

$\text{NaK}_2\text{ScCl}_6$

1990

Белоручкова Л. П.,
Васильева Т. О. и др.

ДфН Вестн. ЛГУ. Сер. Ч.
1990. № 3. С. 93-96.

(сир. $\text{Rb}_2\text{Sc}_2\text{Cl}_9$; I)

КНалб

Дм 34 201

1990

Буртнев Б.П.,

Кр. АН, АБ

Арм. хим. а. 1990, 43,
N 3, 155-160.

$\text{Na}_{1.46}\text{K}_{0.23}\text{Ca}_{3.44}\text{Al}_{8.55}\text{Si}_{27.44}\text{O}_{72} \cdot 23,99\text{H}_2\text{O} / 1990$

21 Б3029. Термогравиметрическое исследование фазового превращения в цеолите гейландите при дегидратации. Thermogravimetric investigation of the phase transition in the zeolite heulandite at dehydration / Drebuschak V. A. // Thermochim. acta.— 1990.— 159.— С. 377—381.— Англ.

Дегидратация природного гейландита состава $\text{Na}_{1.46}\text{K}_{0.23}\text{Ca}_{3.44}\text{Al}_{8.55}\text{Si}_{27.44}\text{O}_{72} \cdot 23,99\text{H}_2\text{O}$ при нагревании на воздухе в интервале от 20 до 250°С исследована методом ТГА. Цеолит при т-ре начала фазового перехода 240°С содержит $9,7 \pm 0,5$ моля H_2O на элементарную ячейку. Удаление 2,5 моля воды при 240—250°С является фазовым переходом 1 рода, $\Delta_{\text{trs}}H = 296 \pm 37$ кДж/моль, по др. данным того же автора для интервала 135—210°С $\Delta H = 299 \pm 30$ кДж/моль. Л. А. Резницкий

фазов. превр.

X. / 1990, № 1

КНх

1990

12 И19. Экспериментальное исследование давления насыщенных паров бинарных систем щелочных металлов / Ермилов Б. И., Каландришвили А. Г., Михеев В. К. // Теплофиз. высок. температур.— 1990.— 28, № 3.— С. 599—601

Методом тепловой трубы измерено давление (P) насыщенных паров бинарных систем натрий—калий и натрий—цезий различного состава в зависимости от T в интервале 550—1000 К. Чистота использованных в-в составляла для натрия — 99,96, калия — 99,976 и цезия — 99,988 мас.%. На основании математич. обработки эксперим. данных по методу наименьших квадратов определены температурные зависимости коэф. A и B в аппроксимирующем уравнении $\lg P = A - B/T$. Анализ полученных результатов указывает на их погрешность $\approx 5\%$ при T -ре 550—750 К и 3% при более высокой T -ре. Обсуждается наблюдаемое отклонение эксперим. данных от значений P , рассчитанных по закону Рауля в предположении, что исследуемые сплавы в первом приближении подчиняются этому закону. Проведено сравнение полученных данных с известными эксперим. результатами для близких по составу сплавов. Б. И. А.

(P)

CsNa $\bar{x}$ (H) $\boxtimes$

ф. 1990, N 12

$K_3Na_2[InO_4]$

1990

11 Б2028. Новый тип четверного оксометаллата $K_3Na_2[InO_4]$ [1]. Ein neuer Typ quaternärer Oxometallate: $K_3Na_2[InO_4]$ [1] / Glaum H., Hoppe R. // Monatsh. Chem.— 1990.— 121, № 11.— С. 853—864.— Нем.; рез. англ.

Проведен РСТА (λ Ag, 2583 отражений, R 0,073) кристаллов $K_3Na_2[InO_4]$ (I), полученных окислением интерметаллида $KNaIn_2$ (II) в смеси K_2O_2 : II = 1,2:1 в Ag-трубке при 380—480° С в течение 7 суток. Параметры монокл. решетки I: a 1012,6, b 969,9, c 725,4 пм, β 91,02, Z 4, ф. гр. $P2_1/n$. В 3-мерную сетку $\infty^3\{Na_2InO_4\}$, образованную цепочками из объединенных по ребрам InO_4 и NaO_4 -тетраэдров внедрены катионы K^+ (координац. полиэдр-тригон. бипирамида). Эффективные КЧ In — 4, Na 3,7—3,8, K 4,5—5,1, сред. фикт. ионные радиусы этих элементов 67, 92—94, 138—148 пм, расстояния In—O 205—209, Na—O 226—258, K—O 260—350 пм. Маделунговская часть энергии решетки 3535 ккал/моль. Проведен расчет баланса валентных усилий I, отмечено сильное занижение степени окисления для In (2,53) и для K (0,80). В. Б. Калинин

X. 1991, N 11

$K_3Na(CrO_4)_2$

1990

12 Б2059. Структура и фазовый переход $K_3Na(CrO_4)_2$. Structure and phase transition of $K_3Na(CrO_4)_2$ / Madariaga G., Breczewski T. // Acta crystallogr. C.— 1990.— 46, № 11.— С. 2019—2021.— Англ.

Методом РСТА (293 К, λ Мо, 709 ненулевых отражений, R 0,030) изучено строение гексагон. $K_3Na(CrO_4)_2$ (I), полученного из водн. р-ра при 315 К. Для I a 5,8580, c 7,523 А, Z 1, ρ (изм.) 2,77, ρ (выч.) 2,77, ф. гр. $P\bar{3}m1$, СТ $K_3Na(SO_4)_2$. Структура построена из тетраэдров CrO_4 ($Cr-O$ средн. 1,639 А), NaO_6 -октаэдров ($Na-O$ 2,364 А) и полиэдров атомов К (10- или 12-вершинник), $K-O$ 2,586—3,3834 А, уложенных вдоль [001]. Данные структурных и акустич. исследований I указали, что фазовый переход при 239 К имеет сегнетоэластич. характер, при этом имеет место изменение точечной группы симметрии $\bar{3}m$ на $2/m$.

М. Б. Варфоломеев

структура
и
фазовый
переход

X.1991, N 12

$KNa(CN)_x$

1990

113: 66395r Low temperature specific heat anomalies and β -relaxation in sodium potassium cyanide. Mertz, Berthold (Inst. Phys., Johannes Gutenberg-Univ., 6500 Mainz, Fed. Rep. Ger.). *Ferroelectrics* 1990, 106, 169-74 (Eng). To contrast two theories for glasses, namely a microscopic theory developed for $(KBr)_{1-x}(KCN)_x$ glasses and the std. tunneling model, time-resolved sp. heat results of $(NaCN)_{1-x}(KCN)_x$ mixed crystals were fitted by using both approaches. Dielec. measurements were carried out in order to apply the former theory, which connects the low- T sp. heat anomalies to the high- T β -relaxational process.

(G)

C.A. 1990, 113, N 8

$KNa(CN)_x$

1990

18 Б3006. Калориметрические исследования стекол $(NaCN)_{1-x}(KCN)_x$. Calorimetric investigations of $(NaCN)_{1-x}(KCN)_x$ glasses / Mertz B., Berret J. F., Böhmer R., Loidl A., Meissner M., Knaak W. // Phys. Rev. B.— 1990.— 42, № 12.— С. 7596—7603.— Англ.

Теплоемкость C_p стекол $(NaCN)_{1-x}(KCN)_x$ ($x=0,19, 0,59$ и $0,85$) определена в адиабатич. калориметре в интервале $0,04—100$ К. Установлена логарифмич. зависимость C_p от времени нагрева при $T < 1$ К, к-рая типична для стекол. Избыточный вклад в C_p проявляется при низких T -рах, а в интервале $3 < T < 6$ К зависимость $C_p/T^3—T$ выходит на плато у всех составов. Аномальная зависимость $C_p(T)$ связывается с ориентац. упорядочением ионов CN^- в исследованном интервале конц-ий тв. растворов. Л. А. Резницкий

X. 1991, N 18

$KNa(CN)_x$

1990

113: 239054j Calorimetric investigations of sodium cyanide-potassium cyanide glasses. Mertz, B.; Berret, J. F.; Boehmer, R.; Loidl, A.; Meissner, M.; Knaak, W. (Inst. Phys., Univ. Mainz, D-6500 Mainz, Fed. Rep. Ger.). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1990, 42(12), 7596-603 (Eng). Results of specific-heat investigations in the glassy state of $(NaCN)_{1-x}(KCN)_x$ are presented, utilizing time-resolved and std. quasiadiabatic specific-heat techniques. Crystals with concns. $x = 0.19, 0.59$, and 0.85 were investigated, which exhibit frozen-in orientational disorder. At low temps. ($T \lesssim 1$ K), the typical glasslike anomalies such as a logarithmic time dependence and a linear variation with temp. were detected. The existence of an excess contribution, which in glassy materials is usually termed a T^3 excess heat capacity, could not be detd. unambiguously. However, extra contributions to the sp. heat were obsd. around 1 K.

(G)

C.A. 1990, 113, N 26

$KNa(CN)_x$

1990

113: 68697q Phases and phase transitions in the mixed molecular system sodium cyanide-potassium cyanide. Schraeder, T.; Loidl, A.; Vogt, T. (Inst. Phys., Univ. Mainz, D-6500 Mainz, Fed. Rep. Ger.). *Z. Phys. B: Condens. Matter* 1990, 79(3), 423-30 (Eng). The phase diagram of $(NaCN)_{1-x}(KCN)_x$ was examd. by neutron powder diffraction at 5-300 K. Several non-cubic low-temp. phases were identified for concns. $x < x_{c1} = 0.15$ and $x \geq x_{c2} = 0.89$. Lattice parameters and ferroelastic deformations were dctd. from the obsd. powder patterns. The phase transformations were characterized following the temp. dependence of the appropriate order parameters.

фазовая
диаграмма

с.А. 1990, 113, № 8

Смеси

NaSCN-KSCN

1991

6 И223. Свойства обогащенных KSCN расплавленных смесей NaSCN-KSCN. Properties of KSCN-rich molten NaSCN-KSCN mixtures / Igarashi Kazuo, Tajiri Koji, Asahina Tadashi, Kosaka Mineo, Iwadata Yasuhiko, Mochinaga Junichi //Z. Naturforsch. A.— 1991. — 46, № 6.— С. 540—544.— Англ.

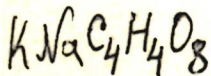
Для расплавленных смесей NaSCN-KSCN с содержанием KSCN более 50 мол.% выполнены измерения молярного объема (V_m), электропроводности (κ), показателя преломления (n), поверхн. натяжения (γ) и уд. теплоемкости (C_p) в зависимости от состава смеси и т-ры в интервале 400—560 К. Измерения проведены в атмосфере азота при скорости нагрева 5 К/мин. Найдено, что величина γ обладает минимумом при содержании KSCN около 70 мол.%. Значение C_p для смеси эвтектич. состава постоянно в интервале т-ры 413—471 К и равно 148 Дж/К·моль, тогда как в

(6)

ф. 1992, № 6

твёрдой фазе C_p проявляет монотонный рост с увеличением t -ры. Величина n при постоянной t -ре изменяется нелинейно при изменении состава смеси. Приведены коэф. зависимостей, описывающих поведение V_m от t -ры и состава. С помощью полуклассич. ур-ния Клаузиса—Москотти выполнена оценка электронных поляризуемостей ионов в исследуемой расплавленной системе. Библ. 32.

Фазный
переход
II рода



1992

1) 7 И163. Переход второго рода в насыщенных растворах солей Рошеля. Second-order transition in Rochelle-salt saturated solutions / Alexandru Horia V. // Phys. Rev. A. — 1992. — 45, № 12. — С. 8632—8643. — Англ.

На основании измерений температурных зависимостей растворимости и плотности исследован переход второго рода для водных растворов кристаллов соли Рошеля различной конц-ии. Установлено, что поведение коэф. теплового расширения и температурной производной плотности для ряда растворов вдоль кривой растворимости указывают на наличие скачкообразного изменения при $t_{\text{ре}}$ около 24°C , которая является точкой Кюри ферромагн. перехода для указанных монокристаллов. Измерения электропроводности дают небольшой пик диэлектрич. постоянной при этой $t_{\text{ре}}$, подтверждая существование ферромагн. фазы в растворе. В работе также измерены диэлектрич. потери, энтальпия растворимости и избыточный объем растворов. Полученные результаты свидетельствуют об образовании ассоциатов молекул тартрата $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_8$ с четырьмя молекулами воды, наподобие ситуации в гидратах. Библ. 54.

ф. 1993, № 7

NaKSnF₆

1992

9 Б2027. Кристаллическая структура NaKSnF₆ / Герасименко А. В., Иванов С. Б., Антохина Т. Ф., Сергиенко В. И. // Координац. химия.— 1992.— 18, № 2.— С. 129—132.— Рус.

Проведен РСТА кристаллов NaKSnF₆ (I, λ Mo, 1873° отражения, метод тяжелого атома, анизотропный МНК, R 0,023, R_w 0,028). Кристаллы I — ромбич.: a 11,800, b 6,000, c 8,125 Å, Z 4, ρ (эксп.) 3,42, ρ (выч.) 3,41, ф. гр. $Pna2_1$. Координац. полиэдрами Sn и Na являются искаженные октаэдры с атомами фтора в вершинах ($\bar{r}(\text{Sn—F})=1,960$, $\bar{r}(\text{Na—F})=2,308$ Å), Sn- и Na-октаэдры, объединяясь друг с другом по ребрам и вершинам, образуют трехмерный каркас, в пустотах которого располагаются катионы K⁺.

структура

X. 1992, № 9

NAC - K By Lenire R.F., Saluja P.P.S. 1992
Campbell A.B. et al.,

CP 12th IUPAC Cong. Chem.
Thermodyn [and] H Meet.
47th Calorim. Cong., Snowbird,
Utah, 16-21 Aug; 1992.

Program. Abstr., and Repts. - S.I.,
1992, C-306-307

ccy. KY (I)

$K_3Na(SeO_4)_2$

1992

10E614. Фазовый переход в сегнетоэластике $K_3Na(SeO_4)_2$: исследование методом бриллюэновского рассеяния и теоретическое моделирование. Ferroelastic phase transition in $K_3Na(SeO_4)_2$. Brillouin-scattering studies and theoretical modeling / Mróz B., Kieft H., Clouter M. J., Tuszynski J. A. // Phys. Rev. B. — 1992. — 46, № 14. — С. 8717—8724. — Англ.

Упругие свойства сегнетоэластика $K_3Na(SeO_4)_2$ исследованы методом мандельштам—бриллюэновского рассеяния в диапазоне т-р 290—380К. Измерены температурные зависимости девяти мод акустич. волн, распространяющихся в направлениях [100], [010], [001] и [011]. Переход $\bar{3}m \rightarrow 2/m$ происходит при охлаждении при $T_c = 334K$. За 12К до перехода наблюдается смягчение упругой постоянной C_{33} , у C_{44} наблюдаются провалы как при T_c , так и при начале смягчения C_{33} . Сделано заключение, что переход $\bar{3}m \rightarrow 2/m$ осуществляется через неизвестную промежуточную фазу Q и смягчение C_{33} и C_{44} связано с этой фазой. Проведено теоретич. рас-

T_c

ср. 1993, N 10

смотрение фазового перехода на основе феноменологич. теории Ландау. Постулировано существование вторичного параметра порядка Q и показана его связь с первичным параметром порядка σ . Наличие Q и объясняет существование промежуточной Q -фазы.

В. П.



K_2SO_4 -NaCl eucnemema

1993

120:87804h Melting point determination of the potassium sulfate-sodium chloride system. Ahila, S.; Iyer, S. Ramakrishna; Radhakrishnan, V. M. (Dep. Metall. Eng., Indian Inst. Technol., Madras, 600 036 India). *J. Mater. Sci. Lett.* 1993, 12(22), 1733-4 (Eng). The authors attempted to find the low melting compn. of a mixt. of K_2SO_4 and NaCl, which commonly occurs in coal-fired boilers operating in marine atmospheres. When NaCl is combined with potassium sulfate, liq. phase is formed at lower temps.

C.A. 1994, 120, ~ 8

$\text{NaKC}_4\text{H}_6\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$

1993

118: 176986v Heat-capacity anomalies in Rochelle salt ($\text{NaKC}_4\text{H}_6\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$) studied with a conduction-type calorimeter. Dey, P. K.; Som, K. K.; Chowdhury, K. R.; Sarkar, B. K.; Chaudhuri, B. K. (Solid State Phys. Dep., Indian Assoc. Cultiv. Calcutta, 700032 India). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1993, 47(6), 3001-4 (Engl). By using a conduction-type calorimeter the authors have reinvestigated the phase transition in Rochelle salt ($\text{NaKC}_4\text{H}_6\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$) at temp. $T_0 = 212$ K reported by Bronowska [J. Appl. Crystallog. 14, 203 (1982)] from structural- and thermal-expansion studies. In

(T_{tr}, C_p)

contrast to some of the previously reported neg. heat capacity anomalies in Rochelle salt at T_0 and $T_c = 256$ K, we obsd. only pos. heat-capacity anomalies at the three temps. $T_0 = 212$ K, $T_c = 256$ K, and $T_a = 297$ K.

C.A. 1993, 118, N18

$(K_{1-x}Na_x)MnF_3$

1993

16 Б2027. Структурные фазовые переходы в смешанных перовскитных кристаллах $(K_{1-x}Na_x)MnF_3$ и $(K_{1-x}Li_x)MnF_3$. Structural phase transitions in $(K_{1-x}Na_x)MnF_3$ and $(K_{1-x}Li_x)MnF_3$ mixed perovskite crystals /Ratuszna A. //J. Phys.: Condens. Matter .—1993 .—5 ,№ 7 .—С. 841—850 .—Англ.

Для четырех образцов $(K_{1-x}Na_x)MnF_3$ $x=0,01$; 0,02 и $(K_{1-x}Li_x)MnF_3$ $x=0,005$; 0,01 проведено рентгенографич. исследование при 300—4,2 К. По рефлексам 220 и 400 определено изменение исходной кубич. симметрии образцов: кубич.—тетрагон.—ромбич.—монокл. Добавки Na и Li приводят к увеличению т-ного интервала существования ромбич. фазы до 30 К. Обсуждено изменение строения перовскитных фаз с точки зрения изменения наклона октаэдров MnF_6 , составляющих каркас структуры.

В. П. Сиротинкин

(T_{t2})

Х. 1993, N 16

$H_2O-NaOH-KOH$

1994

122: 269067u Thermophysical properties of $H_2O-NaOH-KOH$ mixtures: Experimental data. Asdrubali, F.; Cotana, F.; Santarpia, L. (Istituto di Energetica, Università di Perugia, 06125 Perugia, Italy). *Sci. Tech. Froid* 1994, (2 CFCS, the Day After), 717-27 (Eng). Sodium hydroxide-water mixts. were proposed for use in absorption refrigeration since one hundred years ago, because of their favorable vapor pressure characteristics. Unfortunately, they could not have com. applications for their chem. aggressivity against most of suitable materials. In the recent years, progresses in the materials technol. have made feasible the utilization of these compds., so that several studies and also design patents have been developed. Usually ternary and quaternary mixts. are utilized, in order to increase solubilities and to have low viscosities. A ternary mixt. $H_2O-NaOH-KOH$ is considered, with different values of the mole ratio between salts. Vapor pressures, sp. heats, kinematic viscosities, and densities are exptl. detd. P-T-X diagrams are traced and mixts. with most favorable ratios between salts are selected.

термодинам.
св-ра смеси

Р, G . . .

C. A. 1995, 122; ~ 22

$K_3Na(SeO_4)_2$

1994

123: 155343w Raman studies of lattice vibrations in ferroelastic $K_3Na(SeO_4)_2$. Kaczmariski, M.; Mroz, B.; Kieft, H.; Clouter, M. J.; Rich, N. H. (Institute Physics, A. Mickiewicz University, 60-780 Poznan, Pol.). *Ferroelectrics* 1994, 152(1-4), 679-83 (Eng). Low frequency polarized Raman spectra of ferroelastic $K_3Na(SeO_4)_2$ single crystal was examd. in the temp. range from 80 to 360 K. The phase transition $3m \rightarrow 2/m$ at $T_c=334$ K is assocd. with A_g soft phonon mode in ferroelastic phase. Its frequency varies as $(T_c - T)^{1/3}$ in very wide temp. range, suggesting a first-order type transition. The existence of another phase transition at $T_0 = 346$ K was confirmed by the vanishing of few modes at this temp.

(T_{t2})

CA. 1995, 123, N12

Na₂ K₂Co Tarigaki L., Hiroseawa I.,
et al., 1994.

pay ne-
pexy Phys. Rev. B: Condens.
Matter 1994, 49 (17),

12307-10

(un. Na₂ K₂Co • ; I)

NaKBr₂

1995

(Kp)

124: 186820z Thermodynamics of $\{x\text{NaBr} + (1-x)\text{KBr}\}(\text{s})$ investigated by mass spectrometry. Kapala, Jan; Chuda, Alina (Inst. Inorg.Chem. Metallurgy Rare Elements, Technical Univ. Wroclaw, 50-370 Wroclaw, Pol.). *J. Chem. Thermodyn.* 1995, 27(12), 1313-18 (Eng). The mass spectrum over $\{x\text{NaBr} + (1-x)\text{KBr}\}(\text{s})$ measured at the temp. 800 K exhibits the ions Na^+ , K^+ , NaBr^+ , KBr^+ , Na_2Br^+ , NaKBr^+ , and K_2Br^+ . The excess molar Gibbs free energy of the solid soln. has been obtained: $G_m^E(800 \text{ K})/(\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}) = x(1-x)(10320 \pm 350)$. The temp. dependence of the std. equil. const. of the reaction of formation of $\text{NaKBr}_2(\text{g})$: $\text{Na}_2\text{Br}_2(\text{g}) + \text{K}_2\text{Br}_2(\text{g}) = 2\text{NaKBr}_2(\text{g})$. has been detd.

C. A. 1996, 124, N 14

$K_6Na_3Sb[GaSb_3]$

1995

20 Б265. Кристаллическая структура натрий-калий-антимонид триантимонидо-галлата $K_6Na_3Sb[GaSb_3]$. Crystal structure of sodium potassium antimonide triantimonido-gallate, $K_6Na_3Sb[GaSb_3]$ / Somer M., Carillo-Cabrera W., Peters E.-M., von Schnering H. G. // Z. Kristallogr. — 1995. — 210, № 2. — С. 210. — Англ.

Проведен синтез $K_6Na_3Sb[GaSb_3]$ (I) из стехиометрической смеси K, NaSb, GaSb в запаянной Nb-ампуле при 925K. Проведен РСТА (λ Mo, 452 отражения, $R(F)$ 0,022). Кристаллы гексагон., a 10,2180, c 10,590А, Z 2 ф.гр. $P6_3/mmc$. Структура состоит из колонок конденсированных $[K_6Na_{6/2}]$ -икосаэдров, центрированных атомами Sb и связанных тригонально-планарными анионами $GaSb_3$ (Ga—Sb 2,611). Структура родственна $Al_{10}Mn_3$.

Н. Л. Смирнова

Кристал-
структура

X. 1995, N 20

1995

20 5263. Кристаллическая структура дикалий-литий-фосфида-алюмината K_2LiAlP_2 . Crystal structure of dipotassium lithium catena-di- μ -phosphido-aluminate, K_2LiAlP_2 / Somer M., Carillo-Cabrera W., Peters E.-M., Peters K., von Schnering H. G. // Z. Kristallogr. — 1995. — 210, № 2. — С. 142. — Англ.

Проведен синтез K_2LiAlP_2 (I) из стехиометрической смеси K, LiP, AlP, в запаянной стальной ампуле при 925 °К. Выполнен РСТА желтых пластинчатых кристаллов I (λ Mo, 321 отражения, R 0,020, 293K). Кристаллы ромбич., а 6,1534, b 14,656, c 6,1012 Å, Z 4, ф. гр. 1 ват, структурный тип K_2NaGaP_2 . Анионная часть структуры состоит из бесконечных цепей $[AlP_4]_2^{3-}$ -тетраэдров (изостеричных SiS_2). Межатомные расстояния: Al—P 2,420, $\angle PAIP$ 101,8°, $AlPAI$ 78,2°.

Н. Л. Смирнова

Синтез,
кристалл.
структура

X. 1995, N 20

$K_3Na(SeO_4)_2$

1996

3 Б2214. Сегнетоэлектрические фазовые переходы в кристалле $K_3Na(SeO_4)_2$ со структурой типа глазерита. Ferroelastic phase transitions in the $K_3Na(SeO_4)_2$ glaserit-type crystal / Díaz-Hernández J., Mañes J. L., Tello M. J., López-Echarri A., Breczewski T., Ruiz-Larrea I. // Phys. Rev. B .— 1996 .— 53 , № 21 .— С. 14097—14102 .— Англ.

(T₄₂)

Л. 1997, № 3

NdCl₃ - NaCl - KCl

1997

127: 254274p Phase equilibria of NdCl₃-NaCl-KCl. Hosoya, Yuji; Terai, Takayuki; Tanaka, Satoru; Takahashi, Yoichi (Department of Quantum Engineering and Systems Science, University of Tokyo, Bunkyo-ku, Tokyo, Japan 113). *J. Nucl. Mater.* 1997, 247, 304-308 (Eng), Elsevier. Molten chloride is considered to be applied to an FBR fuel and a solvent in the pyrochem. reprocessing of spent nuclear fuel. In this work, phase diagrams for molten chloride systems were constructed, using NdCl₃ as a simulant for UCl₃ or PuCl₃. A compd. of 3NdCl₃·NaCl, which melts incongruently at 540°C to NdCl₃ and liq. and a eutectic at 437°C were found in the NdCl₃-NaCl system. In the NdCl₃-KCl system, many invariant reactions were obsd.: the decompn. of NdCl₃·2KCl and 2NdCl₃·KCl at 444 and 474°C, resp.; a eutectic at 489°C; a peritectic at 506°C; and a monotectic at 624°C. It is thought that there should be a peritectic compd. of 6NdCl₃·KCl >474°C. A compd. of 2NdCl₃·NaCl·KCl was considered to exist in the ternary system NdCl₃-NaCl-KCl, to which attention should be paid in detg. the compn. of the fuel of the molten-salt FBR.

graph
part of the

C.A. 1997, 127, ~18

F: KCl-NaF-KBF₄

P: 1

131:328122 Interaction of salts in quaternary mutual
system K, Na, doublet Cl, F. Bugaenko, V. V.;

Kas'yanenko, G. Ya.; Cherednik, I. M. Sums'kii

Derzhavnii Pedagogichnii Inst. Sumy, Ukraine

Ukr. Khim. Zh. (Russ. Ed.), 64(7-8), 10-15

(Russian/Ukrainian) 1998 Institut Obshchei i

Neorganicheskoi Khimii im. V. I. Vernadskogo NAN

Ukrainy. Ukr. Khim. Zh (Russ. Ed.) 64 7-8

10-15 Russian/Ukrainian 1998 The

quaternary mutual system (QMS) of K, Na, BF_4 , Cl, F was studied by thermal phase analysis. The melting diagrams of three-component systems were constructed. The systems analyzed include an unfolding of the composition-temperature phase diagram of the QMS and for two inner permanent sections of KCl-NaF- KBF_4 and NaCl-NaF- KBF_4 temperature-composition diagrams of three quaternary eutectics in the system of K, Na, BF_4 , Cl, F were found. The general characteristics of primary crystallization in the QMS are given.

F: NaKF2

P: 1

21B1123. Неэмпирическое исследование строения, силовых полей и колебательных спектров димерных молекул фторидов щелочных металлов $MM'F_2$ (M, $M'=Li, Na, K$) / Соломоник В. Г., Слизнев В. В. // Ж. структур. химии. - 1998. - 39, 2. - С. 196-209. - Рус.

Выполнены неэмпирические расчеты равновесных геометрических параметров, силовых постоянных, частот колебаний и интенсивностей в ИК спектрах молекул LiF_2 , NaF_2 , KF_2 , $LiNaF_2$, $LiKF_2$, $NaKF_2$. Используются методы Хартри-Фока-Рутана, теории возмущений Меллера-Плессета второго порядка и конфигурационного взаимодействия с

1998

ФЖХ, 1998, №21

включением одно- и двукратных возбуждений и с учетом поправки на квартичные возбуждения и базисы сгруппированных гауссовых функций: Li - (9s3p1d/4s3p1d), Na - (12s8p1d/6s4p1d), K - (14s11p3d/9s8p3d), F (9s5p1d/4s2p1d). Согласно расчетам у изученных молекул равновесными являются плоские циклические структуры симметрии D[2h] (у M[2]F[2]) и C[2v] (у MM'F[2]). Линейные конфигурации M-F-M'-F (симметрии C['БЕСКОНЕЧН' 'ню']) на 70-190 кДж/моль менее

стабильны, чем циклические; у всех молекул, за исключением M-F-K-F, они отвечают локальным минимумам на поверхности потенциальной энергии. На примере рассмотренных молекул обсуждена роль корреляционных эффектов в неэмпирических расчетах геометрии, силовых полей и характеристик ИК спектров молекул с высокой полярностью хим. связей. Теор. силовые поля молекул представлены в канонической форме в системе избыточных естественных колебательных координат. Изучены закономерности силовых полей молекул MM'F[2]. Результаты неэмпирических расчетов сопоставлены с имеющимися в литературе эксперим. данными о строении и колебательных спектрах рассмотренных молекул. Библиография 30.

1999

F: (NaK)n

P: 1

131:303475 Electronic structure of bimetallic clusters based on alkali elements. Alonso, Julio A.;

Lopez, Maria J. Departamento de Fisica Teorica, Universidad de Valladolid Valladolid 47011, Spain

Theory At. Mol Clusters, 255-276. Edited by: Jellinek, Julius. Springer: Berlin, Germany. (English) 1999. The authors present a review with 68 refs. on the alloying effects on the energetic, structural, electronic, and optical properties of small bimetallic clusters. D. functional theory was used to obtain the

ground state electronic structure and the optical response of the clusters. The stability of mixed alkali metal clusters can be understood in terms of the electronic shell model. Electronic shell closing effects also appear in alkali clusters doped with higher valence metals, although reordering in the electronic levels occurs in some cases giving rise to different magic nos. Ab initio calcns. support this view. The influence of the geometrical structure (mixed or segregated) on the collective electronic response of bimetallic clusters was analyzed. Finally we studied cluster which may have relevance for understanding the properties of liq. ionic alloys.

1999

F: $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-H}_2\text{O}$

P: 1

132:242516 Experimental study on the equilibrium phase diagram and soluti properties of the ternary system $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-H}_2\text{O}$ at 298 K.

Zeng, Ying; Y Hui-an; Tang, Min-lin; Wang,

Li-sheng Department of Applied Chemistry, Sichuan University Chengdu 610065, Peop. Rep. China

Sichuan Lianhe Daxue Xuebao, Gongcheng Kexueban,

3(6),

135-139 (Chinese) 1999 Solubilities and physico-chem. properties (d., refractive index, viscosi and pH) of equil. solns. in the ternary system $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-H}_2\text{O}$ were stud 298 K with an isothermal method. This ternary system is a complex system double salt $\text{Na}_2\text{CO}_3.\text{cntdot}.\text{K}_2\text{CO}_3.\text{cntdot}.\text{H}_2\text{O}$ is formed. The d. and refract index of the equil. solns. were calcd.; the calcd. data fit well with the data.

C.A. 2000, 132

LiF-LiCl-NaF-NaCl-KF-KCl-MgF-MgCl₂-2001
-CaF₂-CaCl₂

memory. cb-la,
pay. paper.

135: 97987u Thermodynamic evaluation and optimization of the Li, Na, K, Mg, Ca/F, Cl reciprocal system using the modified quasi-chemical model. Chartrand, Patrice; Pelton, Arthur D. (CRCT, Ecole Polytechnique, Montreal, QC Can. H3C 3A7). *Metall. Mater. Trans. A* 2001, 32A(6), 1417-1430 (Eng), Minerals, Metals & Materials Society. A complete crit. evaluation of all available ternary reciprocal phase diagram data was performed for all condensed phases of the LiF-LiCl-NaF-NaCl-KF-KCl-MgF-MgCl₂-CaF₂-CaCl₂ system and optimized model parameters were found. The model parameters obtained for ternary reciprocal subsystems can be used to predict thermodyn. properties and phase equil. for the multicomponent reciprocal system. The modified quasi-chem. model in the quadruplet approxn. was used for the molten salt phase. This model takes into account, simultaneously, both first-nearest-neighbor (FNN) and second-nearest-neighbor (SNN) short-range-ordering (SRO) and the coupling between them. The predictions are significantly better than those obtained with previous models.

C.A. 2001, 135, N7.

NaK

2003

F: NaK, NaRb, NaCs

P: I

04.22-19Б3.9. Оценка термодинамических свойств конденсированных бинарных кластеров из атомов неодинаковых щелочных металлов / Моисеев Г. К. (45677 Челябинская обл., г. Снежинск, а/я 245, ул. Васильева, 13, tagor@onti. ch chel. su) // Изв. Челяб. науч. центра. - 2003. - N 3. - С. 26-29. - Рус.

Рассчитаны основные термохимические свойства (H[298]p, Sp[298], Hp[298]-H T и 'ДЕЛЬТА'Н плавления, C[p](T) для твердого и жидкого состояний); а так температурные зависимости приведенной энергии Гиббса для метастабильных конденсированных бинарных кластеров LiNa, LiK, LiRb, LiCs, NaK, NaRb, NaC KRb, KCs и RbCs.