

SiN_x

SiN

1925

Mulliken R.

Phys. Rev. 26, 319.

Ионизационный заряды в
полосах спектров
IV Спектр SiN

SiN

Clark

1940

Trans. Far. Soc., 36, 370

D_0

V. Взаимоотношение энергий диссоциации и равновесного меандрированного расстояния двухатомных молекул в основном состоянии.



Буден, Мундо

1954

Si(N₃)₄

Wiberg E., Michael H.
Z. Naturforsch., 1954, 9b, N^o 7,
500.

О метрировании кремния Si(N₃)₄.

x-55-4-11453.

SiN

Margrave Y.L.
Staphitanonda P.

1955

D₀

J. Ph. Ch., 59, N12, 1231

Распределение нейтронов
металлов I. теоретический
расчет термической диссоци-
ации двухатомных
нейтрон-глов.

(См. SiN) III

Si - N

ВФ - 3230 - VI

1961

Скывалин И.М.

Бели О.А.

Δ H mix

Физ. хим. основы физ.

стат., АН СССР, Учен

стат. Тр, в сб Коэф. Меховс,

1961, 395-9.

1962

5877

D_0 (SiN)

Laud B.B.

Indian J. Phys., 1962, 36, N 12,
639-649

On the relation...

M, J



1962

42M

C, W, Mo, Nb, HfB_2 , TaB_2 , TiB_2 , WB;
 ZrB_2 , NbC; HfC; Mo_2C ; TaC; TiC; WC; VC; ZrC;
 BN; HfN; SiN; TaN; TiN; ZrN; CeO_2 ; HfO_2 ; MgO;
 ZrO_2 ; ZrSiO_4 (Cp)

Neel D.S., Pears C.D.

Progr. Intern. Res. Thermodyn. Transport
 Properties, Papers Symp. Thermophys. Pro-
 perties, 2nd, Princeton, N.J., 1962,

500-11

Be

Measurement...

$(\text{Si}_6\text{N}_2)_n$

1962

9 B13. О получении нового субнитрида кремния $(\text{Si}_6\text{N}_2)_n$. H e n g g e - E. Über die Darstellung eines neuen Siliciumsubnitrides $(\text{Si}_6\text{N}_2)_n$. «Z. anorgan. und allgem. Chem.», 1962, 315, № 5-6, 298—304 (нем.; рез. англ.)

Тонкоизмельченный CaSi_2 реагирует с галогенидами NH_4 в тонкоизмельченном состоянии при нагревании с образованием $(\text{Si}_6\text{N}_2)_n$ и соответствующего галогенида Ca. Р-ция протекает при т-ре, близкой к т-ре сублимации соли NH_4 . Количественно изучена р-ция с NH_4Br как наиболее легко протекающая. Анализом и сопоставлением дебаеграмм CaBr_2 и полученного в-ва показано образование при р-ции CaBr_2 . Предложено следующее ур-ние р-ции: $3\text{CaSi}_2 + 6\text{NH}_4\text{Br} \rightarrow 3\text{CaBr}_2 + 2\text{Si}_3\text{N} + 4\text{NH}_3 + 6\text{H}_2$. В качестве возможной модели структурной единицы Si_6N_2 предложен шестичленный цикл из атомов Si (подобно циклогексану) в форме кресла, причем связи с атомами N расположены над и под плоскостью кольца.

Т. Ермакова

X. 1963. 9

К. И. Змбов Т. Л. Маргаре

1967

УАСС, 89, 2492

Масс-спектрометрические данные для

Si₂N молекулы Si₂N в газе. [Оттиск 429]

Изучена реакция $\text{Si}_2\text{N}(2) = 2\text{Si}(2) + \frac{1}{2}\text{N}_2(2)$
в интервале 1742-1846°K.

Получены:

$\Delta H^\circ_{\text{реакции } 298} = 123,5 \pm 1,0$ (по III^{ему} закону).

$\Delta H^\circ_{\text{сдл } 298}(\text{Si}) = 108,4 \pm 3,0 \frac{\text{ккал}}{\text{моль}}$ - литер. данные

Оттиск 429

см. на обороте.

$$\Delta H^{\circ} [\text{Si}_2\text{N}(2)] = 93 \pm 5 \frac{\text{ккал}}{\text{моль}}$$

образования, 298

$$\Delta H^{\circ} [\text{Si}_2\text{N}(2)] = 236 \pm 10 \frac{\text{ккал}}{\text{моль}}$$

аглому. 298

1969

 Si_2N_2

8 В11. Нитрид кремния, Si_2N_2 . Billy Michel, Goursat Paul. Le nitrure de silicium Si_2N_2 . «C. R. Acad. sci.», 1969, C269, № 16, 919—920 (франц.)

При выдерживании в течение 1000 час. в вакууме при 60° смеси $\text{Si}_2(\text{NH})_3 + 6\text{NH}_4\text{Cl}$, с послед. многократной промывкой продуктов р-ции жидк. NH_3 для удаления NH_4Cl получен белый тонкий порошок состава $\text{Si}_2\text{N}_2 \cdot \text{NH}_3$ (I). На основании ИК-спектра I установлено, что NH_3 хемисорбирован на связи Si—Si. В вакууме при 250° I медленно теряет NH_3 , через месяц образуется Si_2N_2 (II) в виде белого легкого рентгеноаморфного порошка. Следы H_2O разлагают II с образованием SiO_2 , NH_3 и H_2 . Выше 290° в вакууме II разлагается, продуктом термоллиза при 650° является SiN, который выше 1250° превращается в $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$. II взаимодействует с O_2 начиная с 175° .

И. Н. Семенов

X. 1970. 8

Si_2N_2

1970

20 В29. Исследование нитридов кремния. II. Получение и идентификация нитрида Si_2N_2 . Billy Michel, Goursat Paul. Recherches sur les nitrures de silicium. II. Preparation et définition du nitrure Si_2N_2 . «Rev. chim. minér.», 1970, 7, № 1, 193—206 (франц.; рез. англ., нем.)

получение

Нитрид Si_2N_2 (I), содержащий связь Si—Si, получен вакуумным дезаминированием $\text{Si}_2(\text{NH})_3$ в присутствии NH_4Cl при 60° . Очистка I проведена экстракцией в жидк. NH_3 ; при этом образуется $\text{Si}_2\text{N}_2 \cdot \text{NH}_3$, к-рый при термоллизе (250° , вакуум) переходит в I. Выше 290° происходит разрыв связи Si—Si в I и образуется SiN, к-рый при более высоких т-рах переходит в $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$. Сообщ. I см. РЖХим, 1962, 9В10. Резюме

X. 1970. 20

$\text{Si}_2\text{N}(\text{r})$ ΔH_f

1971

2772-IVTKB

Шувалов В.А.

Энтальпия образования и теплота
сгорания соединения $\text{Si}_2\text{N}(\text{r})$, Зс.

SiN (r.) Do

1974

2771-IVTKB

Вейс И.В.

Энергия диссоциации SiN, 4с.

SiN(g)

omnuck 9581

1972

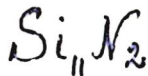
Si-N
coeg.

Pearley Y. B., Heard B.S.
CATCH tables. Silicon
Compounds Sussex,
Univ. of Sussex, Brighton,

m.g. cl-ba

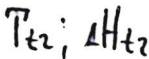


1972



1973

7 143316d Properties and bonding of undecasulfur dinitride. Shahid, M. S.; Heal, H. G.; Garcia-Fernandez, H. (Queen's Univ. Belfast, Belfast, N. Ire.). *J. Inorg. Nucl. Chem.* 1973, 35(5), 1693-6 (Eng). The mass spectrum of Si_{11}N_2 contains peaks of $\text{Si}_{11}\text{N}_2^+$, S_6N_2^+ , S_5^+ , S_3N_2^+ , S_2N^+ , and S_2^+ . The soly. curves for α - and β - Si_{11}N_2 cross at $\sim 21^\circ$, with the β -form more sol. at $< 21^\circ$. The heat for the α - β transition is 10 kJ mole^{-1} . The heat of formation of Si_{11}N_2 is 282 kJ mole^{-1} . The N atoms of Si_{11}N_2 are sp^2 hybridized with p_z electrons involved in π -bonding to neighboring S atoms.



C. A. 1973. 78 N22

Si_2N^+

1977

Rosenstock M. M. et al

T-g.
CBba J. Phys. Chem. Ref. Data,
1977, 6. Suppl. v1, p 1-384

SiN

1983

) 4 E554. Структурные превращения нитрида кремния при нагревании. Modifications structurales du nitru-
re de silicium en fonction de la temperature. Billy
Michel, Labbe Jean-Claude, Selvaraj
Alphonso, Roult Georges. «Mater. Res. Bull.»,
1983, 18, № 8, 921—934 (фр.; рез. англ.)

Методом дифракции нейтронов с использованием
времяпролетного детектора исследованы две кристал-
лич. модификации SiN в интервале т-р от комнатной
до 900°С. При повышении т-ры относит. изменения
параметров решетки и объема элементарной ячейки
подчиняются квадратичной зависимости и близки для
обеих модификаций. При нагревании существенно из-
меняется положение одного из атомов Si и одного из
атомов N. Однако это приводит к значительному изме-
нению взаимного расположения тетраэдров из атомов
N, внутри которых расположен атом Si, и обусловли-

структурн.
превращен.

ф. 1984, 18, № 4

вает возникновение механич. напряжений в кристаллах SiN. Значительное различие в величинах механич. напряжений, возникающих при нагревании, для двух фаз SiN определяет различие в реакционной способности каждой из этих фаз при повышенных т-рах и необратимость фазового перехода. Библ. 23.

В. Е. Асадчиков

Si_3N

1983

6 Б2257. Микроструктуры Si_3N , полученного химическим осаждением из паровой фазы. Hiraga Kenji. «Нихон киндзоку гаккай кайхо, Bull. Jap. Inst. Metals», 1983, 22, № 7, 635—639 (яп.)

Методами электронной микроскопии высокого разрешения исследованы микроструктуры α - и β - Si_3N , полученных хим. осаждением из паровой фазы на Пв TiN. Выявлены дефекты решетки и межзеренные границы. Л. Н. Демьянец

микрострук-
туры

х. 1984, 19, № 6

SiN

[Om. 19719]

1984

Foster S.C.,

B² Σ -A² Π

γ . Rot. Spectrosc.,
1984, 106, N2, 369 -
375.

Нитрид Si

1987

9 БЗ092. Термическая стабильность нитрида кремния. Кислый П. С., Крыль Я. А., Филипенко В. М. «Сверхтверд. матер.», 1987, № 6, 29—34

Экспериментально исследовано влияние состава и давл. газовой среды на термическую стабильность порошков нитрида кремния различного происхождения. Установлена зависимость характера диссоциации от дисперсности порошка и содержания в нем примесей. Объясняется несоответствие результатов экспериментов и данных термодинамич. расчетов, определяющих обл. парц. давл. и т-р термич. стабильности нитрида кремния.

Резюме

Кр;

Х. 1988, 19, № 9

Si₃N₄

модель
осаждения

х. 1990, № 9

1987

9 Б3121. Кинетическая модель осаждения из газовой фазы SiCl₄, NH₃ и H₂ пленок нитрида кремния. The kinetic model of chemical vapor deposition of silicon nitride films using SiCl₄, NH₃, and H₂ / Yi K.-S., Chun J. S. // Proc. 10th Int. Conf. Chem. Vapor Deposit., 1987.— Pennington (N. Y.), 1987.— С. 570—578.— Англ. Место хранения ГПНТБ СССР

Из газ. фазы SiCl₄—NH₃—H₂ с давл. 200—500 Торр при т-рах 873—1173 К на подложках из Si (легированных В, электросопротивление их 6—9 Ом·см) получены Пл осадка Si₃N₄. Кинетич. модель этой р-ции выведена из предположения о контролирующем характере р-ции на Пв и о незначительности гомог. р-ции. Скорость осаждения пропорциональна парц. давл. SiCl₄, является ф-цией квадрата парц. давл. H₂ и пропорциональна квадрату общего давл. Исследовано также влияние времени осаждения, скорости потока газ. фазы и т-ры осаждения. Данные, полученные путем вычисления по предложенной кинетич. модели, согласуются с экспериментом. Кажущаяся энергия активации осаждения Пл составила 22±0,5 ккал/моль.

В. А. Ступников

LiN⁻

(om. 32807)

1989

Peterson R.A., Woods R.C.,

Ac, Ap, J. Chem. Phys. 1989,
Do 90, N 12, 7239-7250.

Ground state spect-
roscopic and thermodyna-
mic properties of AlO^- ,

LiN^- , CP^- , BS^- , BO^- and
 CN^- from Møller-Plesset
perturbation theory

SiN

1989

3 Б1029. Истинная кривая потенциальной энергии и энергии диссоциации молекулы SiN, имеющей астрофизическое значение. True potential energy curve and dissociation energy of astrophysically significant SiN molecule / Rajamanickam N. // Acta Cien. Indica. Phys.— 1989.— 15, № 3.— С. 139—144.— Англ.
См. пред. реферат.

Кривая
потенц.
энергии,
Д.

Х. 1991, № 3

Si_3N_4

1990

18 БЗ007. Теплоемкость материалов на основе нитрида кремния / Блиндер А. В., Болгар А. С., Трофимова Ж. А., Петровский В. Я. // Конструкции и технол. получ. изделий из немет. матер.: Тез. докл. 12 Всес. конф., Обнинск, 26—28 нояб., 1990. Ч. 1.— М., 1990.— С. 88.— Рус.

В интервале т-р 150—670 К исследована теплоемкость двух образцов нитрида кремния Si_3N_4 («Штарк») и Si_3N_4 (спек-310), а также трех материалов: $\text{Si}_3\text{N}_4 + 5\% \text{Al}_2\text{O}_3 + 2,5\% \text{TiN}$ (1), $\text{Si}_3\text{N}_4 + 5,3\% \text{Al}_2\text{O}_3 + 2,7\% \text{Y}_2\text{O}_3$ (2) и $\text{Si}_3\text{N}_4 + 3,5\% \text{Al}_2\text{O}_3 + 10,5\% \text{Y}_2\text{O}_3$ (3). Показано, что теплоемкость двух нитридов в изученном интервале т-р совпадает в пределах погрешности измерений. Теплоемкость композиции (1) в средн. на 25% ниже, чем у исходного Si_3N_4 и (3), и на 20% ниже, чем у (2).

(ср)

Х. 1991, N 18

SiN

1988

3 Б1028. Истинная кривая потенциальной энергии и энергия диссоциации молекулы SiN, имеющей астрофизическое значение. True potential energy curve and dissociation energy of astrophysically significant SiN molecule / Rajamanickam N. // Acta Cien. Indica. Phys. — 1988. — 14, № 1. — С. 18—22. — Англ.

По экспериментальным значениям колебат. частот методом Ридберга — Клейна — Риса получена кривая потенциальной энергии молекулы SiN. На основе аппроксимации этой кривой трехпараметрич. модифицир. ф-цией Липпинкотта определена энергия диссоциации SiN $D_0^0 = 4,83 \pm 0,16$ эВ. Обсуждена астрофиз. роль этой молекулы. А. А. Сафонов

М. А., До

X. 1991, № 3

Li₃N

[Om. 38841]

1997

Karl A. Fingerich, R. Vis-
wanathan et al.,

(Kp, ΔH_f°) J. Chem. Phys., 1997, 106(14),
6016 - 6019.

SiN (K)

1991

120: 200703q Model for GO LCAO and polymorphism of silicon nitride. Andreeva, T. V.; Coryachev, Yu. M.; Bartnitakaya, T. S. (USSR). *Teoriya Elektron. Stroeniya i Svoistva Perekhod. Met., Splavov i Soed. AN USSR. In-t Probl. Materialoved., Kiev* 1991, 19-22 (Russ). From *Ref. Zh., Khim.* 1992, Abstr. No. 4B3219. Title only translated.

(номемор -
физм)

C.A. 1994, 120, N16

SiN

1991

117: 9760Sz Model of group orbitals-linear combination of atomic orbitals and polymorphism of silicon nitride. Andreeva, T. V.; Goryachev, Yu. M.; Bartnitskaya, T. S. (USSR). *Teoriya Elektron. Stroeniya i Svoistva Perekhod. Met., Splavov i Soed. AN USSR. In-t Probl. Materialoved., Kiev* 1991, 19-22 (Russ). From *Ref. Zh., Metall.* 1992, Abstr. No. 1E118. Title only translated.

(номер -
физ.)

C. A. 1992, 117, N 10

Si₃N₄

1991

21 Б3058. Термодинамический анализ состава конденсированных продуктов в системе Si—N—C—H / Варламов А. Г., Ширяев А. А., Григорьев Ю. М. // Изв. АН СССР. Неорган. матер.— 1991.— 27, № 6.— С. 1222—1225.— Рус.

Проведен термодинамич. анализ системы Si—C—N—H. Показана возможность получения как однофазных продуктов (Si₃N₄, SiC_к, C_к), так и совместного выделения неск. конденсированных фаз. Определены границы обл. существования конденсированных продуктов и влияние на них т-ры, соотношения исходных компонентов, общего давления. Показано, что влияние соотношения исходных компонентов удобно характеризовать атомными отношениями N/Si и H/C. Установлено, что N/Si ответственно за образование однофазного (Si₃N₄) либо двухфазного (Si₃N₄—SiC_к) конденсированных продуктов. Отношение H/C определяет возмож-

(Kp)

X. 1991; n21

ность выделения фазы конденсированного углерода (при $N/C < 600$) и сдвигает высокот-рные границы обл. существования фаз SiC_k и C_k в сторону более низких т-р. «Чистый» нитрид кремния (без соосаждения др. конденсированных продуктов) образуется при избытке азота ($N/Si > 1,5$) и низких (ниже 1100 K) т-рах. Уменьшение общ. давления сдвигает высокот-рную границу обл. выхода нитрида кремния в сторону более низких температур.

Li₃N₄

1992

18 Б3047. Применение термического анализа с постоянной скоростью (ПСТА) для синтеза нитрида кремния карботермическим восстановлением диоксида кремния. Application of constant rate thermal analysis (CRTA) to the synthesis of silicon nitride by carbothermal reduction of silica / Alcalá M. D., Real C., Criado J. M. // J. Therm. Anal.— 1992.— 38, № 3.— С. 313—319.— Англ.; рез. нем.

Методом ПСТА в сочетании с ИК-спектроскопией и РФА изучены условия синтеза Si₃N₄ (I) карботермическим восстановлением SiO₂ (II) в токе азота. Исходные образцы II и углерода обладали след. уд. ПВ: 280 и 1500 при комн. т-ре и 1 и 800 м²/г при т-ре 1400°С соотв., конц-ия отходящего СО ~ 0,53% (скорость р-ции 1,6·10⁻³ мин⁻¹). Установлено, что синтезу α-I способствует уменьшение константы скорости р-ции, увеличение парц. давл. СО.

Л. Г. Титов

(Кр)

X-1992, N 18

1995

Si₂N

124: 186819f The standard molar atomization enthalpy and the standard molar enthalpy of formation of gaseous Si₂N from high-temperature mass spectrometry. Viswanathan, R.; Schmude, R. W., Jr.; Gingerich, K. A. (Dep. Chem., Texas A & M Univ., College Station, TX 77843-3255 USA). *J. Chem. Thermodyn.* 1995, 27(12), 1303-11 (Eng). A high-temp. mass-spectrometric study of the vaporization of (silicon + boron nitride) from a boron-nitride Knudsen cell was conducted in the temp. range T = 1688 K to 1921 K. The partial pressures of Si(g), Si₂(g), N₂(g), and Si₂N(g) were detd. The dissociation reaction: Si₂N(g) = 2Si(g) + 0.5N₂(g) was evaluated by using new thermal functions for Si₂N(g) calcd. from the results of recent theor. and exptl. studies, and Δ_rH_m⁰ values: (538.0 ± 12.4) kJ·mol⁻¹ at T → 0, and (545.1 ± 12.4) kJ·mol⁻¹ at T = 298.15 K were deduced by third-law evaluation. These values, in combination with the molar dissociation enthalpy of N₂(g) yielded the molar atomization enthalpies: Δ_{at}H_m⁰(Si₂N, g) = (1008.8 ± 12.4) kJ·mol⁻¹ at T → 0, and (1017.8 ± 12.4) kJ·mol⁻¹ at T = 298.15 K, and in combination with the std. molar enthalpy of formation of Si(g) yielded: Δ_fH_m⁰(Si₂N, g) = (354.0 ± 14.8) kJ·mol⁻¹ at T → 0, and (355.6 ± 14.8) kJ·mol⁻¹ at T = 298.15 K.

(Δ_f H₂₉₈)

C. A. 1996, 124, N14

Si₃N

1997

127: 10678g A Knudsen effusion mass spectrometric study of the molecule Si₃N. Gingerich, Karl A.; Viswanathan, R.; Schmude, Richard W., Jr. (Dep. Chem., Texas AM Univ., College Station, TX 77843 USA). *J. Chem. Phys.* 1997, 106(14), 6016-6019 (Eng), American Institute of Physics. Condensed phase mixts. (Ge + Si + Si₃N₄) and (Si + Si₃N₄) were evapd. from BN Knudsen cells and the partial pressures of Si₃N(g), Si₂N(g), and Si(g) were measured with a mass spectrometer at 1770-2000 K. The thermal functions for Si₃N(g) were calcd. from theor. mol. consts., and the enthalpy change was calcd. for the dissocn. reaction: Si₃N(g) = Si₂N(g) + Si(g) detd. With the revised atomization enthalpy of Si₂N(g), $\Delta_{\text{atom}} H_m^0 = 1011 \pm 12 \text{ kJ mol}^{-1}$ at $T = 0 \text{ K}$ and $1020 \pm 12 \text{ kJ mol}^{-1}$ at $T = 298.15$, the atomization enthalpy of Si₃N(g) was derived as $1298 \pm 19 \text{ kJ mol}^{-1}$ at $T = 0 \text{ K}$ and $1312 \pm 19 \text{ kJ mol}^{-1}$ at $T = 298.15 \text{ K}$. These values in combination with the enthalpies of formation of Si(g) and N(g) yielded the enthalpies of formation $\Delta_f H_m^0$ at $T = 298.15 \text{ K}$: $352 \pm 15 \text{ kJ mol}^{-1}$ for Si₂N(g), and $511 \pm 22 \text{ kJ mol}^{-1}$ for Si₃N(g). Exptl. and theor. bond dissocn. energies were compared and discussed, indicating a strong bonding of N to Si₃.

Книга 10678г

1997

масс-спектр.

$\Delta_{\text{atom}} H_m^0$
 $\Delta_f H_m^0$

C. A. 1997, 127, N 1

SiN

1993

118: 110116e The dissociation energy of the silicon nitride (SiN) radical determined from a crossed-molecular-beam study of the silicon + nitrous oxide $\rightarrow$ [silicon nitride + nitric oxide (Si + N₂O $\rightarrow$ SiN + NO) reaction. Naulin, Christian; Costes, Michel; Moudden, Zakkaria; Ghanem, Naima; Dorthé, Gerard (Photophysique et Photochimie (Mol., Univ. Bordeaux I, 33405 Talence, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 202(5), 452-8 (Eng.). The Si(³P_J) + N₂O(X ¹Σ⁺) $\rightarrow$ SiN(X ²Σ⁺) + NO(X ²Π₋) reaction was studied by using pulsed, crossed, supersonic mol. beams. The SiN(X ²Σ⁺) product was probed by laser-induced fluorescence. The reaction exhibited a translational-energy threshold between 0.2 and 0.3 eV. Detn. of the SiN population limit just above the threshold led to a reaction endoergicity of $0.12 \leq \Delta_0 \leq 0.38$ eV, which combined with $D_0(\text{N-NO}) = 4.93 \pm 0.01$ eV gave $4.54 \leq D_0(\text{SiN}) \leq 4.82$ eV. This value is in agreement with the ab-initio result of L. A. Curtiss, et al. (1991) (4.55 eV) derived from the so-called Gaussian-2 theory. The validity of the exptl. approach is also discussed.

 $4.54 \leq D_0 \leq 4.82$
C.A. 1993, 118, N12

Si_2N

1995

1 15316. Стандартная молярная энтальпия атомизации и стандартная молярная энтальпия образования газообразного Si_2N , определенные с помощью высокотемпературной масс-спектрометрии. The standard molar atomization enthalpy and the standard molar enthalpy of formation of gaseous Si_2N from high-temperature mass spectrometry / Viswanathan R., Schmude R. W., Gingerich K. A. // J. Chem. Thermodyn. — 1995 — 27, № 12 — С. 1303—1311 — Англ.

ΔH_f

Методом кнудсеновской эффузионной масс-спектрометрии исследовано испарение смеси кремния с нитридом бора из ячейки Кнудсена, изготовленной из нитрида бора, при t -рах 1688—1921К. Определены парц. давл. Si(g) , $\text{Si}_2(\text{g})$, $\text{N}_2(\text{g})$ и $\text{Si}_2\text{N(g)}$. С использованием новых термич. ф-ций для $\text{Si}_2\text{N(g)}$ для энтальпии р-ции диссоциации $\text{Si}_2\text{N(g)} = 2\text{Si(g)} + 0,5\text{N}_2(\text{g})$ получено $\Delta_r H^0 = 545,1 \pm 12,4$ кДж/моль при $T = 298,15\text{K}$, а для энтальпии атомизации при $T = 298,15\text{K}$ получено $\Delta_a H^0(\text{Si}_2\text{N, g}) = 1017,8 \pm 12,4$ кДж/моль и для теплоты образования получено $\Delta_f H^0(\text{Si}_2\text{N, g, 298,15K}) = 355,6 \pm 14,8$ кДж/моль.

В. Ф. Байбуз

X. 1997, 41

SiN

2000

F: SiN (20)

P: 1

03.03-19Б3.5. Энергии диссоциации астрофизически важных [молекул] MgO, SO и TiO согласно спектроскопическим данным. Dissociation energies of astrophysically important MgO, SO, SiN and TiO from spectroscopic data / R. R., Ahammed Y. Nazeer, Gopal K. Rama, Azeem P. Abdul, Rao T. V. R. // Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. - 2000. - 66, N 5. - С. 501-508. Англ.

Методом Ридберга-Клейна-Риса рассчитаны кривые потенциальной энергии астрофизически значимых молекул MgO, SO, SiN и TiO. С использованием пятипараметрической функции Хулбурта-Хиршфельда получены энергии диссоциации $D[0] = 3,674' \pm 0,075$; $5,321' \pm 0,113$; $4,492' \pm 0,103$ и $6,94' \pm 0,16$ эВ соответственно, согласующиеся с экспериментом.

Si₃N₄

F: "гамма"-Si₃N₄ (T_{t2} при высоких давл.)
P: 1

04.14-19БЗ.95. Пост-шпинельные фазы нитрида кремния. Post-spinel phases of silicon nitride / Kroll P., Von Appen J. // Phys. status solidi. B. - 200 226, N 1. - С. R6-R7. - Англ.

С использованием модели функционала плотности рассчитали параметры структур нескольких гипотетич. фаз-шпинелей - модификаций высокого давления (их называют пост-шпинельными модификациями; недавно была синтезирована одна таких фаз - 'гамма'-Si[3]N[4]). Высказано предположение, что при давлении свыше 160 ГПа может появляться фаза 'дельта'-Si[3]N[4], решетка которой содержит октаэдры и призмы SiN[6]. Библ. 8.