые основаны на жидкофазной и газофазной технологиях пропитки и насыщения карбидом кремния каркасных структур.

В частности, для насыщения из газовой фазы каркасных структур из SiC, C и других компонентов используют кремнийорганические соединения, как правило, содержащие связи Si–C, или смеси других газов, разлагающиеся в процессе химических реакций до карбида кремния. Наиболее предпочтительными из них являются алкилсиланы [9], которые (по сравнению с алкилгалогенсиланами) дают возможность получения не содержащих галогена чистых SiC-материалов. Кроме того, они не загрязняют атмосферу галогенсодержащими выбросами при получении карбида кремния и позволяют использовать оборудование из обычных некоррозионностойких материалов. По стойкости алкилсиланы устойчивы в атмосфере влажного воздуха, не взаимодействуют с водой и существенно менее токсичны аналогичных хлорсодержащих кремнийорганических соединений. Наиболее простым представителем алкилсиланов является метилсилан, содержащий в своей структуре идеальное соотношение углерод/кремний, равное 1/1.

В микроэлектронике покрытие 3C–SiC из метилсилана является перспективным при изготовлении кремниевых гетеробиполярных транзисторов [10]. Широко используемый процесс осаждения покрытий SiC на Si-подложку методом газофазного химического осаждения из смеси газов моносилан-пропан не подходит для изготовления кремниевых гетеробиполярных транзисторов из-за высокой температуры проведения процесса осаждения (~1000°C), при которой происходит диффузия примесей и разрушение заданной структуры. Для снижения температуры процесса осаждения SiC предлагается использовать в качестве исходного реагента метилсилан, который позволяет снизить температуру процесса на 250°C. Однако механизм осаждения покрытий SiC из метилсилана недостаточно изучен, так как при его разложении (несмотря на довольно простую структуру) возможно образование большого количества полупродуктов по разным механизмам протекания реакций.

Постоянное совершенствование методов и технологических приемов для изготовления КМ с высокими техническими характеристиками требует более глубокого понимания физико-химических процессов, механизмов химических реакций и причин их протекания, реакционной способности веществ, пространственного строения молекул. Этому способствуют широко применяемые теоретические методы квантово-химического расчета молекул, основанные на приближенных решениях уравнения Шредингера [11].

В работе [12] изучены начальные процессы разложения метилсилана методами квантово-химического расчета для выявления геометрических параметров реагентов, полупродуктов и продуктов рассматриваемых реакций. Расчет проведен неэмпирическим способом с использованием базисного набора 6-31G и теории возмущений Меллера–Плессета второго порядка. Начальный процесс разложения молекулы метилсилана представлен в виде ряда протекающих реакций:





Реакции (1)–(3) являются простым гомолитическим расщеплением, в которых разрываются связи C–Si, C–H, Si–H. По реакции (4) проходит обратимое выделение силилена и метана. Реакции (5) и (6) являются мономолекулярным 1,1- и 1,2-элиминированием молекул водорода. В более ранних расчетах молекул этана и дисилана по схожему механизму элиминирования установлено, что реакции являются конкурирующими с термодинамической точки зрения [13, 14]. Предварительная оценка энергии активации этих реакций позволяет сделать вывод о том, что 1,2-элиминирование является наиболее предпочтительным. Однако в случае дисилана низкая энергия образования дисилена по механизму 1,1-элиминирования с выделением водорода, за которым происходит изомеризация, предпочтительнее 1,2-элиминирования. Реакции (7) и (8) аналогичны реакциям (4) и (5) соответственно, при этом образование метилена в виде продукта реакции более предпочтительно по сравнению с силленом.

В работе [12] проведен расчет термодинамических параметров протекающих реакций относительно метилсилана и сравнение их с полученными экспериментальными значениями. Ошибка при расчете термодинамических данных составила не более 3%, что свидетельствует о высокой точности при оценке энергетических параметров таких реакций и возможности использования выбранного метода компьютерной химии для определения аналогичных реакций. Результаты расчета энергетических параметров реакций (1)–(8) начального процесса разложения молекулы метилсилана представлены в табл. 1.

Таблица 1

Энергетические параметры химических реакций относительно молекулы метилсилана

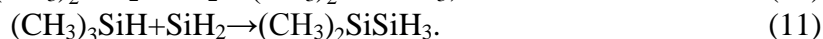
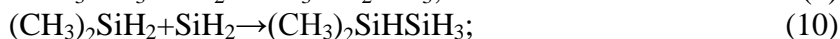
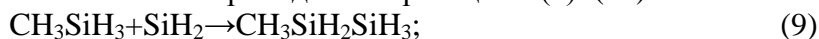
Условный номер реакции	1	2	3	4	5	6	7	8
ΔE , кДж/моль	374,9	391,7	441,4	220,7	246,2	237,8	512,5	535,9
ΔH , кДж/моль	345,3	364,9	402,1	208,2	221,1	207,7	476,1	489,9

Примечание. Здесь и далее: ΔE – изменение энергии; ΔH – изменение энтальпии.

Исходя из полученных значений по термодинамическим параметрам для реакций (1)–(8) можно выделить наиболее вероятные пути протекания конкурирующих реакций: образование силилена, образование молекулярного водорода по механизму 1,1- и 1,2-элиминирования. Вычисленные значения энтальпии являются различными для трех выбранных реакций (4)–(6) и составляют 208,2; 221,1 и 207,7 кДж/моль соответственно. При детальном рассмотрении и сравнении значений энергии активации этих реакций становится очевидным, что для взаимодействия по механизму 1,2-элиминирования (реакция (6)) энергия активации больше на 104,5 кДж/моль, чем для образования силилена (реакция (4)), и больше на 138,4 кДж/моль, чем для взаимодействия по механизму 1,1-элиминирования (реакция (5)).

В действительности по механизму 1,2-элиминирования требуется больше энергии, чем для разрыва связей C–Si и Si–H. Таким образом, на основании расчетов авторы работы [12] делают вывод о двух наиболее предпочтительных реакциях при пиролизе молекулы метилсилана: 1,1-элиминирование молекулы водорода и образование силилена.

В работе [15] исследовано взаимодействие силлена с метилсиланами методом квантово-химического расчета. Оптимизацию геометрических параметров молекулярных структур, выявление локальных минимумов (ЛМ), поиск переходных состояний и стационарных точек проводили неэмпирическим способом с использованием базисного набора 6-311G(d, p) и теории возмущений Меллера–Плессета второго порядка. Взаимодействие метилсиланов с силленом может проходить по реакциям (9)–(11):



По результатам расчета поверхности потенциальной энергии для реакций (9)–(11) установлено, что реакция (9) проходит с образованием двух локальных минимумов – ЛМ1 и ЛМ2, в отличие от реакций (10) и (11) – с одним локальным минимумом ЛМ2.

Для сравнения результатов и понимания механизма протекания реакций также исследована реакция силлена и моносилана с образованием дисилана, рассмотренная в работе [16].



Рассчитанные значения энергетических параметров реакций (9)–(12), полученные в работах [15] и [16], представлены в табл. 2.

Таблица 2

Энергетические параметры химических реакций присоединения силлена

Условный номер реакции	Значения параметров, кДж/моль, для					
	переходной структуры ЛМ2		переходного состояния		продуктов реакции	
	ΔE	ΔH	ΔE	ΔH	ΔE	ΔH
9	-45,3	-34,7	-42,7	-37,2	-235,1	-223,8
10	-54,9	-42,7	-51,0	-46,6	-235,1	-223,8
11	-58,2	-48,5	-55,6	-50,2	-236,4	-225,1
12	-35,1	-25,9	-33,5	-28,0	-236,6	-224,7

При анализе полученных данных авторами работы [15] и [16] определено, что взаимодействие молекул по реакциям (9) и (12) характеризуется схожими по виду поверхностями потенциальной энергии, которые имеют два локальных минимума на кривой энергетического профиля химической реакции. При этом в обоих случаях локальный минимум ЛМ1 характеризуется более низкой энергией по сравнению с локальным минимумом ЛМ2 на 50–63 кДж/моль. При сравнении геометрических параметров молекул в локальных минимумах обнаружено, что в локальном минимуме ЛМ1 структура молекулы имеет укороченную связь Si–Si и большее значение перемещения водорода по сравнению со структурой молекулы в локальном минимуме ЛМ2. Последствия замены метильных групп в исходном силане оказывают незначительное влияние на локальный минимум и геометрические параметры в переходном состоянии в отличие от энергетических показателей. Установлено, что увеличение метильных групп в исходном силане приводит к систематическому снижению значений энергии локальных минимумов и переходных состояний приблизительно на 25–37 кДж/моль на каждую добавленную метильную группу. Таким образом, становится понятно, что метильные группы стабилизируют комплексные структуры, соответствующие локальным минимумам и их переходным состояниям. Комплексные структуры ЛМ1 и ЛМ2 очень нестабильны и склонны к перегруппировке при преодолении энергетического барьера на уровне значения 3 кДж/моль. Сравнительные данные по теоретическому расчету

и экспериментальному определению энтальпии для реакций (9)–(12) показали хорошую воспроизводимость – разница составила 6–10 кДж/моль.

В работе [10] изучен процесс нанесения SiC-пленок методом химического осаждения из смеси метилсилана (1% (объемн.)) с водородом (99% (объемн.)). Процесс проводили при абсолютном давлении ~100 Па и температуре 650–850°C. В проведенных работах [10, 12] авторы полагают, что при термическом разложении метилсилана образуется активное соединение по химической реакции:



По полученным экспериментальным исследованиям [10] энергия активации составляет 188,2 кДж/моль. Молекулы образующегося активного соединения (одновременно с молекулами метилсилана) определяют скорость роста покрытий карбида кремния.

Авторы работы [17] изучали кинетику химического осаждения карбида кремния из газовой фазы метилсилана. Показано, что стехиометрия реакции образования карбида кремния близка к идеальной. Образующийся по реакции разложения метилсилана водород переходит преимущественно в молекулярный газообразный продукт, а твердый продукт содержит мало водорода. Вероятно, что причиной служит наличие близких значений энергии активации, найденных по степени превращения в газовой фазе (222±4 кДж/моль – по прореагировавшему метилсилану, 224±9 кДж/моль – по образовавшемуся водороду) и по массовой скорости роста твердой фазы (236±6 кДж/моль). Побочные примеси в виде углеводородов методом газовой хроматографии не выявлены.

Методами спектроскопии комбинационного рассеяния и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии установлено, что полученные SiC-покрытия близки по атомному соотношению к стехиометрическому составу (C/Si=0,9). Наблюдаемая энергия активации не уменьшается с ростом температуры, что указывает на кинетический режим протекания процесса. В качестве лимитирующей стадии роста SiC-покрытия принят отрыв молекулы водорода от метилсилана с образованием реакционноспособного бирадикала метилсилана по реакции (13).

В работе [18] сделано предположение, что процесс формирования карбида кремния из молекул метилсилана является гетерогенным, протекает только на поверхностных центрах, занятых хемосорбированными атомами (адатомами) водорода, и состоит из нескольких стадий. В соответствии с этим происходит постепенное закрепление кремниевого и углеродного центров молекулы метилсилана на подложке. Механизм взаимодействия молекулы метилсилана с углеродным центром поверхности представлен на рис. 1.

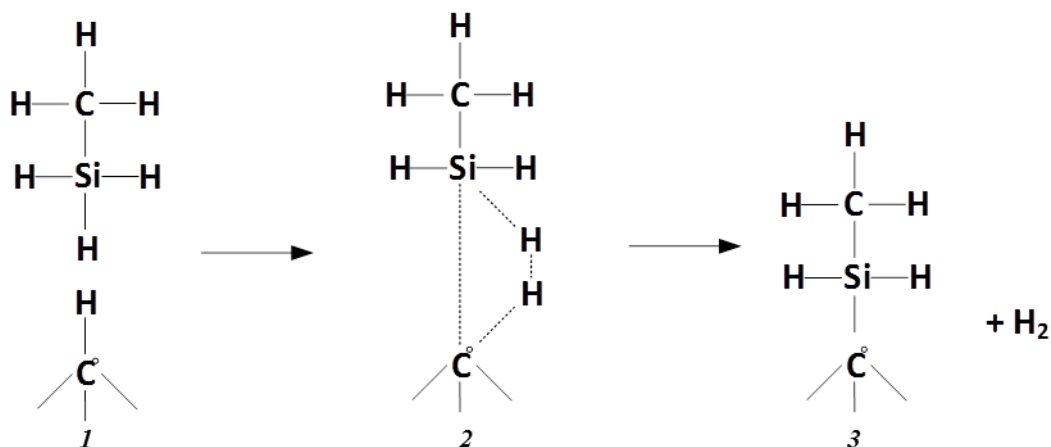


Рис. 1. Механизм взаимодействия молекулы метилсилана с углеродным центром поверхности

На первой стадии происходит физическая адсорбция молекулы метилсилана на поверхности (подложке), предназначенной для нанесения слоя карбида кремния. Адсорбированное состояние 1 является результатом удерживания молекулы метилсилана на гидрированной поверхности за счет сил Ван-дер-Ваальса. Следующее состояние 2 обусловлено разрывом связей Si–H в метилсилане и C–H атома водорода с поверхностным атомом углерода, при этом образуются новые связи 3 между атомом кремния и поверхностным атомом углерода. Продуктами взаимодействия в итоге являются метилсиллил, включенный в состав подложки, и молекула водорода.

По научно-техническим литературным данным известно, что изучение механизмов пиролиза метилсилана является неотъемлемой частью совершенствования методов и технологических приемов для изготовления КМ и других материалов с карбидом кремния, в том числе для изготовления высокотемпературных материалов [19].

Статья подготовлена в рамках реализации комплексной научной проблемы 12.1. «Металлические композиционные материалы (МКМ), армированные частицами и волокнами тугоплавких соединений» («Стратегические направления развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года») [1].

Материалы и методы

Предварительную оптимизацию геометрических параметров изучаемых химических соединений и поиск термодинамически стабильных структур проводили методом компьютерной химии с использованием силового поля и полуэмпирическим способом.

Квантово-химический расчет электронных и термодинамических характеристик выполнен неэмпирическим способом в приближении Хартли–Фока с использованием базисного набора 6-311+G (d) и теории возмущений Меллера–Плессета второго порядка при помощи программного комплекса Gaussian [20].

Результаты и обсуждение

Ранее авторами работ [12–18] проведены исследования пиролитического разложения отдельно взятой молекулы метилсилана, тогда как в газовой системе присутствует множество таких молекул и их взаимодействие друг с другом также имеет место. В научно-технической литературе сведения о межмолекулярном взаимодействии молекул метилсилана в процессе газофазного химического осаждения отсутствуют. Поэтому целью данной статьи является выявление возможности межмолекулярного взаимодействия молекул метилсилана методом неэмпирического квантово-химического расчета [20] и определение наиболее предпочтительного пути протекания реакции.

При взаимодействии двух молекул метилсилана в газовой фазе можно рассмотреть три основных варианта межмолекулярного протекания реакций с выделением молекулярного водорода и образованием следующих соединений: 1,2-диметилдисилан, (2-силлилэтил)силан и метил(силлилметил)силан. Структурные формулы образующихся соединений представлены на рис. 2.

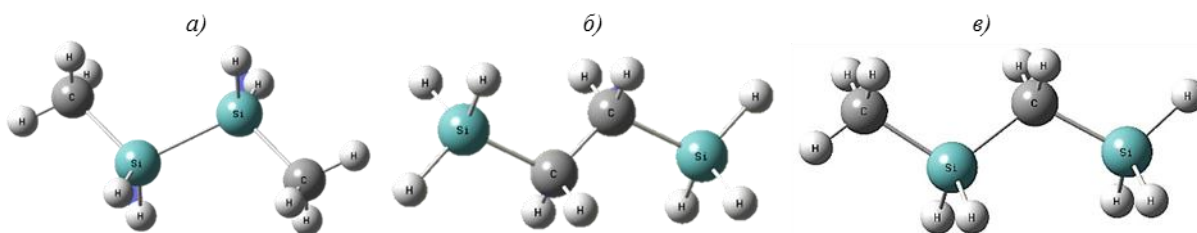
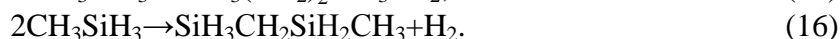
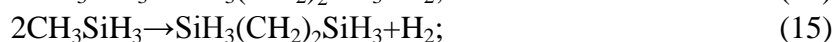
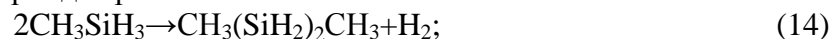


Рис. 2. Структурные формулы соединений:

a – 1,2-диметилдисилан; *b* – (2-силлилэтил)силан; *c* – метил(силлилметил)силан

Представленные структуры могут являться продуктами, полученными по химическим реакциям (14)–(16), проходящим с образованием связей Si–Si, C–C, C–Si и выделением молекулярного водорода, протекающим при температурах разложения метилсилана и осаждения карбида кремния:



Для полученных по химическим реакциям (14)–(16) молекул продуктов, а также исходного метилсилана в качестве реагента, выполнен квантово-химический расчет неэмпирическим способом с использованием базисного набора 6-311+G (d) и теории возмущений Меллера–Плессета второго порядка (MP2). Проведена оптимизация геометрических параметров молекулярных структур, рассчитаны термодинамические параметры и проведено сканирование поверхности потенциальной энергии для изучения возможного механизма протекания химических реакций.

По результатам проведенных расчетов получены термодинамические данные при температурах 298 и 1000 К (соответствует температуре пиролиза) для исследуемых соединений (метилсилан, водород, 1,2-диметилдисилан, (2-силилэтил)силан, метил(силилметил)силан): полная энергия молекулярной системы (E), энергия Гиббса (G), энтальпия (H), энтропия (S). Результаты расчетов представлены в табл. 3 и 4.

Таблица 3

Термодинамические данные реагента и продуктов химических реакций, рассчитанные методом MP2 6-311+G (d) при температуре 298 К

Соединение	E	H	G	S , Дж/(моль·К)
	кДж/моль			
1,2-диметилдисилан	-1732263,0	-1732260,5	-1732370,1	367,5
(2-силилэтил)силан	-1732216,2	-1732213,7	-1732318,1	350,2
Метил(силилметил)силан	-1732279,1	-1732276,7	-1732377,8	339,3
Метилсилан	-867622,3	-867619,8	-867698,5	263,7
Водород	-2975,7	-2973,2	-3012,0	130,1

Таблица 4

Термодинамические данные реагента и продуктов химических реакций, рассчитанные методом MP2 6-311+G (d) при температуре 1000 К

Соединение	E	H	G	S , Дж/(моль·К)
	кДж/моль			
1,2-диметилдисилан	-1732129,1	-1732120,8	-1732714,3	593,5
(2-силилэтил)силан	-1732083,0	-1732074,7	-1732648,2	573,5
Метил(силилметил)силан	-1732150,8	-1732142,5	-1732697,4	554,9
Метилсилан	-867554,1	-867545,8	-867928,6	382,8
Водород	-2961,0	-2952,7	-3118,1	165,5

Из данных, представленных в табл. 3 и 4, видно, что при увеличении температуры значения термодинамических данных для реагента и продуктов химических реакций увеличиваются. На основании полученных данных рассчитаны энергетические параметры для химических реакций (14)–(16) при стандартной и повышенной температурах, которые представлены в табл. 5.

Таблица 5

**Энергетические параметры химических реакций относительно молекул метилсилана
при разных температурах**

Условный номер реакции	ΔH	ΔG	ΔS	ΔH	ΔG	ΔS
	кДж/моль, при температуре, К					
	298			1000		
14	5,9	14,8	-29,8	18,0	24,8	-6,7
15	52,7	66,8	-47,1	64,2	90,9	-26,7
16	-10,2	7,1	-58,0	-3,6	41,6	-45,2

Сравнивая полученные результаты и анализируя рассчитанные термодинамические данные по химическим реакциям (14) и (15), видно, что образование 1,2-диметилдисилана и (2-силлилэтил)силана носит эндотермический характер и с повышением температуры этот эффект увеличивается. Образование метил(силлилметил)силана по химической реакции (16) носит экзотермический характер и с повышением температуры этот эффект значительно уменьшается.

По результатам полученных расчетов термодинамических характеристик можно сделать вывод, что при взаимодействии двух молекул метилсилана наиболее предпочтительной с энергетической точки зрения будет протекание химической реакции (16). Это связано в первую очередь с затруднениями при образовании новых связей C–C и Si–Si при сближении двух молекул метилсилана по сравнению со связью C–Si. Наиболее простым объяснением служит неравномерное распределение зарядов на атомах кремния и углерода в молекуле метилсилана по причине разной электроотрицательности элементов.

В данном случае для подтверждения этого высказывания и определения атомного заряда проведен расчет указанным ранее методом MP2 6-311+G (d). Установлено, что в молекуле метилсилана атому кремния соответствует значение 0,690, атому углерода – значение -1,065 по шкале Малликена.

Заключения

Проведена оценка возможности межмолекулярного взаимодействия молекул метилсилана методом неэмпирического квантово-химического расчета и рассмотрены три основных варианта протекания реакций с выделением молекулярного водорода и образованием следующих соединений: 1,2-диметилдисилана, (2-силлилэтил)силана и метил(силлилметил)силана.

Выполнена оптимизация геометрических параметров соединений, рассчитаны термодинамические данные реагентов и продуктов химических реакций неэмпирическим способом с использованием базисного набора 6-311+G (d) и теории возмущений Меллера–Плессета второго порядка.

По результатам проведенных расчетов установлено, что наиболее предпочтительным является протекание химической реакции с образованием метил(силлилметил)силана.

ЛИТЕРАТУРА

1. Каблов Е.Н. Инновационные разработки ФГУП «ВИАМ» ГНЦ РФ по реализации «Стратегических направлений развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года» // Авиационные материалы и технологии. 2015. №1 (34). С. 3–33. DOI: 10.18577/2071-9140-2015-0-1-3-33.
2. Каблов Е.Н. Материалы нового поколения – основа инноваций, технологического лидерства и национальной безопасности России // Интеллект и технологии. 2016. №2 (14). С. 16–21.

3. Гращенков Д.В. Стратегия развития неметаллических материалов, металлических композиционных материалов и теплозащиты // *Авиационные материалы и технологии*. 2017. №S. С. 264–271. DOI: 10.8577/2071-9140-2017-0-S-264-271.
4. Каблов Е.Н. ВИАМ: материалы нового поколения для ПД-14 // *Крылья Родины*. 2019. №7–8. С. 54–58.
5. Сидоров Д.В., Серпова В.М., Шавнев А.А. Взаимодействие титановых сплавов и волокон карбида кремния в металлических композиционных материалах системы Ti–SiCf // *Химическая технология*. 2018. Т. 19. №8. С. 339–344.
6. Сидоров Д.В., Серпова В.М., Шавнев А.А. Способы изготовления и области применения высокопрочных волокнистых композиционных материалов, армированных kernовым волокном карбида кремния // *Все материалы*. Энциклопедический справочник. 2018. №3. С. 15–22.
7. Евдокимов С.А., Щеголева Н.Е., Сорокин О.Ю. Керамические материалы в авиационном двигателестроении (обзор) // *Труды ВИАМ: электрон. науч.-технич. журн*. 2018. №12 (72). Ст. 06. URL: <http://www.viam-works.ru> (дата обращения: 05.09.2019). DOI: 10.18577/2307-6046-2018-0-12-54-61.
8. Johnson D.W., Evans A.G., Goettler R.W. *Ceramic Fibers and Coatings: Advanced Materials for the Twenty-First Century*. Committee on advanced fibers for high-temperature ceramic composites. Washington DC: Nat. Acad. Press, 1998. 112 p.
9. Сидоров Д.В., Стороженко П.А., Шутова О.Г., Кожевников Б.Е. Получение алкилсиланов высокой чистоты // *Химическая технология*. 2006. №7. С. 22–24.
10. Ohshita Y. Reactants in SiC chemical vapor deposition using CH₃SiH₃ as a source gas // *Journal of Crystal Growth*. 1995. Vol. 147. P. 111–116.
11. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. *Теория строения молекул*. Ростов н/Д: Феникс, 1997. 560 с.
12. Gordon M., Truong T. Potential primary pyrolysis processes of methylsilane // *Chemical Physics Letters*. 1987. Vol. 142. P. 110–114.
13. Truong T., Gordon M., Pople J. Thermal decomposition pathways of ethane // *Chemical Physics Letters*. 1986. Vol. 130. P. 245–249.
14. Gordon M., Truong T., Bonderson E. Potential Primary Pyrolysis Processes for Disilane // *Journal of the American Chemical Society*. 1986. Vol. 108. P. 1421–1427.
15. Becerra R., Carpenter I., Gordon M. Gas phase kinetic and quantum chemical studies of the reaction of silylene with the methylsilanes. Absolute rate constants, temperature dependences, RRKM modeling and potential energy surfaces // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2007. Vol. 9. P. 2121–2129.
16. Gano R., Gordon M., Boatz J. Ab initio study of some methylene and silylene insertion reactions // *Journal of the American Chemical Society*. 1991. Vol. 113. P. 6711–6718.
17. Абызов А.М., Смирнов Е.П. Кинетика химического осаждения карбида кремния из газовой фазы метилсилана // *Неорганические материалы*. 2000. Т. 36. №9. С. 1059–1066.
18. Лахин А.В. Процессы получения композиционных материалов и покрытий на основе карбида кремния химическим газофазным осаждением из метилсилана при относительно низких температурах и давлениях: автореф. дис. ... канд. техн. наук. М., 2006. 25 с.
19. Прокофьев В.А., Сорокин О.Ю., Ваганова М.Л., Лебедева Ю.Е. Высокотемпературный материал с градиентной структурой, полученный методом жидкофазной инфильтрации расплава // *Труды ВИАМ: электрон. науч.-технич. журн*. 2018. №11 (71). Ст. 06. URL: <http://www.viam-works.ru>. (дата обращения: 01.10.2019). DOI: 10.18577/2307-6046-2018-0-11-45-53.
20. Gaussian-09: revision A.02 / Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Wallingford, CT: Gaussian Inc., 2009.