

Научно-исследовательская работа Журавлева Ю.Н.

Научно-исследовательская работа группы проф. Журавлева Ю.Н. (доц. Федоров И.А., ст. преп. Корабельников Д.В., доц. Журавлева Л.В., асп. Алейникова М.В., асп. Киямов М.Ю., асп. Бугаева И.А.), которая проводится в тесном сотрудничестве с кафедрой теоретической физики, в последние три 2009-2011 года была сосредоточена в рамках **двух направлений**, отвечающих Приоритетным направлениям развития науки, технологий и техники в Российской Федерации:

- Исследование термодинамических характеристик штатных материалов систем регенерации кислорода и поиск методами компьютерного моделирования новых смесевых составов на основе оксидов, пероксидов, надпероксидов, озонидов и оксианионных солей щелочных металлов для дыхательных аппаратов космических кораблей, подводных лодок, подземных транспортных средств (направление — транспортные и космические системы).
- Исследование структурных, электронных, термодинамических свойства и реакционной способности соединений, моделирующих фрагменты органической массы углей, углеводородных материалов, взрывчатых веществ с целью повышения их энергоэффективности (направление — энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика)

Область научной деятельности: Физика твердого тела, Химическая физика, Физическая химия, Физика горения и взрыва.

Основным инструментарием выполнения работ являются методы компьютерного моделирования с использованием как собственного, так и коммерческого или свободно распространяемого программного обеспечения. Развита и реализована современные методики вычислений:

- **кристаллической и молекулярной структуры** систем любой сложности;
- **энергетического спектра электронов** в кристаллах и молекулах;
- качественных и количественных **параметров химической связи** (распределение валентной и деформационной плотности, зарядов, заселенностей перекрывания электронных оболочек атомов и др.);
- **механических характеристик** кристаллических и поликристаллических систем (упругие постоянные, тензор напряжений, объемный модуль упругости, модуль сдвига, Юнга, постоянная Пуассона, скорости звука в различных направлениях);
- **оптических свойств** кристаллов (мнимая и вещественная часть диэлектрической проницаемости, коэффициенты поглощения и отражения),
- **поверхностные свойства кристаллов** (структура, заряды, электронный спектр)
- **колебательного спектра** молекул и кристаллов;
- **термодинамических функций** молекул и кристаллов (уравнение состояния, теплоемкость, энтропия, коэффициент теплового расширения, внутренняя энергия, свободная энергия, потенциал Гиббса, энтальпия, коэффициент Грюнайзена, коэффициент теплопроводности)
- **влияния внешних факторов** (давление и температура) на структурные, электронные, колебательные и термодинамические свойства кристаллов;
- **ударно-волновых явлений** в твердых телах (ударная адиабата, скорость ударной волны, массовая скорость, температура разогрева и плавления при ударных нагрузках, энергия разгрузки);
- **реакционной способности** твердых тел (совокупность параметров).

Объектами исследований являются:

- **термодинамически лабильные оксианионные кристаллы** нитритов (MNO_2), нитраты (MNO_3), хлораты ($MClO_3$), перхлораты ($MClO_4$) щелочных металлов (M: Na, K, Rb) – компоненты, ракетных топлив и других энергетических установок, взрывчатых и пиротехнических составов;
- **карбонаты** (M_2CO_3 , M: Na, K, Rb, Cs) – элементы защитных покрытий экранов и MCO_3 (M: Mg, Ca) – природные минералы — химическое сырье;
- **сульфаты** щелочных (M_2SO_4 , $M_1M_2SO_4$, M: Na, K, Rb) и щелочноземельных (MSO_4 , M: Mg, Ca, Ba) металлов – пьезоакустические и иные датчики;
- **оксиды** (M_2O), **пероксиды** (M_2O_2), **надоксиды** (MO_2), **озониды** (MO_3) щелочных металлов (M: Na, K, Rb) – самостоятельно и в составе смесей с перхлоратами источники кислорода в генераторах, том числе изолирующего типа, компоненты стекло образующих составов;
- **оксид, пероксид, карбонат, сульфат лития** — активный компонент современных энергоаккумулирующих устройств;
- **полициклические углеводороды** (нафталин, антрацен, перилен, каронен), **молекулярные арильные, нафтенновые, алкильные** функциональные и мостиковые группировки - исходные фрагменты для моделирования органической массы угля и продуктов углепереработки;
- **взрывчатые вещества:** иницирующие (азиды меди и серебра), бризантные (тетранитропентаэритрит (PETN), циклотриметилентринитрамин (RDX), триаминотринитробензол (TATB));
- **серебросодержащие соединения** (оксид Ag_2O , нитрит $AgNO_2$, нитрат $AgNO_3$, карбонат Ag_2CO_3 , перхлорат $AgClO_4$, нитрид AgN , азид AgN_3) — разнообразное применение и модельные объекты для своих систем.

Основные публикации по заявленным темам за 2009-2012 г.

1. Журавлев Ю.Н., Корабельников Д.В. Природа электронных состояний и оптические функции оксианионных соединений натрия //Физика твердого тела. – 2009. - Т. 51, №1. - С. 65-72 (Translate: Nature of Electronic States and Optical Functions of Sodium Oxyanionic Compounds // Physics of the Solid State. – 2009. – V. 51, No. 1. - P. 69–77.)
2. Журавлев Ю.Н., Лисицын В.М., Федоров И.А. Влияние деформаций на электронное строение азида серебра // Известия Томского политехнического университета. – 2009. – Т. 314, №2. – с. 115-121
3. Журавлев Ю.Н., Корабельников Д.В. Природа электронных состояний и фотоэлектронные спектры оксианионных кристаллов //Журнал структурной химии. – 2009. – Т. 50, №6. - С. 1070-1077 (Translate: The nature of the electronic states and photoelectron spectra of oxyanion crystals // Journal of Structural Chemistry. – 2009. - V. 50, N6. - P. 1021-1028.)
4. Журавлев Ю.Н., Корабельников Д.В. Электронная структура поверхности оксианионных кристаллов // Известия вузов. Физика. – 2009. - № 8. – С. 97-99. (Translate: The electronic structure of an oxyanionic crystal surface // Russian Physics Journal. – 2009. – V.52, N8. – P. 881-883.)
5. Журавлев Ю.Н., Кравченко Н.Г., Оболонская О.С. Электронная структура окислов щелочных металлов //Химическая физика. – 2010. – Т. 29, № 1. – С. 11-19. (Translate: The Electronic Structure of Alkali Metal Oxides // Russian Journal of Physical Chemistry. B. – 2010. –V. 4, N 1. – P. 20-28.)
6. Гордиенко А.Б., Журавлев Ю.Н. Расчеты из первых принципов структурных, упругих и электронных свойств нитридов серебра //Журнал структурной химии. – 2010. Т. 51, №3. - С. 425-432. (Translate: Ab initio calculations of structural, elastic, and electronic properties of silver nitrides // Journal of Structural Chemistry. – 2010. - V. 51, N3. -P. 401-408)
7. Журавлев Ю.Н., Оболонская О.С. Исследование упругих свойств окислов щелочных металлов из первых принципов //Известия вузов. Физика. – 2010. - № 8. – С. 9-16. (Translate: A first-principles study of elastic properties of alkali-metal oxides // Russian Physics Journal. 2011 – V. 53, N. 8. - P. 776-784.)
8. Журавлев Ю.Н., Оболонская О.С. Структура, механическая стабильность и химическая связь в окислах щелочных металлов //Журнал структурной химии. – 2010. - Т. 51, №6. - С. 1043-1051. (Translate: Structure, mechanical stability, and chemical bond in alkali metal oxides // Journal of Structural Chemistry. – 2010. - V. 51, N6. - P. 1005-1013)

9. Федоров И.А. Журавлев Ю.Н. Электронная структура антрацена // Известия вузов. Физика. – 2010. – Т. 53, № 9/2. – С. 303-304.
10. Журавлев Ю.Н., Лисицын В.М. Структурные фазы азиды серебра // Известия Томского политехнического университета. – 2010. – Т. 317, №2. – С. 138-143.
11. Korabel'nikov D. V., Zhuravlev Yu.N. and Poplavnoi A. S. Electronic structure, chemical bonding, photoelectronic and optical properties of metal perchlorates / Perchlorates: Production, Uses and Health Effects. Chapter 9 Editor: Lawrence E. Matthews Nova Science Publishers, Inc. 2010. ISBN: 978-1-61761-812-3
12. Журавлев Ю.Н., Лисицын В.М. Ударно-деформационный механизм инициирования взрывного разложения Азида серебра при импульсном электронном и лазерном воздействии // Известия вузов. Физика. – 2011. – Т. 54, № 1/2. – С. 259-264.
13. Fedorov I. A., Zhuravlev Y.N. and Berveno V.P. Electronic structure and chemical bond in naphthalene and anthracene // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2011. – V. 13. – P. 5679–5686.
14. Корабельников Д.В., Алейникова М.В., Журавлев Ю.Н. Структура и электронные свойства (111)-поверхности оксидов щелочных металлов // Известия вузов. Физика. – 2011. – Т. 54, №6. – С. 103-104.
15. Журавлев Ю.Н., Лисицын В.М. Параметр Грюнайзена для азиды серебра // Известия вузов. Физика. – 2011. – Т. 54, №7. – С. 35 - 41. (Translate: The Gruneisen parameter for silver azide // Russian Physics Journal. – 2011. – V. 54, N 7. – P. 765-777.)
16. Журавлев Ю.Н., Лисицын В.М. Первопринципные исследования колебательной структуры и термодинамических функций азиды серебра // Известия Томского политехнического университета. - 2011. - Т. 319, № 2. – С. 134 – 140.
17. Журавлев Ю.Н., Федоров И.А., Киямов М.Ю. Первопринципное исследование кристаллической структуры и уравнения состояния нафталина и антрацена // Журнал структурной химии, 2012 (в печати)
18. Корабельников Д.В., Алейникова М.В., Журавлев Ю.Н. Структура и электронные свойства поверхности пероксидов щелочных металлов // Журнал структурной химии - 2012 (в печати)
19. Алейникова М.В., Журавлев Ю.Н., Корабельников Д.В. Первопринципные исследования влияния давления на структуру и электронные свойства оксидов и пероксидов щелочных металлов // Известия вузов. с. Физика - 2012 (в печати)
20. Журавлев Ю.Н., Корабельников Д.В., Алейникова М.В. Первопринципные расчеты термодинамических параметров оксидов лития, натрия, калия // Физика твердого тела — 2012 (в печати)

За указанный период 2009-2011 г. **защищено** 3 кандидатские диссертации (н/р Журавлев Ю.Н.):

1. Головкина Ольга Владимировна (доцент КемГМА), 2009 г., тема «Электронная структура, химическая связь и физико-химические свойства сульфатов щелочных металлов»
2. Корабельников Дмитрий Васильевич (ст. преп. каф. теор. физики КемГУ), 2009 г., тема «Природа электронных состояний, фотоэлектронные и оптические свойства оксианионных кристаллов»
3. Оболонская Оксана Сергеевна (ст. преп. КемТИПП), 2010 г., тема «Электронное строение, упругие свойства и реакционная способность оксидов щелочных металлов»

Научные контакты:

- Кафедра лазерной и световой техники (зав. кафедрой проф. Лисицын В.М.) Национального исследовательского Томского политехнического университета, г. Томск;
- Лаборатория квантовой химии и спектроскопии (зав. лабораторией проф. Ивановский А.Л.) Института химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург;
- Отдел спектроскопии твердых тел (зав. отделом проф. Соболев В.В.) Удмурдского государственного университета, г. Ижевск;
- Лаборатория физической химии высоких давлений (зав. лабораторией д.ф.-м.н. Молодец А.М.) Института проблем химической физики РАН, г. Москва

Основные результаты, проведенных научных исследований:

оксианионные кристаллы:

- В локальном приближении теории функционала плотности с использованием Troullier and Martins (TM) псевдопотенциалов в базе численных псевдоатомных орбиталей выполнены вычисления зонной структуры, плотности состояний, распределений парциальной электронной плотности и оптических функций: диэлектрической проницаемости, показателя преломления, коэффициента отражения и поглощения нитрита, нитрата, карбоната, хлората, сульфита, перхлората и сульфата натрия. Установлена природа верхних валентных и нижних незанятых зон и показано, что особенности оптических функций в интервале энергий до 8 эВ обусловлены возбуждением электронов в локализованную анионную зону проводимости, при $E > 8$ эВ - в зоны анион-катионных состояний. Результаты сопоставляются с экспериментальными фотоэлектронными спектрами и спектрами отражения, поглощения.
- С помощью пакета CRYSTAL06 методом B3LYP в локализованном базисе атомных орбиталей для нитритов, нитратов, хлоратов, перхлоратов, сульфитов, сульфатов лития, натрия, калия вычислены плотность состояний, атомные заряды и их парциальные составляющие. Установлено хорошее соответствие рассчитанной плотности состояний $N(E)$ и экспериментальных фотоэлектронных спектров ФЭС. Показано, что неэквивалентные в кристаллографическом отношении атомы металлов и кислорода находятся в разном зарядовом состоянии и это приводит к расщеплению полос $N(E)$.

Оксиды, пероксиды, озониды:

- С использованием пакетов CRYSTAL06 и GAMESS в B3LYP-параметризации для оксидов, пероксидов, надоксидов, озонидов лития, натрия, калия выполнены вычисления для кристаллической фазы: полной энергии, зонной структуры, распределений полной и парциальной плотностей электронных состояний, величин зарядов атомов; для молекулярной фазы: оптимизация геометрии и энергии молекулярных орбиталей. Полученные для оксидов металлов результаты сопоставляются с экспериментальными данными по фотоэлектронной спектроскопии и применяются для анализа процессов их образования и термического разложения.
- В локальном и градиентном приближении теории функционала электронной плотности, в базе линейной комбинации атомных орбиталей с помощью пакета CRYSTAL06 вычислены упругие постоянные, модули одноосного сжатия, другие анизотропные факторы монокристаллов оксидов, пероксидов, надпероксидов и озонидов лития, натрия, калия, рубидия в равновесной геометрии и упругие модули: всестороннего сжатия, сдвига, Юнга, коэффициент Пуассона их агрегатных комплексов – поликристаллов. Упругие модули используются для оценки скорости звука, температуры Дебая и температуры плавления. Результаты расчетов сопоставляются с данными других авторов и устанавливаются рядовые закономерности упругих свойств оксидов.
- В рамках градиентного приближения теории функционала плотности, полноэлектронным методом линейной комбинации атомных орбиталей программного пакета CRYSTAL09 проведено исследование структурных и электронных свойств оксидов и пероксидов лития, натрия, калия при гидростатическом давлении в интервале от -3 до 15 ГПа. Определены параметры кристаллической структуры, вычислены зонная структура, заряды и заселенности перекрывания соседних атомов и установлены зависимости этих параметров от давления. Показано, что ширина запрещенной зоны увеличивается с ростом давления.
- С помощью пакета CRYSTAL09 методом B3LYP в локализованном базисе атомных орбиталей определена структура поверхности пероксидов лития, натрия, калия, вычислены поверхностные энергии, парциальные плотности состояний, карты электронной плотности и атомные заряды. Установлено, что релаксация геометрии имеет характерную глубину до ~ 10 Å, а поверхностные состояния локализованы в верхних слоях на глубине до $\sim 2,5$ Å. Структурные Z- смещения атомов в результате релаксации поверхности не превышают $\sim 0,2$ Å. С увеличением атомного номера катиона поверхностная энергия пероксидов уменьшается, а стабильность поверхностей увеличивается.
- С помощью пакета CRYSTAL06 в базе ЛКАО в LDA и GGA приближениях теории функционала плотности для оксидов, пероксидов, надпероксидов, озонидов лития, натрия, калия, рубидия вычислены параметры кристаллической структуры, упругие постоянные, атомные заряды и

распределения деформационных плотностей. Установлено хорошее соответствие полученных характеристик с экспериментальными данными и расчетами других авторов. Показано, что условиям механической стабильности отвечают все кристаллы за исключением надпероксидов натрия, калия, рубидия. Химическая связь между катионом и анионом имеет ионный характер, в анионе - ковалентный π -типа. Отличительной особенностью её образования является переток заряда из связевой в торроидальную область с центром на ядре атома кислорода, ориентированную перпендикулярно линии О-О.

Углеводороды:

- Первопринципным методом теории функционала электронной плотности с градиентной аппроксимацией обменно-корреляционного потенциала в форме PBE программой PWscf пакета Quantum ESPRESSO с использованием схемы Grimme'06 проведен расчет кристаллической структуры нафталина и антрацена при гидростатическом давлении в интервале соответственно $0 \div 2$ и $0 \div 20$ ГПа и исследованы их уравнения состояния. Показано, что давлением объем уменьшается за счет пустот, а сами молекулы практически не деформируются. В модели Слэйтера – Дуглейла–Макдональда - Зубарева-Ващенко рассчитан параметр Грюнайзена, который с ростом давления уменьшается от равновесного значения 2,356 (антрацен), 3,226 (нафталин). С использованием уравнения Ми-Грюнайзена при дополнительном условии Ренкина-Гюгонно рассчитано ударное давление, которое повышается по сравнению с холодным при относительном сжатии V/V_0 меньшим чем 0,7.

Серебросодержащие соединения:

Первопринципный, полноэлектронный подход, реализованный в программе CRYSTAL06, а также метод псевдопотенциала в базисе псевдоатомных орбиталей использованы для исследования кристаллической структуры, упругих констант и объемных модулей, зонной структуры, плотности состояний для семейства нитридов серебра. Расчеты выполнялись в рамках теории функционала плотности с использованием локальных и градиентных функционалов для описания обмена и корреляции. Для общего типа кубической решетки все рассмотренные соединения могут быть расставлены в следующем порядке их относительной стабильности: AgN (структура каменной соли), AgN₂(флюорита), Ag₂N (куприта) и Ag₃N (анти-ReO₂). Показано, что AgN, AgN₂, Ag₂N являются металлами, а Ag₃N – полупроводником с запрещенной зоной в 0.25 эВ. Химическая связь в этих соединениях помимо металлической имеет ионную и ковалентную составляющие.

Взрывчатые вещества (азиды):

- Методами теории функционала локальной электронной плотности с градиентной аппроксимацией обменно-корреляционного потенциала программным кодом CRYSTAL06 исследованы структурные фазы азиды серебра. Показана возможность существования тетрагональных фаз симметрии $I4/mcm$ и $I41/a$, а также орторомбической, в которой структурными элементами являются практически не взаимодействующие между собой молекулы азота и цепочки из ковалентно связанных атомов серебра и азота. Упругие постоянные такого кристалла не удовлетворяют условиям механической стабильности. Ширина запрещенной зоны в нем равна 0,02 эВ.
- Методами теории функционала плотности в приближении локальной плотности и обобщенной градиентной аппроксимации обменно-корреляционных потенциалов в базисе линейной комбинации атомных орбиталей с помощью пакета CRYSTAL06 проведено исследование влияния деформаций кристаллической решетки на зонную структуру, плотность состояний и распределение электронной плотности азиды серебра. Установлено, что объемное гидростатическое и одноосное сжатие приводит к уменьшению межатомных расстояний, ширины запрещенной зоны, заряда аниона и катиона и тем самым способствует реакциям твердофазного разложения. Показано, что деформация решетки может приводить к образованию линейных молекул из атомов серебра и азиды.
- Упругие и электронные свойства кристаллического азиды серебра исследуются в рамках теории функционала локальной плотности с обобщенной градиентной аппроксимацией обменно-корреляционных потенциалов PW GGA, программным кодом CRYSTAL06 с использованием базисов линейной комбинации атомных орбиталей гауссова типа. Показано, что в условиях

- высокоскоростного деформирования, вызванного импульсным электронным и лазерным воздействием, образуются локализованные неравновесные области, в которых накапливается поступающая извне избыточная энергия и диссипация её, которая также происходит в ограниченном объеме может приводить к возбуждению электронной подсистемы, переходам электронов из занятых анионных в свободные катионные состояния и таким образом разрыву химических связей, т. е. инициированию реакции твердофазного разложения.
- Первопринципными методами теории функционала плотности в базисе локализованных орбиталей исследованы колебательные и термодинамические свойства различных фазовых состояний RT-, HP-NT-азида серебра. Для учета давления и температуры используется квазигармоническая модель Дебая. Термодинамическое состояние материала характеризуется потенциалами внутренней, свободной энергии, энтальпии и потенциалом Гиббса, а также их производными – теплоемкостью, энтропией и коэффициентом объемного теплового расширения. Показано, что принципиальная возможность фазовых переходов определяется из зависимостей потенциала Гиббса от объема и температуры. Из условия его непрерывности определена точка фазового перехода под давлением $V_{FT}=201.1 \text{ \AA}^3$, что соответствует сжимаемости в 1.03 раза. Также определена температура фазового перехода в моноклинную высокотемпературную NT-фазу. Этот переход следует классифицировать как переход первого рода. Переход под давлением не сопровождается существенным изменением параметров химической связи и его следует отнести к деформационным, а температурный – к реконструктивным.
 - Предлагается первопринципная процедура определения параметра Грюнайзена для кристалла, основанная на расчетах зависимости внешнего давления и колебательного спектра от объёма элементарной ячейки. В градиентном приближении теории функционала электронной плотности, в базисе линейной комбинации атомных орбиталей с помощью пакета CRYSTAL09 вычислены упругий и термодинамический параметры Грюнайзена азида серебра, которые уменьшаются с уменьшением объёма (увеличением давления). Равновесные значения параметра γ_0 для различных холодных уравнений состояния кристалла и используемых термодинамических моделей равны соответственно ~2.3 и 1.6, что больше, чем для других взрывчатых веществ.
 - Первопринципными методами теории функционала плотности в базисе локализованных орбиталей исследованы структурные, электронные, колебательные, термодинамические свойства и реакционная способность орторомбической, тетрагональной и моноклинной фаз азида серебра. Для адекватного учета давления и температуры используется квазигармоническая модель Дебая. Реакционная способность азида серебра анализируется с помощью энтальпийного и энтропийного факторов и констант равновесия. Показано, что для реакции твердофазного разложения при уменьшении объёма (увеличении давления) энтальпия уменьшается, а энтропийный фактор практически не изменяется, в результате чего при давлении 11.6 GPa становится принципиально осуществимой реакция прямой генерации дырок, а при давлении большим, чем 14.8 GPa она становится экзотермической. В качестве возможной модели реакционного очага рассматривается образование в ограниченной области кристалла метастабильной фазы динитрида нитрида серебра AgNN_2 .
 - Методом линейной комбинации атомных орбиталей с градиентной аппроксимацией обменно-корреляционного потенциала теории функционала электронной плотности программного пакета CRYSTAL09 проведено вычисление зависимостей полной энергии, давления и частот длинноволновых колебаний от объёма равновесной элементарной ячейки. На этой основе определяются термодинамические функции внутренней энергии, свободной энергии, свободной энтальпии, энтальпии, энтропии и теплоемкости, а также термодинамический параметр Грюнайзена. Показано, что средняя частота колебаний увеличивается с ростом давления, что приводит к увеличению внутренней и свободной энергий и энтальпий, убыванию энтропии и теплоёмкости. Параметр Грюнайзена для равновесного объёма равен ~1,6 и уменьшается с увеличением давления; тепловое давление в свою очередь изменяется в интервале 2...3 ГПа. Совокупность используемых методик и полученных результатов представляют собой реализацию первопринципного метода построения теплового уравнения состояния азида серебра.
 - Первопринципным методом линейной комбинации атомных орбиталей в полноэлектронном базисе с локальным, градиентным и гибридным потенциалами теории функционала плотности, реализованными в программном коде CRYSTAL09 проведено исследование соединений меди, серебра с азотом и обнаружена ранее не упоминавшаяся в литературе структурная фаза динитрид-нитрид N_2MN (M: Cu, Ag) с орторомбической структурой, пространственной группой симметрии $Ibam$ и четырьмя формульными единицами в примитивной ячейке. Структура является слоистой,

атомы металла находятся в линейном окружении из атомов азота N, тогда как два другие атомы азота связаны между собой в молекулу с малым отрицательным зарядом $\sim 0.02 e$. Объёмные упругие модули в N_2CuN , N_2AgN равны соответственно 4.3 и 6.6 GPa, а их производные по давлению 6.7 и 5.3. Энергетический спектр электронов представляет собой суперпозицию слабозаимодействующих молекулярных состояний N_2 и металлических MN. Ширина запрещенной зоны составляет величину $\sim 0.05 eV$. Оценки энергий энтальпий образования показывает, что N_2MN обладают большим запасом энергии и при разложении на металл и газообразный азот её выделение может составить величину порядка $8 eV/cell$, что даже несколько выше, чем в известных азидах металлов. Таким образом, новая структура динитрид-нитрид N_2MN сочетает в себе свойства молекулярных и полупроводниковых кристаллов: высокую сжимаемость и сильную механическую анизотропию, наличие в зонном спектре локализованных незанятых состояний, малую ширину запрещенной зоны. Во многом уникальные физические свойства могут обеспечить им применение, прежде всего, в качестве энергетических материалов. Источников химически чистого азота, полупроводниковом и оптическом материаловедении.