

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

к статье П.Г. Гагарин, А.В. Гуськов, А.В. Хорошилов, В.Н. Гуськов, О.Н. Кондратьева, М.А. Рюмин, Г.Е. Никифорова, К.С. Гавричев
«Термодинамические свойства титанатов иттрия, $Y_2Ti_2O_7$, и европия, $Eu_2Ti_2O_7$, в области температур 7-1800 К»

Рисунки

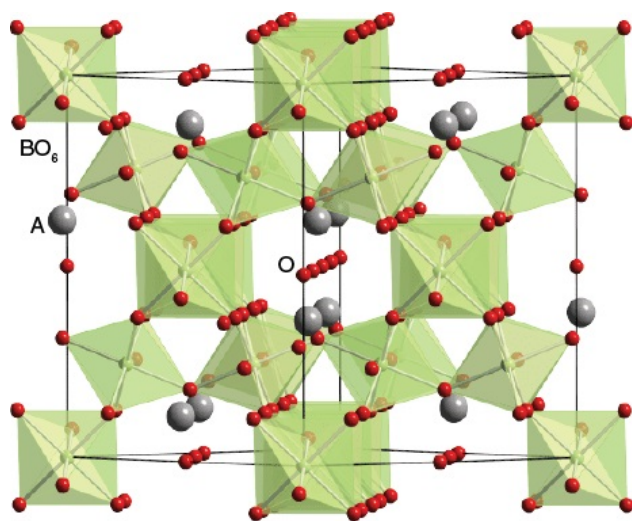


Рис.П1. Кристаллическая решетка пирохлора (<https://www.chemtube3d.com/SS-Pyrochlore/>)

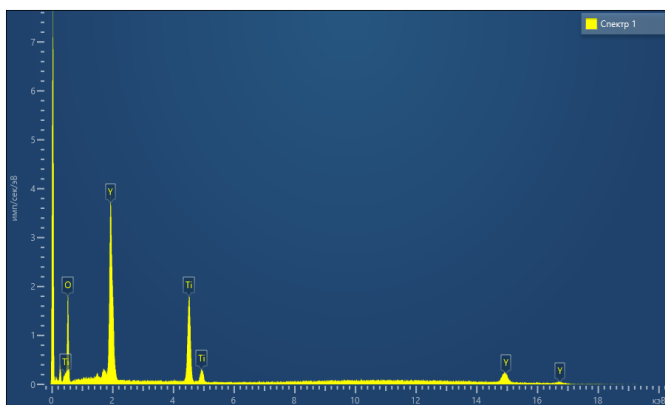


Рис.П2а. EDX-спектр образца $Y_2Ti_2O_7$.

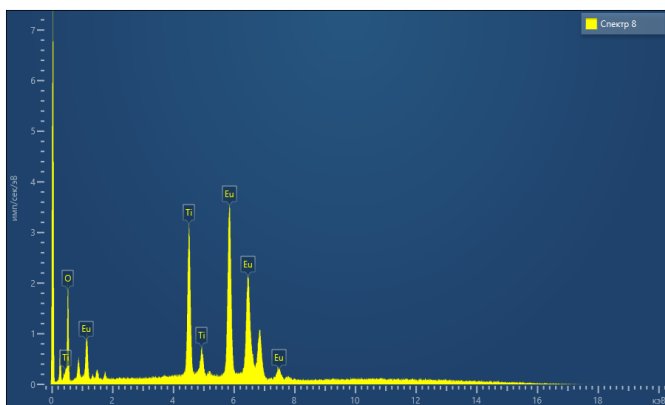


Рис.П2б EDX-спектр образца $Eu_2Ti_2O_7$.

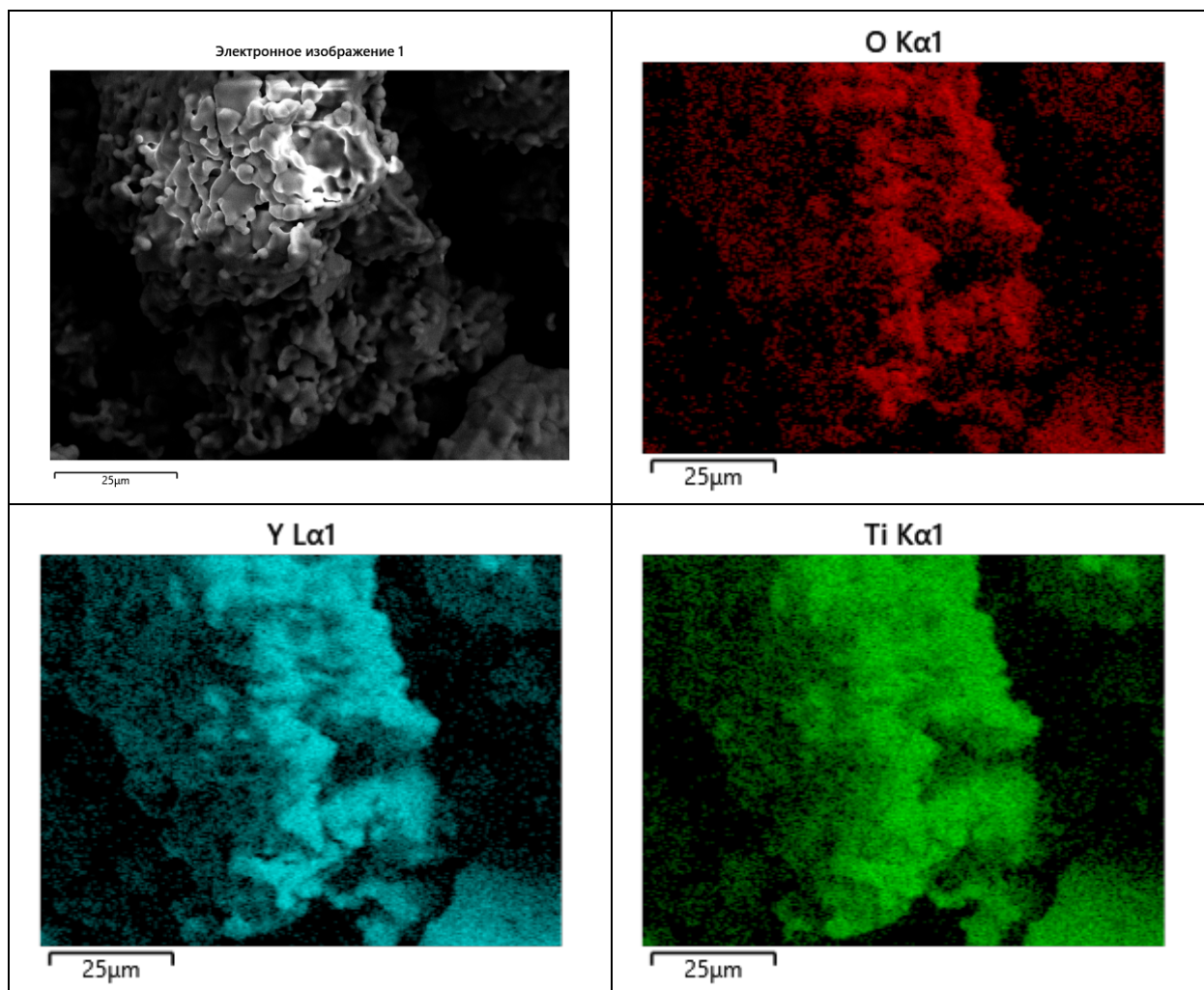


Рис.П3а-d. Результаты картирования образца $Y_2Ti_2O_7$

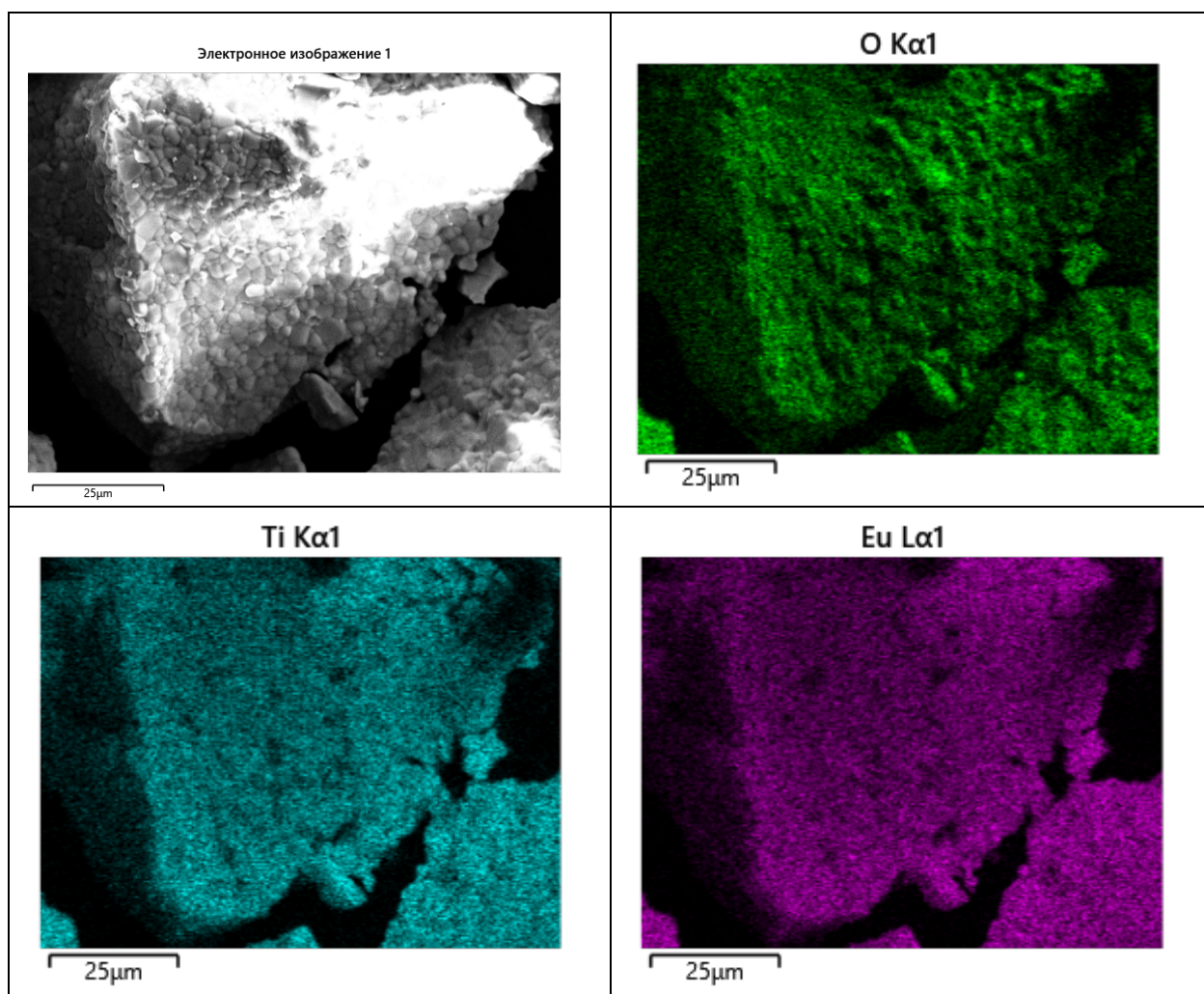


Рис.4а-d. Результаты картирования образца $\text{Eu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$

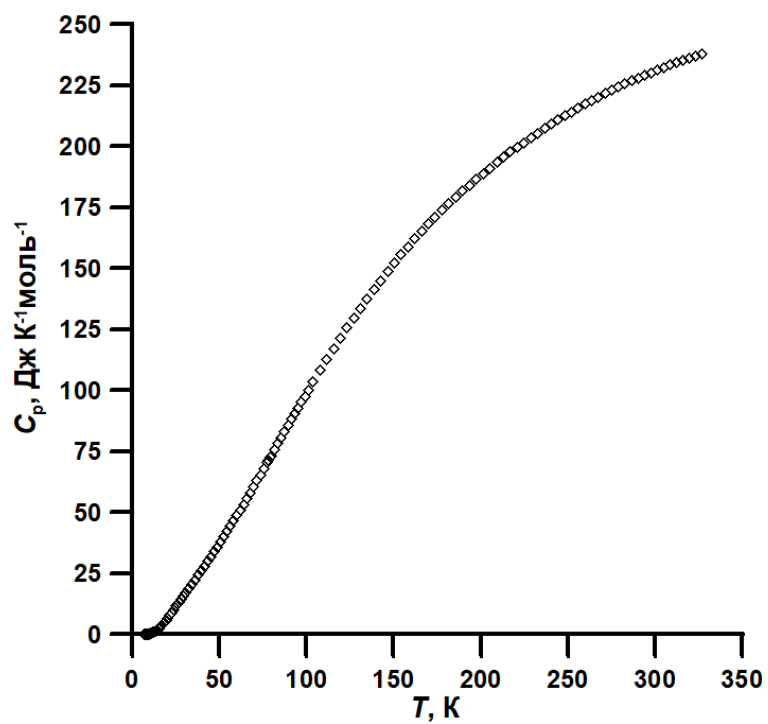
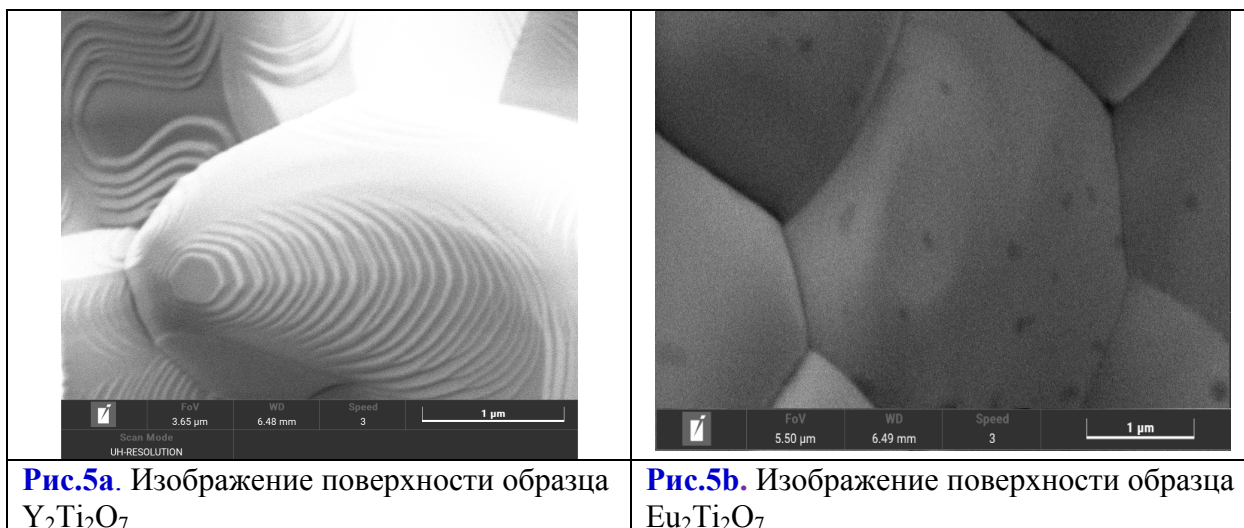


Рис.116. Теплоемкость титаната европия в области низких температур.

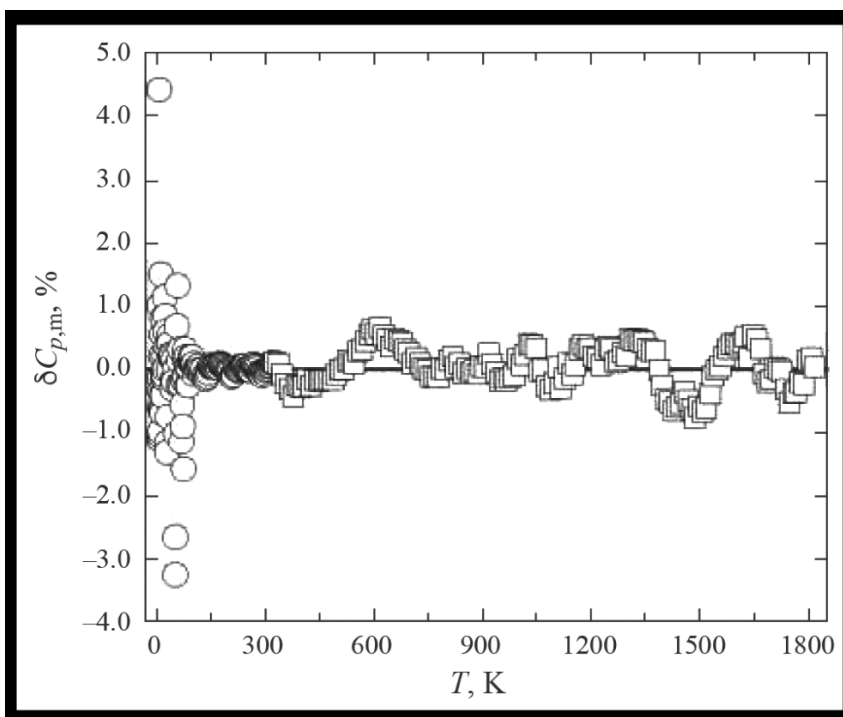


Рис.П7. Отклонение экспериментальных данных по теплоемкости $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ от сглаженных $\delta C_{p,m}, \% = 100 \times (C_{\text{exp}} - C_{\text{smo}}) / C_{\text{exp}}$: $\circ$ – адиабатическая калориметрия, $\square$ – дифференциальная сканирующая калориметрия.

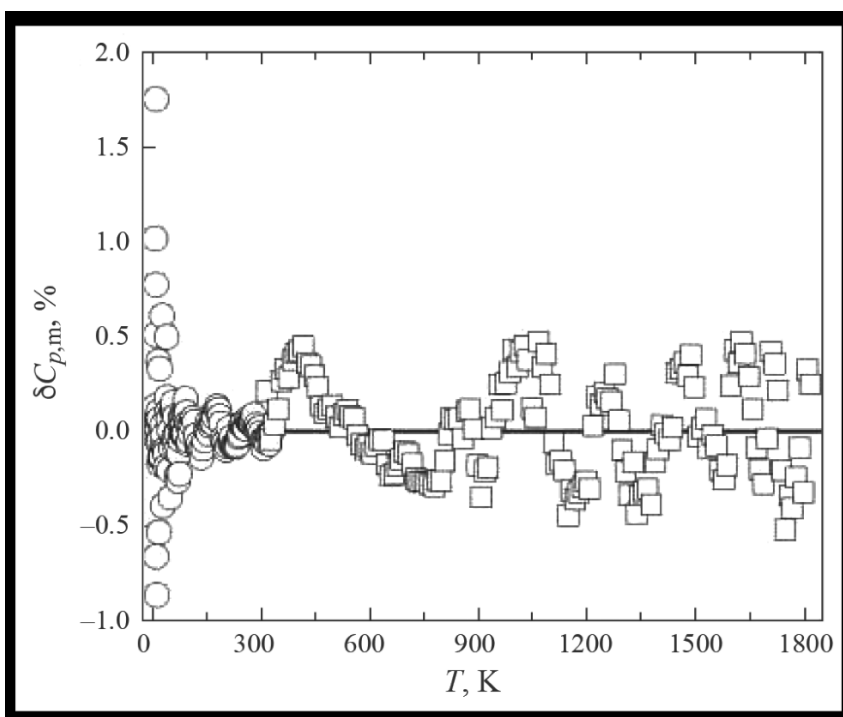


Рис.П8. Отклонение экспериментальных точек от сглаженных с помощью полиномов значений теплоемкости $\text{Eu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ $\delta C_{p,m}, \% = 100 \times (C_{\text{exp}} - C_{\text{smo}}) / C_{\text{exp}}$: $\circ$ – адиабатическая калориметрия, $\square$ – дифференциальная сканирующая калориметрия.

Таблицы

Таблица П1. Теплоемкость $Y_2Ti_2O_7$ и $Eu_2Ti_2O_7$, определенная методом релаксационной калориметрии (T в К, C_p в Дж $K^{-1}mol^{-1}$)

T	C_p	T	C_p	T	C_p	T	C_p
$Y_2Ti_2O_7$							
40.39	21.07	24.18	6.109	14.67	0.850	8.810	0.0716
36.56	17.04	21.98	4.509	13.31	0.517	7.200	0.0312
33.01	13.66	19.86	3.070	12.00	0.293		
29.78	10.73	17.97	2.061	10.90	0.190		
26.83	8.348	16.25	1.335	9.77	0.126		
$Eu_2Ti_2O_7$							
36.56	23.50	21.93	9.032	13.27	1.592	8.01	0.1362
33.01	19.93	19.88	6.656	12.03	1.024	7.23	0.0865
29.79	16.66	17.96	4.816	10.90	0.6330		
26.87	13.86	16.22	3.445	9.81	0.3738		
24.27	11.37	14.69	2.400	8.86	0.2249		

Таблица П2. Экспериментальные данные по теплоемкости титаната иттрия $Y_2Ti_2O_7$ в Дж $K^{-1}mol^{-1}$

T, K	C_p	T, K	C_p	T, K	C_p	T, K	C_p
Серия 1		38.83	19.59	92.74	76.62	212.78	174.0
6.81	0.03795	40.63	21.39	94.69	78.59	217.07	176.6
7.21	0.04620	42.44	23.09	96.64	80.69	221.02	178.7
7.65	0.05775	44.27	24.96	98.59	82.62	224.96	180.8
8.07	0.07095	46.11	26.88	100.55	84.64	228.90	182.8
8.50	0.08844	47.95	28.70	103.47	87.49	232.28	184.5
8.93	0.1089	Серия 2		107.34	91.48	236.18	186.5
9.37	0.1353	46.27	26.94	111.19	95.36	240.06	188.4
9.81	0.1650	50.23	30.92	115.05	99.21	243.95	190.2
10.52	0.2228	52.07	32.89	118.92	102.9	247.83	191.9
11.37	0.3152	53.89	34.72	122.80	106.6	251.69	193.6
12.17	0.4129	55.75	36.77	126.68	110.3	255.56	195.3
13.01	0.5494	57.65	38.85	130.57	113.8	259.42	196.9
13.85	0.7096	59.55	40.67	134.46	117.3	263.26	198.6
14.70	0.9218	61.45	42.76	138.35	120.8	267.09	200.2
15.55	1.177	63.36	44.87	142.25	124.3	270.92	201.7
16.40	1.497	65.27	46.73	146.15	127.8	274.72	203.1
17.27	1.837	67.18	48.67	150.05	131.1	278.52	204.4
18.13	2.235	69.10	50.61	153.95	134.2	282.30	205.7
19.00	2.684	71.03	52.90	157.85	137.4	286.07	207.0
19.88	3.154	72.96	55.09	161.76	140.4	289.81	208.2
20.98	3.808	74.87	57.23	165.66	143.4	293.54	209.5
22.24	4.699	76.80	59.23	169.56	146.3	297.26	210.8
23.51	5.604	78.74	61.53	173.47	149.2	300.95	211.8
24.80	6.592	Серия 3		177.38	152.0	304.63	213.1
26.10	7.642	77.75	60.50	181.28	154.7	308.29	214.2
27.42	8.641	79.13	62.07	185.18	157.3	311.92	215.3

28.75	9.785	81.09	64.17	189.08	159.8	315.53	216.3
30.08	11.04	83.02	66.17	193.11	162.4	319.12	217.3
31.68	12.61	84.96	68.07	197.07	164.8	322.69	218.2
33.50	14.41	86.90	70.13	201.01	167.2	326.24	219.1
35.26	16.11	88.85	72.38	204.94	169.5		
37.04	17.82	90.79	74.53	208.86	171.8		

Таблица ПЗ. Экспериментальные данные по теплоемкости титаната европия $\text{Eu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ в Дж $\text{K}^{-1}\text{моль}^{-1}$

T, K	C_p	T, K	C_p	T, K	C_p	T, K	C_p
Серия 1		37.60	24.46	95.01	93.01	217.02	197.8
6.71	0.06375	39.41	26.25	96.96	95.31	220.91	199.7
7.12	0.07883	41.24	28.13	98.91	97.72	224.73	201.7
7.55	0.1024	43.08	30.05	100.86	100.2	228.65	203.6
7.97	0.1377	44.92	31.92	103.78	103.7	232.61	205.5
8.40	0.1787	46.77	33.97	107.66	108.3	236.50	207.4
8.83	0.2290	48.63	35.87	111.51	112.8	240.39	209.2
9.26	0.3019	50.50	38.02	115.38	117.2	244.28	211.0
9.69	0.3779	52.40	40.22	119.25	121.5	248.16	212.7
10.12	0.4740	54.29	42.37	123.12	125.6	252.03	214.3
10.82	0.6575	56.18	44.55	127.00	129.8	255.90	215.8
11.67	0.9214	58.07	46.66	130.89	133.7	259.76	217.5
12.44	1.228	59.96	48.89	134.78	137.6	263.60	219.0
13.28	1.604	61.86	51.19	138.67	141.4	267.44	220.4
14.11	2.041	63.77	53.43	142.57	145.2	271.27	221.8
14.95	2.536	65.68	55.85	146.48	148.8	275.07	223.2
15.80	3.109	67.59	58.12	150.37	152.4	278.87	224.6
16.66	3.722	69.50	60.51	154.26	155.6	282.66	225.7
17.52	4.385	71.44	63.05	158.17	159.0	286.43	227.0
18.39	5.146	73.37	65.43	162.08	162.2	290.18	228.1
19.27	5.932	75.27	67.98	165.98	165.3	293.92	229.3
20.15	6.706	77.20	70.52	169.89	168.3	297.64	230.4
21.32	7.823	79.13	72.96	173.80	171.3	301.34	231.4
22.62	9.095	Серия 2		177.70	174.1	305.03	232.3
23.88	10.35	78.05	71.55	181.62	176.8	308.69	233.5
25.19	11.76	79.46	73.40	185.52	179.4	312.33	234.4
26.51	13.03	81.41	75.86	189.42	181.8	315.95	235.5
27.86	14.34	83.35	78.28	193.45	184.2	319.54	236.4
29.20	15.75	85.29	80.75	197.41	186.6	323.12	237.2
30.55	17.13	87.23	83.21	201.34	188.9	326.67	238.2
32.19	18.78	89.17	85.74	205.27	191.3		
34.02	20.65	91.12	88.26	209.20	193.7		
35.80	22.44	93.07	90.63	213.11	195.7		

Таблица П4. Коэффициенты полиномов для описания теплоемкости $Y_2Ti_2O_7$, $C_p = \sum_0^j A * T^j$ (в Дж К⁻¹моль⁻¹)

j	0 - 7.87 K	7.87 - 19.56 K	19.56 - 45.90 K	45.90 - 77.80 K	77.80 - 308.00 K	308.00 - 817.00 K
-2						$-3.6345 \cdot 10^6$
0		$-1.52383 \cdot 10^4$	$2.4651 \cdot 10_2$	$3.9339 \cdot 10^2$	$2.3018 \cdot 10^2$	$2.4200 \cdot 10^2$
1		$-2.66722 \cdot 10^4$	$1.6367 \cdot 10_2$	$3.5928 \cdot 10^2$	$2.2581 \cdot 10$	$3.3787 \cdot 10^{-2}$
2		$-1.92650 \cdot 10^4$	$3.1713 \cdot 10$	$1.1853 \cdot 10^2$	$-2.0121 \cdot 10^2$	
3		$-7.36430 \cdot 10^3$	1.3979	$1.42390 \cdot 10$	$-2.4656 \cdot 10^2$	
4	$1.69291 \cdot 10^{-5}$	$-1.57355 \cdot 10^3$			- 200.977062 6	
5		$-1.78375 \cdot 10^2$			- 94.2783462 2	
6		-8.38713			- 17.6809689	

Таблица П5. Коэффициенты полиномов для описания теплоемкости $Eu_2Ti_2O_7$ $C_p = \sum_0^j A * T^j$ (в Дж К⁻¹моль⁻¹)

j	0-8.25 K	8.25-20.01 K	20.01-59.25 K	59.25-320.40 K	320.40-1817.00 K
-2					-3622420
0		-12078	686.07	250.89	260.476
1		-17748	825.08	47.547	0.0358683
2		-9844.0	407.55	-71.394	
3		-2401.9	95.304	61.282	
4		-199.17	8.6534	270.4157154	
5	$4.27745 \cdot 10^{-6}$	-9.7029		374.65	
6		-12.508		259.41	
7		-3.2171		88.152	
8		-0.23735		11.74106484	