

Li N_x



3022

1896

Guntz

14. Compt. rend. 123, 995 (1896)

$\text{Li}_3\text{N}; \text{Kp}; \Delta H_f^\circ;$

Circ. 500

μ_0°



$\frac{\text{eet} \rho \cdot \kappa}{\sqrt{\text{TP}}}$

V-3965

1932

Нитриды Li, Be, Mg, Al
(AH₄)

Neumann B., Kröger C., Haebler H.,

Z. anorgan. und allgem. Chem.

1932, 204, 81-96

● M, Ke, Au.

ссылка ср-к

1938

V 960

Batch B.

Sci. Papers Inst. Phys. Chem. Res. (Tokio),
1938, 35, 18-90

Zn_3Li_2 , Zn_3Li_2 , Li, Li_3H (Cp)

10



net 6 5-ke

11

3109

1939

Sato

17. Sci. Papers Inst. Phys. Chem.
Research (Tokyo) 35, 158 (1939)

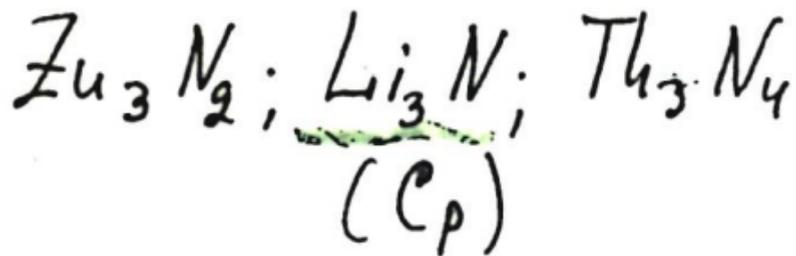
$Li_3N; \kappa\rho; C\rho^0;$

лрфб ρ:κ

Circ. 500

Be "0"





Vigi¹⁹³⁹

Sato S.-i

Sci. Papers Inst. Phys. Chem. Research
[Tokyo], 1939, 35, 182-190.

CA, 1939, 4118^b

5

~~273~~

VI-1824

1939

$Cp(Zi_3N)$

Sato S.

Sci. Papers Inst. Phys. Chem.
Research (Tokyo), 1939, 35, 385-98

Be



VIII-4718

1940

Li₃N; Th₃N₄ (Hr-Ho)

Sato S.,

Bull. Inst. Phys. Chem. Res. Tokyo, 1940, 19, 112.

The specific heats of thorium nitride,
lithium nitride, and zinc nitride.



50

Kenny No 584

К 1784

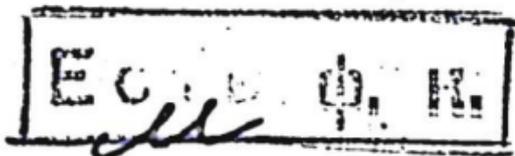
1953

SiN₆, diN₃ (ΔHf)

Архив С.М., Прокофьева Е.А.

Сб. статей по общей химии АН СССР,

1953, 1, 9-18



с. А., 1954, 1252ae

BP-313-III

~~91543~~

1956

SrN₆, BaN₆, CaN₆, LiN₃, NaN₃, KN₃,
RbN₃, CsN₃, PbN₃, TeN₃, AgN₃, CuN₆, Hg₂N₆
(ΔH° , ΔS° , ΔG° , H_{sol}.)

Gray P., Waddington T.C.,

Proc. Roy. Soc. A, 1956, 235, 106-109

M. B. Tarr

lewis op k.

Горлан-Бран

1957

Л. № 3

Hofman-Brand Nielsen
Acta chem. scand. 1957

11, no 3, 581-582

Получение азидо мур

получение

X-58-1-662

1957

Маггюноу.

Liz. N

Масдуруу 6.

Дун. химия, 1957, 2, №7-8,
527-586

Исследования нитридов азот-
тиицидов и смесей.

Доказательство существования
иона N_3^- - изучение вопроса о
существовании иона N_2^- .

X-58-10-31966

Лит - Ли

Бельмаков К.А.

1959.

Бедоров Т.И., Сивенко А.А.

Узб. Кем. уред. завесису

Улем. мотавису оми

1959, № 52-53

Диаррания назоусис

сечени мумис - мум

пуг мумис

X-60 - 7-25695

Новосей, Новотна, 1959.

Lizy

Лизка. Новотна, Новотна
м., Лизка V.

Collect Czechosl. Chem Commun,
1959, 24, 44, 1256-1259.

наука
св-ва

Наука и св-ва
ряда митид

X-60-2-4284 ●

Li_3N
(TR)

(m. gun. et. bur)

288,15 - 1200

na name no al'ropuoi 1960

Douglas T. B. Buckette
Preliminary Report
on the Thermodynamic
Properties of Selected
Light-Element Compounds
NBS Report 6928

Washington 1960

Li₃N

1962

4Б/62. Образование нитрида лития. McFarlane E. E., Tompkins F. C. Nitridation of lithium. «Trans. Faraday Soc.», 1962, 58, № 5, 997—1007 (англ.)

Исследовалась кинетика образования Li₃N (I) в процессе взаимодействия азота с твердым литием при т-рах от 0°С до 160°С и давл. от 2 до 60 см рт. ст. и с жидким литием при т-рах 499—638°К и давл. от 10,4 до 44,4 см рт. ст. С твердым литием р-ция ускоряется по мере образования I вплоть до достижения крит. толщины слоя I, после чего скорость р-ции определяется только процессом проникновения азота через слой пористого I. Физ. невоспроизводимость этого слоя приводила к относительно плохой воспроизводимости результатов исследования. Скорость р-ции с жидким литием не зависела от давления и уменьшалась со временем по параболич. кривой. Энергия активации р-ции с жидким литием равна 5,4 ккал/моль. Предполагается, что в этом случае скорость р-ции ограничивается скоростью проникновения через слой I.

Б. Каплан

Получение

x-1963-4

Li_3N

1964

12 В27. О взаимодействии нитрида лития с галогенидами лития. Sattlegger H., Hahn H. Über Versuche zur Umsetzung von Li_3N mit Lithiumhalogeniden. «Naturwissenschaften», 1964, 51, № 22, 534—535 (нем.)

Изучено взаимодействие Li_3N с LiX при нагревании. Продукты взаимодействия идентифицировали рентгенографически (приведены X, полученная фаза): F, —; Cl, $\text{Li}_9\text{N}_2\text{Cl}_3$ (решетка типа антифлюорита, a 5,407 Å, со статистич. распределением N и Cl на месте анионов) и $\text{Li}_{11}\text{N}_3\text{Cl}_2$; Br, куб. Li_6NBr_3 (I), a 8,895 Å, ф. гр. $Fm\bar{3}m$ (в исходной смеси 75 мол.% LiBr); J, куб. $\text{Li}_7\text{N}_2\text{J}$, a 10,367 Å, ф. гр. $Fd\bar{3}m$ (в исходной смеси 33 мол.% LiJ) и куб. Li_5NJ_2 (II), a 9,540 Å, ф. гр. $F\bar{4}3m$ (в исходной смеси 66 мол.% LiJ). I и II обладали сходным строением. В случае слегка влажного LiJ получали соединения состава $\text{Li}:\text{NH}_3:\text{J}=1:1:2$ с куб. объемноцентр. решеткой, a 4,280 Å. Нагревание смеси LiJ и NH_4J в атмосфере N_2 при 300° приводило к соединению состава $\text{Li}_{0,5}(\text{NH}_4)_{0,5}\text{J}$ с очень малой областью гомогенности, на дебаеграмме которого отсутствовали линии сверхструктуры.

А. Каменев

2-1965-12

Li_3N (sol.)

JANAF

1965

T.P.

298 - 2000°K

Li₃N

8 В7. Литий нитрид. Куголин С. А., Вулиха А. И.
В сб. «Методы получения хим. реактивов и препаратов».
Вып. 16. М., 1967, 52—53

Нитрид лития получают по р-ции металлич. Li (в форме пластинок толщиной 3—5 мм) с азотом (давл. 5—8 атм), проводимой при т-ре 160—175°. Пластинки в р-ционной емкости располагают вертикально с зазором между ними ~1 мм. Продолжительность синтеза 4—6 часов, выход 98—99%. Содержание азота в продукте не <38%, Fe — не >0,02%; отношение Li:N=3,0±0,1.
С. И. Бакум

X. 1968.8

1968

 LiN_3 NaN_3 $\text{Sr}(\text{N}_3)_2$ T_{h2}

+2

x. 1969. 4

4 Б486. Кристаллическая структура азидов лития, натрия и стронция, Pringle G. E., Noakes D. E. The crystal structures of lithium, sodium and strontium azides. «Acta crystallogr.», 1968, В 24, № 2, 262—269 (англ.)

Проведено рентгенографич. исследование (методы порошка и Вейссенберга) кристаллов LiN_3 (I), $\alpha\text{-NaN}_3$ (II), $\beta\text{-NaN}_3$ (III) и $\text{Sr}(\text{N}_3)_2$ (IV). Изоструктурные I и II характеризуются ф. гр. $C2/m$ и параметрами решетки a 5,627, b 3,319, c 4,979 Å, β 107,4° (I) и 6,211; 3,658; 5,323 Å; 108,43° (II). Кристаллы III ромбоэдрич. (a 3,646, c 15,213 Å, ф. гр. $R\bar{3}m$) и IV — ромбич.



(a 11,82, b 11,47, c 6,08 Å, ф. гр. $Fddd$). Для всех структур определены координаты атомов, уточненные до $R(hkl) = 0,12; 0,08; 0,125$ и $0,095$, соотв. Длина связей N—N в линейных азидных группах в порядке перечисления 1,162; 1,167; 1,173 и 1,163 Å. Расстояния катион—N (концевой), соотв., 1,550—1,659; 1,722—1,829; 1,720—1,823 и 1,548—1,635 Å. Все межатомные расстояния обсуждаются на основе предположения об эллиптической форме концевых атомов N. Фазовое превращение I→II ($\sim 18^\circ$) относится к переходам II рода. А. А. Воронков

A-1420

1968

Li_3N , Na_3N , AlN , B_2N_2 , Mg_3N_2 , TiN ,
 Zn_3N_2 , AlN , Li_3N_4 и др.

(физ. св-ва, обзор)

Самсонов Г. В.,

Физик. химия нитридов,

1968, 9-20

М, Б, В, Ю

СА, 1969, 7, №2, 53739 ✓

1969

9260h. Reaction of lithium nitride with nitric oxide. Zecchini, Pierre; Devin, Claude (Lab. Chim., Besancon, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. C* 1969, 268(8), 706-9 (Fr). Studies by ir spectroscopy and colorimetric anal. of the reactions between NO and Li_3N at 320° indicate the following mechanism: $2\text{Li}_3\text{N} + 3\text{NO} \rightarrow 3\text{Li}_2\text{O} + 2.5\text{N}_2$; $\text{Li}_2\text{O} + \text{NO} \rightarrow \text{Li}_2\text{O}_2 + 0.5\text{N}_2$; $\text{Li}_2\text{O}_2 + 2\text{NO} \rightarrow 2\text{LiNO}_2$.
J. S. Cook

 ~~Li_2O~~ Li_3N Hexамин
перекись

C.A. 1969. 71. 2

Li_3N^-
(Crystal)

100-2200 °K

(1966)

J.H.H.H.
II 1979

1979

File No

1973

Barin J, et al.

Vol. 1 p. 421

298-2000



(Call. Alg F-1)

Нитриды щел. метал.

1973

8 Б568. Энергии решетки нитратов некоторых одно-
валентных металлов. Fermor J. H., Kjekshus A.
Lattice energies of some univalent nitrate phases. «Acta
chem. scand.», 1973, 27, № 6, 1963—1970 (англ.)

Для нитратов Li, Na, K, Rb и Ag, имеющих ромбо-
эдрич. структуру типа кальцита, вычислены электроста-
тич. энергии решетки (ЭР) с учетом отталкивания, обу-
словленного покрытием электронных оболочек соседних
ионов. ЭР одновалентных нитратов составляет 150—200

ккал/моль и коррелирует с радиусом катиона, однако
для AgNO_3 она аномально высока, что связано с боль-
шим значением поляризуемости иона Ag^+ . Отмечено, что
с повышением t -ры на сотни градусов ЭР возрастает
(на несколько процентов), что удается объяснить иска-
жением решетки по сравнению с идеальной структурой
типа кальцита. Это возрастание ЭР, по мнению авторов,
может служить мерой искажения структуры.

С. Ш. Шильштейн

Х. 1974 № 8

Na N_3 , Li N_3 (Tt_2) $\times 80013$ 1973

Iqbal Zafar

J. Chem. Phys., 1973, 59, N4, 1769-1774 (auth)

Temperature dependence of Raman-

active phonons and nature of the
phase transition on Lithium and
sodium azide.

PHX 2001, 1974
45731

5 (9) 111

LiN₃

1973

24 Б1015. Термическое разложение азидов лития. Prout E. G., Liddiard V. C. The thermal decomposition of lithium azide. «J. Inorg. and Nucl. Chem.», 1973, 35, № 7, 2183—2193 (англ.)

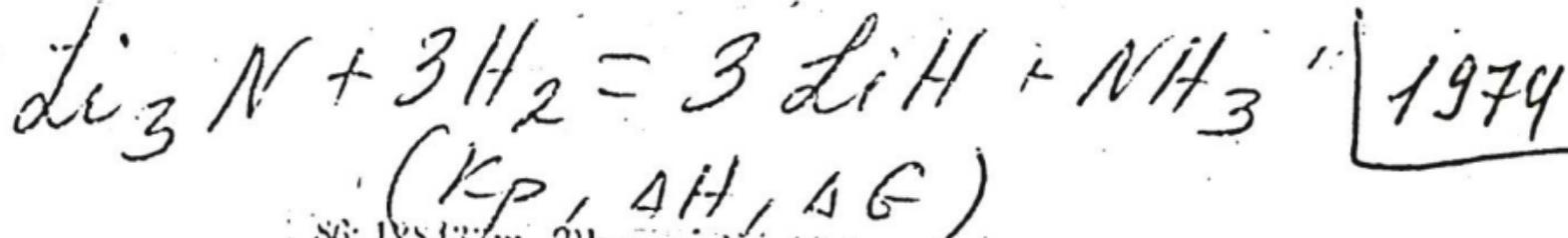
(Т_д)
термич.
разлож.

В т-рном интервале 175—220° изучено термич. разложение LiN₃ (I). Безводн. I получен в виде белого порошка нейтрализацией конц. р-ра LiOH небольшим избытком 3%-ного р-ра NH₃ с послед. упариванием при 40° и дегидратацией сухого остатка над P₂O₅ в течение 36 часов. NH₃ в свою очередь получена ионообм. методом с использованием в кач-ве реактивов H₂O марки «для определения электропроводности» и NaN₃. Все эксперименты по получению I, а также изучению его термич. разложения проведены при красном свете в сухом боксе в атмосфере N₂. Изучено влияние различных факторов (измельчение, давление прессования, т-ра отжига, УФ облучения и присутствия паров H₂O) на кинетику термич. разложения I. Все полученные результаты представлены графически в координатах давл. разложения — время. Хорошая воспроизводимость результатов достигнута получением прессованием порошкообразного I под давл. ~16—70 кг/см², причем увеличение давл. в указанном интервале не сильно влияет на изменение скорости термич. разложения (СТР) I. Найдено, что присутствие паров H₂O (17 мм), находя-

Х. 1973
N 24

щихся в реакционном пространстве до начала нагревания, не влияет на СТР, тогда как впуск паров H_2O в процессе нагревания уменьшает СТР за счет повторения индукционного периода. Предварительное облучение УФ-светом ($\lambda=2537 \text{ \AA}$) существенно увеличивает СТР I. Найдено, что акселерац. участок кривой зависимости давл. разложения от времени может быть описан ур-нием Авраами—Ерофеева (Avrami M. J. chem. Phys., 1941, 9, 177; Ерофеев Б. В. Докл. АН СССР 1946, 52, 511), а участок кривой стадии разложения — ур-нием сжатия сферы. Эти ур-ния имеют соотв. вид: $[-\lg(1-\alpha_1)^{1/3}] = k_1 + c_1$ и $1-(1-\alpha_2)^{1/3} = k_2$, где α — доля разложения, причем $0,02 < \alpha < 0,58$ и $0,05 < \alpha < 0,95$, k_1 — константа скорости стадии акселерации, k_2 — константа скорости стадии разложения, t — время. Для брикетированных образцов ($t=48$ мин.) k_1 и k_2 равны $5,43 \cdot 10^{-3}$ и $4,18 \cdot 10^{-3}$ мин. $^{-1}$, а для порошкообразных образцов ($t=23$ мин.) $1,59 \cdot 10^{-2}$ и $1,19 \cdot 10^{-2}$ мин. $^{-1}$ соотв. Значения энергии активации разложения для стадий индукции, акселерации и разложения равны

21,0; 28 и 29 ккал/моль соотв. Выявлена существенная роль атомов лития, образующихся по р-ции: $2Li \rightarrow 2Li^+ + 3N_2$, на механизм и кинетику разложения. На основании эксперим. и лит. данных по термич. разложению азидов др. металлов, приведено теоретич. объяснение механизма термич. разложения. С. С. Плетин



86: 128433m Thermodynamics of synthesis of ammonia through a lithium nitride-hydride system. Kondrat'ev, A. V.; Beglov, B. M.; Rylov, A. A. (USSR). *Deposited Doc.* 1974. VINITI 2652 74, 9 pp. (Russ). Avail. B.L.D. The equil. const., heat, and free energy (ΔG) for $\text{Li}_3\text{N} + 3\text{H}_2 = 3\text{LiH} + \text{NH}_3$ and $\text{LiH} + 1/3\text{N}_2 = 1/3\text{Li}_3\text{N} + 1/3\text{NH}_3$ reactions of interest in NH_3 synthesis were calcd. The values of ΔG for the 1st reaction are neg. whereas those for the 2nd reaction are slightly pos.

BOP 8838-X

C. A. 1977. 86 N18

ВФР 8838-X

1974

Li₃N

6 Б985. Термодинамика синтеза аммиака через нитридо-гидридную систему лития. Кондратьев А. В., Беглов Б. М., Рылов А. А. (Редколлегия «Узб. хим. ж.» АН УзССР). Ташкент, 1974. 8 с., ил., библиогр. 9 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 10 окт. 1974 г., № 2652—74 Деп.).

(ΔH; ΔG)

Проведен термодинамич. анализ синтеза аммиака через нитридо-гидридную систему лития. С использованием лит. и оценочных данных рассчитаны термодинамич. характеристики р-ций $Li_3N + 3H_2 = 3LiH + NH_3$ (1) и $LiH + 1/3N_2 = 1/3Li_3N + 1/3NH_3$ (2) в интервале т-р: 298—778 К. Для р-ции (1): $\Delta H_T^\circ = -32,54 + 9,4 \cdot 10^{-3}T - 6,7 \cdot 10^{-6}T^2 + 8,27 \cdot 10^2T^{-1}$ и $\Delta G_T^\circ = -32,54 - 9,4 \cdot 10^{-3}T \ln T + 6,7 \cdot 10^{-6}T^2 + 4,13 \cdot 10^2T^{-1} + 0,099T$; для р-ции (2): $\Delta H_T^\circ = 4,32 - 6,8 \cdot 10^{-3}T + 3,66 \cdot 10^{-6}T^2 - 2,73 \cdot 10^2T^{-1}$ и $\Delta G_T^\circ = 4,32 + 6,8 \cdot 10^{-3}T \ln T - 3,65 \cdot 10^{-6}T^2 - 1,18 \cdot 10^2T^{-1} - 4,07 \cdot 10^{-2}T$ ккал/моль. В изученном т-рном интервале образование NH_3 термодинамически вероятно только по р-ции (1).

А. Гузей

ж. 1975. №6

Li_2UO_4 , K_2UO_4 , Rb_2UO_4 , $\text{Cs}_2\text{U}_2\text{O}_7$, 1975
 $\text{Cs}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$, Cs_2CrO_4 , Li_3N , Li_2O , $\text{ThSi}_{10}\text{O}_{29}$, MoCo_5
 $\text{MoCo}_{0.651}$, U_3Si , US_2 (OH₂)

O'Hare P.A.G., Ader M., Hubbard W.M.,
Johnson G.K., Settle J.L.
Thermodyn. Nucl. Mater. 1974. Proc. Symp.
Vienna, 1974. Vol. 2. Vienna, 1975, 439-452 Discuss 452-453
Calorimetric studies on actinide compounds and materials
of interest in reactor technology.
P.H. Kusun, 1976

4593B

M ⊕

Li №3

Carling Robert W. 1975

Abstr. Int B 1976, 36(10)
5056.

(см азуды узн. мет.)

Liz N

ommunic 4204

1975

O'Hare P.A.B.
etal.

(ΔH_f° ₂₉₈)

Thermal Anal. Mater
1974, Proc. Symp. Vienna
Sept. 1975, Vol 2, 439-52

(see Liz 404, 1)

Li_3N (cr)

* 3-8238

1975

116974t Lithium nitride. Standard enthalpy of formation by solution calorimetry. O'Hare, P. A. G.; Johnson, Gerald K. (Chem. Eng. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Thermodyn.* 1975, 7(1), 13-20 (Eng). The enthalpies of reaction of Li_3N [26134-62-3] with H_2O [7732-18-5] and with $\text{HCl}(\text{aq})$ [7647-01-0] are $-(581.62 \pm 1.42)$ kJ mole^{-1} $-(803.50 \pm 1.26)$ kJ mole^{-1} , resp. Enthalpies of soln. of LiCl [7447-41-8] and NH_4Cl [12125-02-9] were also measured. Combination of the measured results with auxiliary thermochem. data from the literature yielded values of $-(165.14 \pm 1.55)$ kJ mole^{-1} and $-(164.77 \pm 1.51)$ kJ mole^{-1} , resp., for the std. enthalpy of formation, $\Delta H_f^\circ(\text{Li}_3\text{N}, \text{cryst.}, 298.15^\circ\text{K})$. A wtd. mean value; $-(164.93 \pm 1.09)$ kJ mole^{-1} is recommended for $\Delta H_f^\circ(\text{Li}_3\text{N}, \text{cryst.}, 298.15^\circ\text{K})$. This result differs by about 8 kcal mole^{-1} from previous detns.

$\Delta H_f^\circ 298$

8768-J-69

C.A. 1975, 82 N 18

№ 8238

1975

Li₃N

ΔH_f

8748
89-8-8748

ж. 1975. № 12

12 B770. Определение стандартной энтальпии образования нитрида лития (Li₃N) с помощью реакционной калориметрии. O'Hare P. A. G., Johnson Gerald K. Lithium nitride (Li₃N): standard enthalpy of formation by solution calorimetry. «J. Chem. Thermodyn.», 1975, 7, № 1, 13—20 (англ.)

Калориметрически при 25° измерены энтальпии р-рения Li₃N (I), NH₄Cl (II) и LiCl (III) в 0,1 М р-ре соляной кислоты —192,04 ± 0,30; 3,672 ± 0,02 и —8,635 ± 0,008 ккал/моль соотв. и в 0,1 М р-ре гидроксида лития —139,01 ± 0,34; 2,572 ± 0,014 и —8,632 ± 0,017 ккал/моль соотв. С использованием лит. данных рассчитана станд. энтальпия образования I при 298 К, равная —39,38 ± 0,36 ккал/моль (по к-тному циклу) и —39,47 ± 0,37 ккал/моль (по щел. циклу). Окончательно рекомендовано средневзвешенное значение —39,42 ± 0,26 ккал/моль. Рассчитана станд. энтропия и энергия Гиббса образования I при 298 К ΔS° = —28,88 ± 0,18 э. е.; ΔG° = —30,81 ± 0,27 ккал/моль.

П. М. Чукуров

803-10101

1975

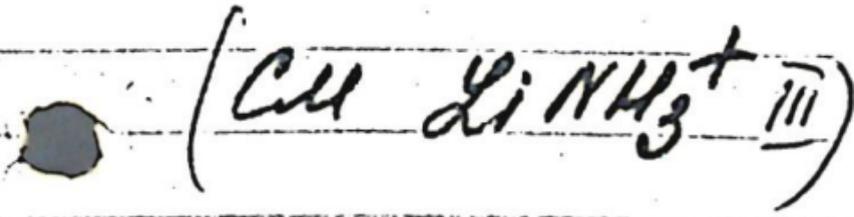
Lig N

Hinckeliff Alan et al

Δ Hf
u

Theor. Chim. Acta, 1975,
39, n1, 17-24

Sl. enpoe
Hill



X. 1976. N2

Li₃N

ВФ-9380-Р

1975

9 Б896. Растворимость азота в жидком литии и термическое разложение твердого Li_3N . Yonco R. M., Veleckis E., Maroni V. A. Solubility of nitrogen in liquid lithium and thermal decomposition of solid Li_3N . «J. Nucl. Mater.», 1975, 57, № 3, 317—324 (англ.; рез. франц., нем.)

В интервале $195-552^\circ$ измерена р-римость азота в жидк. литии. До 450° она представлена ур-нием $\lg S = 3,323 - 2107/T$, где S — р-римость в мол.% Li_3N и T — абс. т-ра. Выше 450° р-ры оказались не насыщены азотом. Рассчитана кажущаяся парц. энтальпия р-рения Li_3N (I) в жидк. литии, равная $9,6 \pm 0,3$ ккал/моль. Определена эвтектич. т-ра в системе Li—I, равная $180,3^\circ$, отвечающая $\sim 0,05$ мол.% I. Измерены равновес-

($\Delta G_f, \Delta H_f; T_m$)

Х. 1976, № 9

ные давл. азота над I в интервале $660-778^\circ$ и т-ра плавления I, составившая $813 \pm 1^\circ$. С использованием величин р-римости I в жидк. литии и ур-ний Маргулеса и Гиббса — Дюгема рассчитаны коэф. активности I и Li в р-ре и определена т-рная зависимость константы равновесия процесса $1/2 N_2$ (газ.) + 3Li (р-р) = I (тв.) $\ln K$ ($\text{атм}^{-0,5}$) = $-16,73 \pm 19670/T$ и т-рная зависимость энергии Гиббса образования тв. I $\Delta G^0 = 33,2 \cdot 10^{-3} T - 39,1$ ккал/моль. Рассчитаны средн. энтальпия и энтропия образования I в указанном т-рном интервале, равные $-39,1$ ккал/моль и $-39,2$ э. е. соответственно.

П. М. Чукуров

Li₃N

B9-9380-X

1975

(Im)

84:941m Solubility of nitrogen in liquid lithium and thermal decomposition of solid lithium nitride. Yonco, R. M.; Veleckis, E.; Maroni, V. A. (Chem. Eng. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Nucl. Mater.* 1975, 57(3), 317-24 (Eng). The soly. (S) of N in liq. Li was detd. at 195-441°, over solid Li₃N. $\log S = 3.373 - 2107 T^{-1}$ where S is mole % Li₃N. The std. free energy of formation of solid Li₃N is $(33.2 \times 10^{-3} T - 39.1)$ kcal/mole. The system Li-Li₃N has a simple eutectic diagram with the eutectic point at ~0.05 mole % Li₃N and 180.3°. The m.p. of Li₃N is $813 \pm 1^\circ$. Cold-trapping Li at a temp. just above its m.p. would not reduce the N level in the Li to much below 1000 ppm. Maintenance of N level <1 ppm is likely to require either solid gettering substances or a liq. extn. process. In processes where solid gettering materials are used to absorb ³H from liq. Li, the formation of nitride on the getter surfaces would tend to decrease ³H sorption rates, reducing the effectiveness of the getter.

J. D. Hepworth

C.A. 1976 84 N2

60309.8765
Ch, TC

44336GR

Li₃N

(АНГ)
(AS)
(AS)

1975

* 4-11853

К р. N 60309.8701
Yonco Robert M.

Solubility and thermal decomposition of
Li₃N in liquid lithium.

"Trans. Amer. Nucl. Soc.", 1975, 22, 159-160
(АНГЛ.)

0578

551 551

570

ВИНИТИ

BX - 1641

1976

CaCa , LiCa , Li_3N (4+6)

Bonomi A., Madate M., Genta C.,

Proc. Int. Symp. Molten Salts 1976,
78-92.

Galvanic cell studies on ionic
carbides and...

C.A. 1978, 89, N14, 118706a

M (9)

$Li^+ - N_2$

1976

17 Б75 К. К анализу взаимодействия иона лития с молекулой азота. Кругляк Ю. А., Бугрий Г. В., Шустер П., Бейер А. (Ин-т теор. физ. АН УССР. Препринт ИТФ-75-127Р). Киев, 1975. 36 с., ил. 12 к. — На ротаприкте (рез. англ.)

Кв. мех.
расчет

Проведены неэмпирич. расчеты системы $Li^+ - N_2$ в линейной и перпендикулярной конформациях с почти хартри-фоковской точностью. В отличие от результатов в приближении ППДП/2 линейная конформация найдена более устойчивой, чем перпендикулярная. Проанализирована асимптотика потенциальных кривых в мультитипольном приближении. Оценены вклады кулоновского, поляризац., обменного и «делокализац.» взаимодействий в энергию связи. Обсуждена природа связи в рассмотренной системе. Автореферат

ж. 1976 № 17

Li₃N

1976

RG: 111692x Solution behavior of hydrogen isotopes and other non-metallic elements in liquid lithium. Maroni, V. A.; Calawa, W. F.; Velecky, J.; Young, R. M. (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *Report*, 1976, CONF 760503 5, 10 pp. (Eng.). Avail. NTIS. From *ORNL Energy Res. Abstr.* 1976, 1012, Abstr. No. 26208. Results of experimental studies to measure selected thermodynamic properties for systems of Li with non-metallic elements are reported. Investigations of the Li-H, Li-D, and Li-T systems led to the elucidation of the dilute soln. behavior and the H/D/T isotope effects. In the case of the Li-H and Li-D systems, the principal features of the respective phase diagrams are delineated. The solubility of Li-D in liquid Li was measured $\geq 200^\circ$. The solubility of Li₃N in liquid Li and the thermal decomposition of Li₃N were also studied. From these data, the free energy of formation of Li₃N and the Sieverts const. for dissolution of N in Li were detd. Based on studies of the distribution of non-metallic elements between liquid Li and selected molten salts, it appears that molten salt extraction offers promise as a means of removing these impurity elements (e.g., H, D, T, O, N, C) from liquid Li.

AGF

C.A. 1977, 86 N16

Li₃N

1976

6 Б419. Повторное определение структуры нитрида лития. Rabenau A., Schulz Heinz. Re-evaluation of the lithium nitride structure. «J. Less-Common Metals», 1976, 50, № 1, 155—159 (англ.)

кристалл
структ

Ввиду имеющихся в лит-ре противоречивых данных по симметрии и структуре Li₃N (I) осуществлено повторное рентгенографич. определение (дифрактометр, 132 отражения, МНК, анизотропное приближение, R = 0,025) структуры кристаллов I, полученных нагреванием жидк. Li в токе N₂ при т-рах 560—690°. Параметры гексагон. решетки: a 3,648, c 3,875 Å, ρ(изм.) 1,29, ρ(выч.) 1,295, Z=1, ф. гр. P6/mmm. Подтверждена ранее предложенная модель структуры I (E. Zinte, G. Brauer, Z. Electrochem, 1935, 41, 102) с координацией атома N восемью атомами Li в виде гексагон. бипирамиды (Li—N осевые 1,939, экваториальные 2,130 Å). Хим. связь в структуре преимущественно ионного характера. Структура I может быть представлена как слоистая, построенная из слоев состава Li₂N, проходящих перпендикулярно оси c и связанных между собой одиночными атомами Li, расположенными между слоями.

С. В. Соболева

X. 1977 № 6

А-3737

1977

МN₃ (ΔNзолн.)
М-цел. металл.

Цветкова Н.Н., Карпенко Г.В., Колто-
рацкий Г.М., Звердовский Б.А.,
Крауклис Г.;

Депонир. рук. 1977, ВИНТИ 3433-77,
88-91. МN₃ (М-цел. металл.)

Тр. Моск. иссл. С.А. 1979, 90, N14, 110903Л

М, В (Ф)

Li 3 W (78)

1978

YANAF

M.g. cb-69

0 - 1300

Dec. 31, 1960

Sept - 30, 1966

March 31, 1978



Li_3N

89-X-1089

1978

✓ 6 Б825. Нитрид лития (Li_3N): теплоемкость от 5 до 350 К и термохимические свойства до 1086 К. Osborne Dargrell W., Flotow Howard E. Lithium nitride (Li_3N): heat capacity from 5 to 350 K and thermochemical properties to 1086 K. «J. Chem. Thermodyn.», 1978, 10, № 7, 675—682 (англ.)

В интервале т-р 5,70—346,52 К в адиабатич. калориметре измерена теплоемкость Li_3N (I). С использованием лит. данных до 773 рассчитана т-рная зависимость C_p от 350 К до т. пл. 1086 К: C_p дж/моль·град = $74,127 + 0,10448(T - 273,15) - 1,7294 \cdot 10^{-5}(T - 273,15)^2$. Рассчитаны и табулированы термодинамич. функции I во всем т-рном интервале. Для 298,15 К получено $C_p^\circ = 75,25 \pm 0,15$, $S^\circ = 62,59 \pm 0,13$, $-(G_T^\circ - H_0^\circ)/T = 24,99 \pm 0,05$ дж/моль·град, $H_T - H_0 = 11213 \pm 22$ дж/моль, ΔH° (обр., тв. I) = $-164,56 \pm 1,09$ кдж/моль, ΔS° (обр., тв. I) = $-120,46 \pm 0,54$ дж/моль·град. А. Б. Кисилевский

$C_p, S, H_T - H_0,$
 $G_T, \Delta H_f, \Delta S_f$

№ 1979, № 6

Li₃N

BX-1659

1978

89: 118775x Lithium nitride (Li₃N): heat capacity from 5 to 350 K and thermochemical properties to 1086 K. Osborne, Darrell W.; Flotow, Howard E. (Chem. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Thermodyn.* 1978, 10(7), 675-82 (Eng). The heat capacity was detd. at 5-350 K. The following results were obtained for 298.15K: C_p° 75.25 ± 0.15, S° 62.59 ± 0.13 J/K-mol, $(H^{\circ}(T)-H^{\circ}(0))$ 11,213 ± 22 J/mol, and $(G^{\circ}(T)-H^{\circ}(0))/T$ -24.99 ± 0.05 J/K-mol. Recommended values of the std. entropy, enthalpy, and Gibbs energy of formation are -120.46 ± 0.54 J/K-mol, -164.56 ± 1.09, and -128.64 ± 1.10 kJ/mol, resp; tabular values of the functions are given at selected temps. up to the m.p., 1086 K.

$C_p^{\circ}, S^{\circ}, H^{\circ} - H^{\circ}_0$
 $-G^{\circ} - H^{\circ}_0 / T, T_m$



C.A. 1978, 89, N14

Li_3N

номер 7013

1978

Schulz H. et al.

Acta Crystallogr; 1978,
A34, 999-1005

Is there an N^{3-} Ion in the
Crystal Structure of the ...

Li₃N

1979

4 Б544. Li₃N — перспективный литиевый ионный проводник. Alprell U. Li₃N: a promising Li ionic conductor. «J. Solid State Chem.», 1979, 29, № 3, 379—392 (англ.)

(Т_{ин})

Обзор. Отмечено, что электрохим. ячейки на основе ионной проводимости по литию дают возможность получения высокого напряжения и большой энергии на единицу веса, поскольку литий — легкий и высоко электроположит. металл С этих позиций Li₃N представляется одним из лучших литиевых тв. электролитов. Его преимуществами является возможность простого получения чистых монокристаллов, стабильность во влажной атмосфере благодаря образованию защитного поверхностного слоя, устойчивость в контакте с литием вплоть до т. пл. 813°, относительно высокая ионная проводимость порядка 10⁻³ Ом⁻¹·см⁻¹ при комн. т-ре при пренебрежимо малой электронной проводимости и высокое перенапряжение разложения. Дано подробное колич. описание св-в Li₃N, его структуры, методик получения. Библ. 39.

Ю. Я. Гуревич

Р. 1980. № 4

1981

Li_3N

8 E224. Обнаружение туннелирующих систем в Li_3N по избытку теплоемкости. Detection of tunnelling systems in Li_3N by excess specific heat. Gmelin E., Guckelsberger K. «J. Phys. C: Solid State Phys.», 1981, 14, № 2, L21—L25 (англ.)

(C_p)

В интервале т-р (T) 0,7—30 К измерена теплоемкость (C_p) Li_3N с примесью Н в виде NH_2^- -ионов, конц-ия к-рых изменялась от 0,7 до $26 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$. Исследованы также ИК-спектры Li_3N для $E \perp c$. Обнаружен широкий энергетич. спектр низколежащих возбужденных состояний, который по аналогии с аморфными материалами приписан туннелирующим системам. Последние отождествляют с примесями, поскольку C_p зависит от их конц-ии. Такой подход позволил оценить максим. энергию туннелирующих систем, которая лежит в интервале от 40 К при низких конц-иях Н, до 140 К при высоком содержании Н. C_p описывается ф-лой $C_p = c_1 T + C_3 T^3$. При увеличении примеси Hc_1 вначале увеличивается, а затем резко снижается вследствие диполь-дипольного взаимодействия примесей. Кубич. член ф-лы складывается из решеточного вклада Дебая, и вклада от плотности состояний, конц-ия которых увеличивается с ростом энергии. Библ. 16.

Л. А. Байдаков

ср. 1981/108

1979

Li₃N

13 Б749. Ионный проводник Li₃N: пример определения теплоемкости в температурной области от милликельвин до 800 К. Gmelin Eberhard; Grundel Herbert. Ionenleiter Li₃N: ein Beispiel for spezifische Wärmeuntersuchungen im Temperaturbereich von Milli-Kelvin bis 800 K. «Experientia Suppl.», 1979, 37, 124—125 (нем.)

C_p; H-H, S.

Обобщены опытные данные по $C(T)$ в интервале 0,4—800 К ионного проводника Li₃N, полученные ранее тремя различными методами — в адиабатич. условиях в интервале 1,5—350 К ($\pm 0,2$ —2%), в неадиабатич. калориметре релаксац. типа с периодич. вводом тепла (0,08—10 К) (± 2 —10%) и в дифференциальном сканирующем калориметре ДСК-2 в интервале 100—1000 К (± 1 —3%). Применялась автоматич. регистрация и обсчет опытных данных. Приведена блок-схема обсчета данных ДСК, основанная на ЭВМ Хьюлетт — Паккард. Рекомендованы $C_p^{298} = 75,15 \pm 0,2$ Дж/моль·К, $H_{298} - H_0 = 11\,600 \pm 300$ Дж/моль и $S_{298} = 65,7 \pm 0,2$ Дж/моль·К. Л. А. Резницкий

2.1981. N13

Li N₃

оммуча	9574
оммучк	10008

1979

Оуефича Б.И. "Ур"

Ур. ген. Буллетен.

Ден N 2891 - 49



(5⁰
298)

Li_3N

1949
17 Б433. Дефектная структура ионного проводника нитрида лития (Li_3N). Schulz Heinz, Thiemann К. Н. Defect structure of the ionic conductor lithium nitride (Li_3N). «Acta crystallogr.», 1979, А35, № 2, 309—314 (англ.)

Рентгенографически (автоматич. дифрактометр, поправка на изотропную экстинкцию, уточнение МНК с анизотропными тепловыми факторами, $R \approx 1\%$ по 60—125 независимым отражениям) исследована при t -рах 153—678° К структура Li_3N (I) на монокристалле, выращенном методом Чохральского. I относится к ф. гр. $R\bar{6}/mmm$, a 3,65; c 3,88 А. В результате уточнения структуры с использованием разностной электронной плотности и ангармонич. тепловых факторов показано, что только подрешетка атомов $N(z=0)$ и $(z=1/2)$ комплекты и полностью упорядочены во всем исследованном интервале t -р. В подрешетке $\text{Li}_{(2)}$ концентрация вакансий составляет 1—2%, причем зафиксированы сильно ангармонич. колебания в слоях Li_2N при $z=0$ вдоль направлений $\text{Li}_{(1)}-\text{Li}_{(2)}$. Высокая ионная проводимость I объясняется сочетанием нек-рого беспорядка в этой подрешетке с ангармонич. эффектами. С. Ш. Шильштейн

Кристалл.
структ.

2. 1949, N 14

1979

Li₃N

1) 12 Б424. Позиции внедрения и ангармонические тепловые колебания в решетке нитрида лития Li₃N.
 Schulz Heinz, Zucker Udo. Interstitial sites and anharmonic thermal vibrations in the crystal structure of lithium nitride (Li₃N). «Fast Ion Transp. Solids. Electrodes and Electrolytes. Proc. Int. Conf., Lake Geneva, Wisc., 1979». New York e. a., 1979, 495—498 (англ.)
 Структура Li₃N (I) исследована при т-рах 120—615° (УМНК с анизотропными ангармонич. тепловыми факторами с учетом эффектов 3- и 4-го порядка и изотроп-

Кристаллическая структура

кач.
оцес

2. 1981. N12

ными и анизотропными экстикц. поправками, $R=0,5-1,2\%$ по 60—200 независимым отражениям). В гексагон. решетке I слои атомов $Li_{(1)}$ чередуются со слоями $Li_{(2)}N$. Показано, что подрешетка $Li_{(1)}$ при всех T -рах остается комплектной, в то время как $Li_{(2)}$ в нек-рых кристаллах I при низких T -рах дефицитна на 1—2%, что связывается с влиянием примесей O^{2-} или $(NH)^{2-}$, а $>400^\circ$ дефицит возрастает и достигает 15% при 600° . По разностным синтезам электронной плотности в решетке I установлено, что уже при 120° колебания атомов $Li_{(2)}$ резко ангармоничны, причем их амплитуда максимальна для направлений к соседним ионам Li и минимальна для противоположных направлений к ионам N . Начиная с 400° , распределение электронной плотности между позициями $Li_{(2)}$ становится непрерывным, что свидетельствует о большой подвижности этих ионов в решетке I. На проекциях разностных синтезов электронной плотности I на плоскость, перпендикулярную базисной, обнаружены прямые указания на заселенность при высоких T -рах позиций внедрения, лежащих на параллельных гексагон. оси отрезках, соединяющих позиции $Li_{(2)}$. Высказано предположение об образовании динамич. доменов, в к-рых позиции внедрения с двойной координацией атомов N заняты, а соседние нормальные позиции $Li_{(2)}$ с тройной координацией заблокированы и свободны, что равноценно фазовому переходу, сопровождающемуся изменением координации азота. Полученные результаты объясняют высокую ионную проводимость I подвижностью атомов $Li_{(2)}$ в решетке. Ионы $Li_{(1)}$ при этом в переносе заряда не участвуют.

С. III: Шилыштейн

1980

Li_3N

1) 7 Б781. «Стеклоподобные» свойства кристаллического Li_3N при низких температурах. Baumann T., Schickfus M. v., Hunklinger S., Jäckle J. «Classy» properties of crystalline Li_3N at low temperatures. «Solid State Commun.», 1980, 35, № 8, 587—590 (англ.)

Стекло-
подобные
св-ва

При т-рах 100 К—20 мК изучено акустич. и диэлектрич. поведение суперионного проводника Li_3N (I). При низких т-рах св-ва I определяются низкоэнергетич. возбужденными состояниями, подобными тем, к-рые наблюдаются для стекол. В I подобные возбужденные состояния при низких т-рах связаны с туннелированием примеси водорода, в то время как при высоких т-рах акустич. и диэлектрич. поведение I объясняется на основании термически активированных прыжков ионов лития.

Резюме

X. 1981N7

Li_3N

1980

№ 4 E271. Теплопроводность Li_3N при низких температурах. Low-temperature thermal conductivity of Li_3N . Guckelsberger K., De Goer A. M. «J. Phys. C: Solid State Phys.», 1980, 13, № 28, L767—L771 (англ.)

тепло-
проводность

Сообщаются результаты исследований теплопроводности Li_3N в интервале т-р 0,09—200° К. Проведен расчет времени релаксации с учетом рассеяния фононов на границах зерен, рэлеевского рассеяния на точечных дефектах и трехфононных процессов рассеяния. Получено, что температурные зависимости коэф. теплопроводности и времени релаксации являются типичными для диэлектрич. кристаллов, но некоторое различие в абс. величине экспериментальных и расчетных значений может быть объяснено лишь с учетом добавочного рассеяния фононов в терминах двухуровневой модели с продольными и быстрыми поперечными фононами. Библ. 15.

В. Е. Зиновьев

Ф. 1981 N 4

Liz N

Comma 10625 | 1980

Jug K, Nanda D.N.

(AH)

Theor. Chim. acta,

1980, 57, 131-144.

128.112
128.112.

Li_3N

X - 10292a

1980

23 Б767. Давление диссоциации Li_3N (тв.). Kimura Hitoshi, Asano Mitsuru, Kubo Kenji. «Кёто дайгаку гэнси энэруги кэнкюсё ихо, Bull. Inst. Atom. Energy Kyoto Univ.», 1980, 57, 46 (япон.)

В интервале t -р 750—850 К масс-спектрометрич. методом определены парц. равновесные давл. паров над Li_3N . Результаты описаны ур-ниями: $\lg P_{\text{Li}} = (11,487 \pm \pm 0,102) - (9,670 \pm 0,081) \cdot 10^3/T$, $\lg P_{\text{Li}_2} = (14,306 \pm 0,209) - (14,090 \pm 0,166) \cdot 10^3/T$ и $\lg P_{\text{N}_2} = (10,959 \pm 0,157) - (9,638 \pm 0,124) \cdot 10^3/T$.

А. Б. Кисилевский

P_i ; K_p

X. 1980 №23

Li₃N

X-10292

1980

23 Б768. Термодинамические свойства Li₃N (тв.).
Kimura Hitoshi, Asano Mitsugu, Kubo
Kenji. «Кёто дайгаку гэнси энэруги кэнкюсё ихо,
Bull. Inst. Atom. Energy Kyoto Univ.», 1980, 57, 47
(япон.)

$\Delta H_f; \Delta G_f$

Из ранее определенных (см. пред. реф.) давл. раз-
ложения Li₃N (I) с использованием лит. данных для
образования тв. I из тв. Li и газ. N₂ при 298,15 К
найденны $\Delta H = -171,3 \pm 7,7$, $\Delta G = -135,4 \pm 7,7$ кДж/моль
и $\Delta S = -120,4 \pm 36,5$ Дж/моль·К. А. Б. Кисилевский

$$\Delta H_f = -40,94 \pm 2 \text{ ккал/моль}$$

X. 1980 № 23

Li_3N

1981

$\text{Pb}_3(\text{MgNb}_2)\text{O}_9$

/ 94: 215481j Glassy behavior of crystalline solids at low temperatures. Ackerman, D. A.; Moy, D.; Potter, R. C.; Anderson, A. C.; Lawless, W. N. (Dep. Phys., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1981, 23(8), 3886-93 (Eng). Measurements of the low-temp. sp. heat, C , thermal cond. κ , and dielec. dispersion were made on cryst. samples of the superionic conductor Li_3N , Y_2O_3 -stabilized ZrO_2 , and the ferroelec. $\text{Pb}_3(\text{MgNb}_2)\text{O}_9$. In each case, the behavior is similar to that of amorphous materials. The peak in C/T^3 appears to be correlated, in both amorphous and cryst. materials, with a nearly temp.-independent regime in κ .

(cp)

(H) ~~A~~

C.A. 1981. 94 N 26

Li₃N

1981

94:163507h Detection of tunneling systems in trillithium nitride by excess specific heat. Gmelin, E.; Guckelsberger, K. (Max Planck Inst. Festkoerperforsch., D-7000 Stuttgart, 80 Fed. Rep. Ger.). *J. Phys. C* 1981, 14(2), L21-L25 (Eng). The heat capacity of Li₃N contg. H was measured at 0.7-30 K and the existence of a broad spectrum of low lying excitations was deduced. In analogy with amorphous materials, the excitations are attributed to tunneling systems. The results are analyzed by assuming that the impurity acts as the tunneling system. The max. energy of the tunneling systems was estd., which occur at 40 and 130 K, at low and high H concns., resp.

(Cp)

C.A. 1981 24 N 20

1981

Li₃N-LiCl

phase. path

Li₉N₂Cl₃

(β^0 , H-H⁰)

(+2) Δ

C.A. 1981, 95, N20

(95:176567r Phase equilibriums and thermodynamic properties of the lithium-nitrogen-chlorine, lithium-nitrogen-bromine and lithium-nitrogen-iodine systems. Hartwig, P.; Rabenau, A.; Weppner, W. (Max-Planck-Institut für Metallforsch., D-7000 Stuttgart, 80 Fed. Rep. Ger.). *J. Phase Equilib. Common Met.* 1981, 80(1), 81-90 (Eng). The phase equilibria of the quasi-binary systems Li₃N-LiX (X = Cl, Br, I) and the Gibbs phase triangles of the ternary systems Li-N-X are presented. Thermodyn. data related to the formation of the ternary Li nitride halides are derived from electrochem. decompn. measurements. The ranges of Li activities and halogen equil. partial pressures under which the compds. may exist are given. All compds. are stable against reaction with elemental Li and N at atm. pressure. The std. enthalpy and entropy of Li₉N₂Cl₃ at 298 K with respect to 0 K are -47.8 ± 0.7 kJ mol⁻¹ and -284 ± 8 J mol⁻¹ K⁻¹, resp. The heats of the phase transitions of Li₁₃N₂Br at 506 K and Li₅Ni₂ at 450 K are 0.927 kJ mol⁻¹ and 6.96 kJ mol⁻¹, resp. The new compd. Li₉N₂Br₃ crystallizes in a body-centered tetragonal structure with a 11.761 Å and c 5.993 Å.

1) Li₃N-LiBr, Li₁₃N₂Br
 ↑ phase. path. ↘ ΔH_{tr}

2) $Li_3 N - Li^+ [Oxide-patr.]$
 $Li_5 N^{2-} (\Delta H_{t2}, T_{t2})$

LiN-LiBz

1981

фазов. равн.

Martwig P., et al.

Li₁₃N₄Bz

J. less. Common Met.

ΔH_{t2} ;

1981, 80 (1), 81-90.

T_{t2} .

(ср. Li₃N-LiCl ; I)

$\text{Li}_3\text{N}-\text{LiI}$

1981

разоб. рабн.

Martwig P., et al.

Li_5N_2

F. less. Common Met.

$4\text{M}_{t2}; \text{T}_{t2}$.

1981, 80 (1), 81-90.

(see $\text{Li}_3\text{N}-\text{LiCl}; \text{I}$)

$\text{Li}_3\text{N}(\text{K})$

1982

$\Delta_f G;$

96:111818z Free energy of formation for solid lithium nitride. Asano, Mitsuru; Kubo, Kenji; Kimura, Hitoshi (Inst. At. Energy, Kyoto Univ., Uji, Japan 611). *J. Nucl. Sci. Technol.* 1982, 19(1), 78-9 (Eng). The free energy of formation of Li_3N (reaction product in Li-contg. fusion reactor blanket) was detd. in the temp. range 298-1086 K and compared with literature values. Partial pressures and heats of reaction and formation of Li_3N were evaluated in the study.

C.A. 1982, 96, N14.

Li_3N

1982

(обзор)

Кристаллическая
и исследов.
структура

1 Б487. Изучение нитрида лития и родственных материалов с помощью современной техники исследования твердого тела. Lithium nitride and related materials case study of the use of modern solid state research techniques. Rabenau Albrecht. «Solid State Ionics», 1982, 6, № 4, 277—293 (англ.)

Обзор. Обсуждается состояние работ по выращиванию и исследованию структуры нитрида лития, используемого в качестве тв. электролита, а также родственных Li_3N материалов — смешанных нитрид-хлоридов лития. Детально рассмотрены механизм проводимости Li -ионов, особенности расположения атомов и хим. связей в Li_3N , степень и тип дефектности крист. решетки. Библи. 34.

О. Н. Севрюков

X. 1983, 19, N1

Li_3N

1982

№ 5 Б426. Статистические подходы к рассмотрению ангармонического движения в кристаллах. II. Ангармонические тепловые колебания и эффективные атомные потенциалы в суперионном проводнике Li_3N . Statistical approaches for the treatment of anharmonic motion in crystals. II. Anharmonic thermal vibrations and effective atomic potentials in the fast ionic conductor lithium nitride (Li_3N). Zucker U. H., Schulz H. «Acta crystallogr.», 1982, A 38, № 5, 568—576 (англ.)

ангармон.
движение
в
кристалле

На рентгенограммах от Li_3N , снимаемых в т-рном интервале 294—880 К, отмечается высокая степень ангармонич. теплового поведения решетки. Отмечается, что ангармонизм не может быть объяснен появлением добавочных положений равновесия атомов. Найдено, что анализ рентгенограмм методом Грамма-Шарлье приводит к быстро сходящейся подгонке эксперим.

X. 1983, 19, 15

рентгеновских интенсивностей. На основе проведенного анализа найдены одночастичные эффективные атомные Π т, энергия активации ионной проводимости, перпендикулярной оси c и t -рная зависимость постоянной решетки. Отмечается, что полученные таким способом энергия активации и t -рная зависимость постоянной решетки согласуются со значениями этих величин, найденными др. эксперим. методами. В связи с этим соответствием сделан вывод о реалистичности предлагаемых одноатомных ангармонич. потенциалов.

Часть I см. пред. реферат. В. А. Онищук

Li_3N

1982

(обзор)

Керасицкая
и исследов.
структуры

1 Б487. Изучение нитрида лития и родственных материалов с помощью современной техники исследования твердого тела. Lithium nitride and related materials case study of the use of modern solid state research techniques. Rabenau Albrecht. «Solid State Ionics», 1982, 6, № 4, 277—293 (англ.)

Обзор. Обсуждается состояние работ по выращиванию и исследованию структуры нитрида лития, используемого в качестве тв. электролита, а также родственных Li_3N материалов — смешанных нитрид-хлоридов лития. Детально рассмотрены механизм проводимости Li -ионов, особенности расположения атомов и хим. связей в Li_3N , степень и тип дефектности крист. решетки. Библи. 34. О. Н. Севрюков

X. 1983, 19, N1

Li_3N (123) (om. 16867) 1983

Wuertthwein E. U., Sen

K. D., Pople J. A. et al.

Inorg. Chem. 1983, 22(3),
496-503.

ΔH_f°
Dis
2031 Li_3N

(ссылка)

$\Delta H_{20} = +84 \pm 8$ ккал/моль
(ссыл. ● LiNH_2 ; I)

Li₃N

1984

14 B2008. Исследование электронной плотности в Li₃N с использованием комптоновского рассеяния. II. An investigation of the electron density in Li₃N using compton scattering. II. Pattison Philip, Hansen Niels K., Schneider Jochen R. «Acta crystallogr.», 1984, B40, № 1, 38—44 (англ.)

Проведено исследование комптоновских профилей по ряду кристаллографич. направлений в плоскости основания Li₂N в суперионном проводнике Li₃N (энергия перв. пучка фотонов 412 кэВ, пик комптоновского рассеяния под углом 165° при 160 кэВ). Сравнение полученной анизотропии распределения электронной плотности с нек-рыми моделями Mo подтверждает связь этой анизотропии с условиями ортогональности, накладываемыми на орбитали ионов, центрированные на разных атомных позициях. Эти условия вызывают искажение несвязывающих заполненных электронных оболочек, причем влияние взаимодействий N—N и N—Li одного порядка. Сообщ. 1 см. Pattison P., Schneider J. R. Acta Crystallogr., 1980, A36, 390. Л. А. Бутман

X. 1984, 19, N14

Li_3N

1985

8 Б3100. Растворы азота в жидких щелочных металлах. Solutions of nitrogen in liquid alkali metals. Barker M. G. «Handb. Thermodyn. and Transp. Prop. Alkali Metals Meet., Rome, Sept., 1976» Oxford e. a., 1985, 897—899 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Проведено обсуждение и сравнение лит. данных по р-римости азота в жидк. литии и натрии, полученных различными эксперим. методами. Рекомендованы выражения для р-римости азота в этих щел. металлах, а также для свободной энергии образования Li_3N . Отмечается, что р-римость азота в K, Rb и Cs незначительна. Li_3N является единственным стабильным соединением в Li—N системе. Представлена фазовая диаграмма Li— Li_3N .

В. Ф. Пономарев

X. 1986, 19, N 8

Li₃N (K)

1985

JANAF

г.р. III изд. 1985 стр. 1467

$$\Delta H_{f,298} = -39,33 \text{ ккал/моль} = -157,57 \pm 1,3 \text{ кДж/моль}$$

$\pm 0,26$

расчет 1966

пересчет 1978

LiN_3 (к)

1986

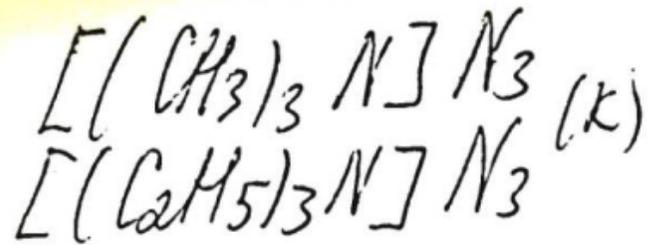
20 Б3229. Термодинамика растворов, содержащих азид-ион. Карпенко Г. В., Майорова Т. Н., Полторацкий Г. М. «11 Всес. конф. по калориметрии и хим. термодинам., Новосибирск, 17—19 июня, 1986. Тез. докл. Ч. 1». Новосибирск, 1986, 172—173

При различных т-рах термохимически и тензиметрически изучены водн. и метанольные р-ры азидов Li , Na , K , Cs , Me_4N^+ и Et_4N^+ . В ряду азидов щел. металлов теплоты р-рения в воде с увеличением размера катиона становятся более эндотермичными, а при переходе от $(\text{Me}_4\text{N})\text{N}_3$ к $(\text{Et}_4\text{N})\text{N}_3$ — более экзотермичными. Т-рные коэф. азидов щел. металлов < 0 , а азидов тетраалкиламмония > 0 . Энтальпия крист. решетки $(\text{Me}_4\text{N})\text{N}_3$ равна 448,2 кДж/моль. По термодинамич. св-вам изученные азиды близки к соотв. галогенидам: по способности координировать ближайшие молекулы (воды (по теплоте гидратации) и по донорной способности азид-ион располагается в ряду галогенид-ионов между Cl^- и Br^- . Л. В. Арсеенков

⊗ (+4)

X. 1986, 19, N 20

NaN_3 (к), KN_3 (к), CsN_3 (к)
на об.



(DazH)



Li₃N

1988

6 Б2020. Фазовые превращения нитрида лития под давлением. Phasenumwandlungen von Lithiumnitrid unter Druck / Beister Heinz Jürgen, Haag Sabine, Kniep Rüdiger, Strößner Klaus, Syassen Karl // Angew. Chem. — 1988.— 100, № 8.— С. 1116—1118.— Нем.

С применением аппаратуры высокого давл. методом порошковой рентгенографии изучен полиморфизм Li₃N при высоком давл. При 0,6 гПа стабильная при атмосферном давл. гексагон. (ф. гр. $P6/mmm$) α -модификация (I) переходит в β -модификацию (II) (ф. гр. $P6_3/mmc$ СТ Na₃As). Для I и II соотв. a 364,8, 355,2, c 387,5, 631,1 пм, Z 1, 2, ρ (выч.). 1,295, 1,677. II устойчива при атмосферном давл. и необратимо переходит в I при 200°С. II при давл. >10 гПа переходит в кубич. модификацию с F -решеткой, изотипную Li₃Bi и имеющую a 427,3 пм. М. Б. Варфоломеев

Tt2

к. 1991. NE

Li_3N

1990

10 Б2033. Новая модификация нитрида лития / Митрохина С. В., Бурдина К. П., Семенов К. Н. // Вестн. МГУ. Сер. 2.— 1990.— 31, № 6.— С. 612—614.— Рус.

Методом закалки исследован полиморфизм нитрида лития в условиях высоких давл. до 60 кбар и т-р до 100°C . При давл. менее 10 кбар и комн. т-ре происходит полиморфное превращение нитрида лития в новую модификацию высокого давл. $\text{Li}_3\text{N-II}$, к-рая в обычных условиях является метастабильной. Резюме

X. 1991, N 10

Li₃N

1997

22Б362. Энергетика тройных нитридов: системы Li—Ca—Zn—N и Ca—Ta—N. Energetics of ternary nitrides: Li—Ca—Zn—N and Ca—Ta—N systems / McHale J. M., Navrotsky A., Kowach Glen R., Balbarin Vincent E., DiSalvo F. J. // Chem. Mater.— 1997.— 9, № 7.— С. 1538–1546.— Англ. Место хранения ГПНТБ России

Методом высокотемпературной калориметрии р-рения оксидных расплавов с использованием методики вбрасывания в вдвоенном микрокалориметре Тиана—Кальве определены станд. энтальпии образования нескольких бинарных и тройных нитридов. Получены следующие значения энтальпий образования (в кДж/моль) при t-ре 298 К:

$\Delta_f H^\circ(\text{Li}_3\text{N}) = -166,1 \pm 4,8$; $\Delta_f H^\circ(\text{Ca}_3\text{N}_2) = -439,7 \pm 6,6$;
 $\Delta_f H^\circ(\text{Zn}_3\text{N}_2) = -43,5 \pm 4,1$; $\Delta_f H^\circ(\text{Ta}_3\text{N}_5) = -849,7 \pm 11,7$;
 $\Delta_f H^\circ(\text{Ca}_2\text{ZnN}_2) = -378,9 \pm 8,6$; $\Delta_f H^\circ(\text{Sr}_2\text{ZnN}_2) = -385,6 \pm 14,3$;
 $\Delta_f H^\circ(\text{LiCaN}) = -216,8 \pm 10,8$; $\Delta_f H^\circ(\text{LiZnN}) = -137,5 \pm 6,8$ и $\Delta_f H^\circ(\text{CaTa}_2\text{N}_2) = -643,8 \pm 9,6$. Сделан вывод,

$\Delta_f H^\circ$

△

(+8)

Х. 1997, № 22

что, по-видимому, энергетика образования тройных нитридов определяется кислотнo-основным характером катионов. Найдено линейное соотношение между энтальпией образования тройного нитрида из бинарных нитридов и отношением ионных потенциалов двух катионов. Библ. 43.
В. Ф. Байбуз



Li₃N

1997

127: 24364p Energetics of Ternary Nitrides: Li-Ca-Zn-N and Ca-Ta-N Systems. McHale, J. M.; Navrotsky, A.; Kowach, Glen R.; Balbarin, Vincent E.; DiSalvo, F. J. (Princeton Materials Institute and Department of Geosciences, Princeton University, Princeton, NJ 08544 USA). *Chem. Mater.* 1997, 9(7), 1538-1546 (Eng). American Chemical Society. High-temp. oxide melt drop soln. calorimetry was used to study the energetics of ternary nitride formation. The std. enthalpies of formation of several binary and ternary nitrides were detd. These values in kJ/mol are $\Delta H_f^\circ(\text{Li}_3\text{N}) = -166.1 \pm 4.8$, $\Delta H_f^\circ(\text{Ca}_3\text{N}_2) = -439.7 \pm 6.6$, $\Delta H_f^\circ(\text{Zn}_3\text{N}_2) = -43.5 \pm 4.1$, $\Delta H_f^\circ(\text{Ta}_3\text{N}_5) = -849.7 \pm 11.7$, $\Delta H_f^\circ(\text{Ca}_2\text{ZnN}_2) = -378.9 \pm 8.6$, $\Delta H_f^\circ(\text{Sr}_2\text{ZnN}_2) = -385.6 \pm 14.3$, $\Delta H_f^\circ(\text{LiCaN}) = -216.8 \pm 10.8$, $\Delta H_f^\circ(\text{LiZnN}) = -137.5 \pm 6.8$, and $\Delta H_f^\circ(\text{CaTaN}_2) = -643.8 \pm 9.6$. These enthalpies of formation are small in magnitude compared to analogous values for oxides. However, the enthalpies of formation of the ternaries from binary nitrides can be quite substantial, confirming significant energetic stabilization of ternary nitrides. The energetics of ternary nitride formation appears to be dominated by the acid/base character of the cations. A linear relationship was found between the enthalpies of formation of the ternaries from binary nitrides and the ionic potential ratio of the two cations.

(ΔH°)

△
(+8)

C.A. 1997, 127, N2

F: NLi2

P: 1

1998

21B1190. Об электронной структуре NLi[2] и PLi[2]. Основное и низколежащие возбужденные состояния. On the electronic structure of NLi[2] and PLi[2], ground and low-lying excited states / Tzeli D., Papakondylis A., Mavridis A. // J. Phys. Chem. A [бывш. J. Phys. Chem.]. - 1998. - 102, 12. - С. 2223-2230. - Англ.

Место хранения ГПНТБ России Методом ССП в полном активном пространстве и взаимодействия конфигураций с одинарным и двойным замещениями в различных базисах вычислены полные энергии, энергии диссоциации, межатомные расстояния и заряды на атомах молекул NLi[2] и PLi[2] в основном и возбужденных состояниях. Энергии связей N-Li и P-Li равны 42,5 и 40,2 ккал/моль соответственно.

ФХХ, 1998, №1