

Acta Crystallographica Section A

**Foundations of  
Crystallography**

ISSN 0108-7673

Editor: **D. Schwarzenbach**

## **Defect structure of the ionic conductor lithium nitride ( $\text{Li}_3\text{N}$ )**

**H. Schulz and K. H. Thiemann**

This electronic document was scanned from an archival copy of material deposited to accompany a paper published in an IUCr journal. In many cases the only accessible copy was a microfilm of a poor-quality original.

Li<sub>3</sub>N T=405°C

33919

H	K	L	F OBS	F CALC	H	K	L	F OBS	F CALC
5	0	0	0.52	0.51	3	3	2	0.64	0.63
4	0	0	0.78	0.80	3	3	3	0.45	0.43
3	0	0	3.25	3.27	5	0	3	0.32	0.32
2	0	0	2.57	2.53	4	1	3	0.58	0.58
1	0	0	5.63	5.69	3	2	3	0.37	0.38
5	1	0	0.37	0.33	4	0	3	0.40	0.41
4	1	0	1.18	1.18	3	1	5	0.42	0.43
5	1	0	1.01	0.98	2	2	3	0.94	0.93
2	1	0	1.63	1.65	3	0	3	1.10	1.10
1	1	0	7.00	6.94	2	1	3	0.38	0.37
4	2	0	0.46	0.44	2	0	3	0.36	0.34
3	2	0	0.68	0.69	1	1	3	1.63	1.63
2	2	0	2.46	2.44	1	0	3	0.31	0.29
5	3	0	0.78	0.78	0	0	3	2.15	2.15
5	1	1	0.30	0.31	4	0	4	0.56	0.54
4	2	1	0.34	0.34	3	0	4	1.15	1.16
3	3	1	0.66	0.63	2	0	4	1.19	1.17
5	0	1	0.39	0.36	1	0	4	1.50	1.49
4	1	1	0.89	0.90	0	0	4	2.46	2.44
3	2	1	0.38	0.41	4	1	4	0.53	0.52
4	0	1	0.35	0.37	5	1	4	0.65	0.63
3	1	1	0.39	0.38	2	1	4	0.94	0.95
2	2	1	1.61	1.60	1	1	4	1.84	1.85
3	0	1	2.00	2.02	3	2	4	0.46	0.46
2	1	1	0.25	0.23	2	2	4	0.94	0.95
2	0	1	0.38	0.32	4	0	5	0.26	0.30
1	1	1	3.89	3.39	3	1	5	0.30	0.32
1	0	1	1.40	1.41	2	2	5	0.44	0.45
0	0	1	7.99	7.93	3	0	5	0.47	0.43
5	0	2	0.46	0.46	3	0	5	0.37	0.37
4	0	2	0.73	0.76	2	1	5	0.37	0.39
3	0	2	2.39	2.40	1	1	5	0.62	0.61
2	0	2	1.95	1.92	1	0	5	0.35	0.37
1	0	2	2.99	2.99	0	0	5	0.61	0.65
0	0	2	7.09	7.03	3	0	6	0.44	0.47
4	1	2	0.95	0.94	2	0	6	0.57	0.53
3	1	2	0.91	0.89	1	0	6	0.68	0.70
2	1	2	1.39	1.41	0	0	6	0.84	0.84
1	1	2	4.54	4.55	2	1	6	0.48	0.43
4	2	2	0.41	0.40	1	1	6	0.68	0.68
3	2	2	0.63	0.64	0	0	7	0.31	0.27
2	2	2	1.85	1.34					

Li<sub>3</sub>N T = -40°C

H	K	L	F	OBS	F	CALC	H	K	L	F	OBS	F	CALC
0	0	1		8.40		8.41	2	1	4		1.35		1.35
0	0	2		7.95		7.91	2	1	5		0.51		0.50
0	0	3		3.03		2.98	2	1	6		0.97		0.96
0	0	4		3.61		3.60	2	1	7		0.48		0.48
0	0	5		1.37		1.35	3	1	0		1.37		1.37
0	0	6		1.73		1.71	3	1	1		0.26		0.25
0	0	7		0.75		0.75	3	1	2		1.29		1.28
0	0	8		0.83		0.85	3	1	3		0.41		0.43
1	0	0		5.78		5.75	3	1	4		1.10		1.09
1	0	1		1.30		1.30	3	1	5		0.54		0.51
1	0	2		3.14		3.09	3	1	6		0.31		0.80
1	0	3		0.10		0.10	3	1	7		0.41		0.45
1	0	4		1.76		1.76	4	1	0		2.19		2.20
1	0	5		0.40		0.43	4	1	1		1.51		1.52
1	0	6		1.18		1.17	4	1	2		1.91		1.90
1	0	7		0.52		0.51	4	1	3		1.18		1.17
1	0	8		0.67		0.72	4	1	4		1.52		1.32
2	0	0		2.81		2.78	4	1	5		0.76		0.78
2	0	1		0.04		0.11	4	1	6		0.77		0.80
2	0	2		2.16		2.16	5	1	0		0.80		0.79
2	0	3		0.18		0.17	5	1	1		0.48		0.48
2	0	4		1.52		1.51	5	1	2		0.76		0.76
2	0	5		0.46		0.48	5	1	3		0.47		0.48
2	0	6		1.07		1.06	5	1	4		0.65		0.65
2	0	7		0.51		0.50	6	1	0		0.57		0.59
3	0	0		4.29		4.35	6	1	1		0.44		0.44
3	0	1		2.55		2.58	6	1	2		0.54		0.56
3	0	2		3.52		3.55	2	2	0		3.55		3.55
3	0	3		1.77		1.76	2	2	1		2.19		2.19
3	0	4		2.19		2.20	2	2	2		2.96		2.96
3	0	5		1.07		1.05	2	2	3		1.56		1.59
3	0	6		1.20		1.20	2	2	4		1.89		1.90
3	0	7		0.63		0.62	2	2	5		0.99		0.97
4	0	0		1.22		1.21	2	2	6		1.08		1.03
4	0	1		0.32		0.33	2	2	7		0.57		0.53
4	0	2		1.16		1.13	3	2	0		1.10		1.12
4	0	3		0.47		0.46	3	2	1		0.41		0.42
4	0	4		1.01		0.99	3	2	2		1.07		1.06
4	0	5		0.52		0.51	3	2	3		0.48		0.48
4	0	6		0.73		0.74	3	2	4		0.92		0.91
5	0	0		0.94		0.93	3	2	5		0.51		0.50
5	0	1		0.47		0.46	3	2	6		0.66		0.68
5	0	2		0.90		0.39	4	2	0		0.88		0.85
5	0	3		0.50		0.50	4	2	1		0.49		0.48
5	0	4		0.78		0.77	4	2	2		0.83		0.82
5	0	5		0.49		0.47	4	2	3		0.50		0.49
6	0	0		1.19		1.19	4	2	4		0.71		0.71
6	0	1		0.94		0.94	4	2	5		0.46		0.45
6	0	2		1.05		1.07	5	2	0		1.06		1.07
6	0	3		0.77		0.76	5	2	1		0.85		0.86
1	1	0		7.68		7.68	5	2	2		0.95		0.96
1	1	1		4.34		4.33	5	2	3		0.68		0.70
1	1	2		5.57		5.61	3	3	0		1.71		1.68
1	1	3		2.39		2.39	3	3	1		1.25		1.23
1	1	4		3.00		2.98	3	3	2		1.50		1.48
1	1	5		1.25		1.26	3	3	3		0.99		0.98
1	1	6		1.51		1.51	3	3	4		1.06		1.06
1	1	7		0.71		0.70	3	3	5		0.65		0.67
1	1	8		0.72		0.77	4	3	0		0.68		0.68
2	1	0		1.97		1.98	4	3	1		0.48		0.47
2	1	1		0.10		0.05	4	3	2		0.64		0.65
2	1	2		1.71		1.72	4	3	3		0.42		0.45
2	1	3		0.27		0.27							

Li<sub>3</sub>N

T = -120°C

H	K	L	F OBS	F CALC	H	K	L	F OBS	F CALC
6	1	0	0.65	0.68	3	1	4	1.18	1.16
6	1	1	0.43	0.48	3	1	5	0.50	0.53
6	1	2	0.62	0.65	3	1	6	0.91	0.90
5	2	0	1.23	1.23	3	1	7	0.47	0.50
5	2	1	0.97	0.96	2	2	0	3.76	3.72
5	2	2	1.11	1.12	2	2	1	2.27	2.26
5	2	3	0.78	0.81	2	2	2	3.14	3.16
4	3	0	0.76	0.77	2	2	3	1.70	1.72
4	3	1	0.43	0.50	2	2	4	2.13	2.13
4	3	2	0.76	0.74	2	2	5	1.18	1.13
4	3	3	0.51	0.49	2	2	6	1.27	1.28
6	0	0	1.36	1.35	2	2	7	0.70	0.72
6	0	1	1.03	1.04	3	0	0	4.40	4.51
6	0	2	1.27	1.23	3	0	1	2.60	2.65
6	0	3	0.86	0.88	3	0	2	3.73	3.75
5	1	0	0.86	0.88	3	0	3	1.92	1.90
5	1	1	0.55	0.50	3	0	4	2.44	2.43
5	1	2	0.85	0.85	3	0	5	1.20	1.22
5	1	3	0.50	0.51	3	0	6	1.41	1.41
5	1	4	0.76	0.75	3	0	7	0.75	0.76
4	2	0	0.97	0.95	2	1	0	2.03	2.04
4	2	1	0.51	0.49	2	1	1	0.16	0.01
4	2	2	0.94	0.91	2	1	2	1.75	1.77
4	2	3	0.56	0.52	2	1	3	0.26	0.25
4	2	4	0.80	0.80	2	1	4	1.41	1.40
4	2	5	0.46	0.50	2	1	5	0.49	0.50
3	3	0	1.87	1.85	2	1	6	1.02	1.05
3	3	1	1.34	1.33	2	1	7	0.57	0.55
3	3	2	1.69	1.56	2	0	0	2.85	2.65
3	3	3	1.10	1.10	2	0	1	0.03	0.03
3	3	4	1.25	1.24	2	0	2	2.20	2.19
3	3	5	0.76	0.77	2	0	3	0.09	0.12
5	0	0	1.07	1.02	2	0	4	1.57	1.55
5	0	1	0.52	0.47	2	0	5	0.45	0.47
5	0	2	0.99	0.98	2	0	6	1.13	1.13
5	0	3	0.50	0.51	2	0	7	0.57	0.54
5	0	4	0.88	0.84	1	1	0	7.77	7.73
5	0	5	0.57	0.51	1	1	1	4.40	4.39
4	1	0	2.39	2.38	1	1	2	5.75	5.77
4	1	1	1.59	1.61	1	1	3	2.53	2.55
4	1	2	2.10	2.09	1	1	4	3.25	3.24
4	1	3	1.27	1.29	1	1	5	1.47	1.45
4	1	4	1.53	1.52	1	1	6	1.76	1.74
4	1	5	0.91	0.91	1	1	7	0.87	0.86
4	1	6	0.94	0.98	1	1	8	0.91	0.95
3	2	0	1.18	1.21	1	0	0	5.77	5.73
3	2	1	0.40	0.40	1	0	1	1.29	1.28
3	2	2	1.14	1.14	1	0	2	3.12	3.10
3	2	3	0.50	0.43	1	0	3	0.10	0.05
3	2	4	1.00	0.99	1	0	4	1.77	1.77
3	2	5	0.53	0.53	1	0	5	0.41	0.40
3	2	6	0.75	0.77	1	0	6	1.25	1.24
4	0	0	1.27	1.29	1	0	7	0.59	0.55
4	0	1	0.34	0.31	1	0	8	0.80	0.83
4	0	2	1.22	1.25	0	0	1	8.48	8.47
4	0	3	0.42	0.45	0	0	2	8.05	8.06
4	0	4	1.06	1.07	0	0	3	3.24	3.17
4	0	5	0.50	0.53	0	0	4	3.82	3.87
4	0	6	0.82	0.83	0	0	5	1.60	1.56
3	1	0	1.47	1.45	0	0	6	1.98	1.95
3	1	1	0.77	0.72	0	0	7	0.87	0.91
3	1	2	1.74	1.35	0	0	8	1.05	1.04
3	1	3	0.39	0.41					

Li<sub>3</sub>N

T = +20°C

H	K	L	F OBS	F CALC	H	K	L	F OBS	F CALC
0	0	1	7.80	7.80	3	1	0	1.32	1.31
0	0	2	7.38	7.54	3	1	1	0.26	0.26
0	0	3	2.86	2.82	3	1	2	1.24	1.22
0	0	4	3.40	3.37	3	1	3	0.44	0.44
0	0	5	1.21	1.21	3	1	4	1.03	1.02
0	0	6	1.56	1.52	3	1	5	0.51	0.49
0	0	7	0.64	0.64	3	1	6	0.71	0.72
0	0	8	0.71	0.72	3	1	7	0.41	0.40
1	0	0	5.65	5.60	4	1	0	2.06	2.04
1	0	1	1.31	1.31	4	1	1	1.43	1.43
1	0	2	3.05	3.08	4	1	2	1.75	1.74
1	0	3	0.14	0.15	4	1	3	1.07	1.07
1	0	4	1.73	1.73	4	1	4	1.16	1.16
1	0	5	0.44	0.44	4	1	5	0.66	0.68
1	0	6	1.12	1.10	4	1	6	0.65	0.68
1	0	7	0.47	0.47	5	1	0	0.72	0.71
1	0	8	0.63	0.63	5	1	1	0.45	0.45
2	0	1	0.19	0.14	5	1	2	0.67	0.68
2	0	2	2.13	2.13	5	1	3	0.44	0.45
2	0	3	0.16	0.21	5	1	4	0.55	0.58
2	0	4	1.48	1.47	2	2	0	3.38	3.39
2	0	5	0.45	0.48	2	2	1	2.11	2.11
2	0	6	0.99	0.98	2	2	2	2.79	2.79
2	0	7	0.46	0.46	2	2	3	1.47	1.48
2	0	0	2.79	2.75	2	2	4	1.72	1.72
3	0	0	4.28	4.19	2	2	5	0.88	0.87
3	0	1	2.51	2.50	2	2	6	0.94	0.93
3	0	2	3.39	3.37	2	2	7	0.49	0.49
3	0	3	1.66	1.65	3	2	0	1.04	1.05
3	0	4	2.02	2.01	3	2	1	0.41	0.41
3	0	5	0.94	0.94	3	2	2	0.98	0.99
3	0	6	1.03	1.04	3	2	3	0.47	0.47
3	0	7	0.54	0.53	3	2	4	0.81	0.83
4	0	0	1.18	1.14	3	2	5	0.47	0.47
4	0	1	0.33	0.34	3	2	6	0.55	0.59
4	0	2	1.10	1.11	4	2	0	0.77	0.78
4	0	3	0.46	0.46	4	2	1	0.48	0.45
4	0	4	0.93	0.92	4	2	2	0.76	0.74
4	0	5	0.50	0.48	4	2	3	0.49	0.46
4	0	6	0.64	0.65	4	2	4	0.62	0.63
5	0	0	0.88	0.85	4	2	5	0.39	0.41
5	0	1	0.48	0.45	5	2	0	0.91	0.94
5	0	2	0.86	0.81	5	2	1	0.75	0.77
5	0	3	0.50	0.47	5	2	2	0.78	0.84
5	0	4	0.72	0.69	5	2	3	0.58	0.62
5	0	5	0.41	0.43	3	3	0	1.53	1.53
1	1	0	7.39	7.39	3	3	1	1.15	1.14
1	1	1	4.22	4.23	3	3	2	1.32	1.34
1	1	2	5.36	5.40	3	3	3	0.88	0.83
1	1	3	2.25	2.25	3	3	4	0.91	0.92
1	1	4	2.76	2.77	3	3	5	0.53	0.58
1	1	5	1.14	1.13	4	3	0	0.61	0.60
1	1	6	1.34	1.33	4	3	1	0.42	0.43
1	1	7	0.61	0.60	4	3	2	0.58	0.58
1	1	8	0.65	0.65	4	3	3	0.42	0.41
2	1	0	1.91	1.93	6	0	0	1.09	1.06
2	1	1	0.10	0.08	6	0	1	0.83	0.85
2	1	2	1.66	1.68	6	0	2	0.94	0.94
2	1	3	0.28	0.30	6	0	3	0.64	0.67
2	1	4	1.29	1.29	6	1	0	0.52	0.51
2	1	5	0.49	0.49	6	1	1	0.40	0.39
2	1	6	0.88	0.88	6	1	2	0.49	0.49
2	1	7	0.45	0.44					

Li<sub>3</sub>N T=120°C

H	K	L	F OBS	F CALC	H	K	L	F OBS	F CALC
0	0	1	8.18	8.19	1	1	3	2.08	2.09
1	0	1	1.32	1.33	2	2	3	1.34	1.34
2	0	1	0.20	0.18	3	2	3	0.47	0.47
3	0	1	2.40	2.41	3	0	4	1.76	1.77
4	0	1	0.36	0.37	3	1	4	0.94	0.94
5	0	1	0.47	0.45	2	2	4	1.50	1.50
4	1	1	1.31	1.31	2	1	4	1.22	1.22
3	1	1	0.32	0.31	2	0	4	1.43	1.42
2	1	1	0.13	0.13	1	0	4	1.70	1.70
1	1	1	4.19	4.21	1	1	4	2.54	2.53
2	2	1	2.02	2.01	0	0	4	3.14	3.13
3	2	1	0.40	0.44	0	0	5	1.04	1.03
4	1	2	1.52	1.52	1	0	5	0.42	0.43
4	0	2	1.01	1.02	2	0	5	0.47	0.47
3	0	2	3.14	3.14	3	0	5	0.81	0.80
3	1	2	1.16	1.14	2	1	5	0.49	0.48
3	2	2	0.89	0.90	1	1	5	0.95	0.97
2	2	2	2.57	2.55	1	0	6	1.01	1.02
2	1	2	1.61	1.62	0	0	6	1.33	1.33
2	0	2	2.09	2.09	1	0	0	5.69	5.74
1	0	2	3.06	3.07	2	0	0	2.70	2.69
1	1	2	5.24	5.24	3	0	0	4.00	3.99
0	0	2	7.60	7.58	4	0	0	1.05	1.06
0	0	3	2.67	2.65	5	0	0	0.77	0.76
1	0	3	0.20	0.19	4	1	0	1.82	1.82
2	0	3	0.26	0.25	3	1	0	1.23	1.22
3	0	3	1.51	1.51	2	1	0	1.86	1.86
4	0	3	0.46	0.47	1	1	0	7.46	7.44
3	1	3	0.46	0.46	2	2	0	3.18	3.17
2	1	3	0.34	0.34	3	2	0	0.95	0.95

Li<sub>3</sub>N T=315°C

H	K	L	F OBS	F CALC	H	K	L	F OBS	F CALC
5	0	0	0.62	0.57	2	2	2	2.10	2.10
4	0	0	0.87	0.89	3	3	2	0.81	0.80
3	0	0	3.54	3.55	3	3	3	0.55	0.54
2	0	0	2.60	2.59	5	0	3	0.38	0.37
1	0	0	5.65	5.70	4	1	3	0.72	0.70
5	1	0	0.46	0.46	3	2	3	0.41	0.42
4	1	0	1.39	1.41	4	0	3	0.43	0.44
3	1	0	1.08	1.06	3	1	3	0.45	0.45
2	1	0	1.71	1.72	2	2	3	1.08	1.03
1	1	0	7.22	7.16	3	0	3	1.26	1.25
4	2	0	0.54	0.52	2	1	3	0.38	0.33
3	2	0	0.77	0.78	2	0	3	0.34	0.32
2	2	0	2.73	2.71	1	1	3	1.79	1.80
3	3	0	0.97	0.96	1	0	3	0.29	0.27
5	1	1	0.34	0.35	0	0	3	2.34	2.32
4	2	1	0.38	0.38	4	0	4	0.65	0.65
3	3	1	0.78	0.77	3	0	4	1.37	1.37
5	0	1	0.42	0.40	2	0	4	1.28	1.28
4	1	1	1.04	1.05	1	0	4	1.60	1.59
3	2	1	0.41	0.43	0	0	4	2.70	2.69
4	0	1	0.37	0.39	4	1	4	0.68	0.67
3	1	1	0.37	0.35	3	1	4	0.76	0.76
2	2	1	1.77	1.76	2	1	4	1.06	1.06
3	0	1	2.17	2.13	1	1	4	2.10	2.09
2	1	1	0.19	0.22	3	2	4	0.56	0.56
2	0	1	0.29	0.26	2	2	4	1.13	1.12
1	1	1	4.01	4.03	4	0	5	0.36	0.36
1	0	1	1.37	1.37	3	1	5	0.38	0.37
0	0	1	8.07	8.03	2	2	5	0.53	0.53
5	0	2	0.57	0.55	3	0	5	0.60	0.59
4	0	2	0.82	0.85	2	1	5	0.42	0.42
3	0	2	2.66	2.67	2	0	5	0.42	0.44
2	0	2	2.01	1.79	1	1	5	0.71	0.73
1	0	2	3.03	3.03	1	0	5	0.40	0.41
0	0	2	7.30	7.25	0	0	5	0.70	0.73
4	1	2	1.13	1.14	2	0	6	0.68	0.70
3	1	2	1.01	0.73	1	0	6	0.83	0.83
2	1	2	1.48	1.49	0	0	6	1.01	1.01
1	1	2	4.82	4.32	2	1	6	0.58	0.60
4	2	2	0.47	0.47	1	1	6	0.35	0.34
3	2	2	0.72	0.73	0	0	7	0.36	0.35