

Общероссийский математический портал

Б. К. Касенов, С. Т. Едильбаева, Ш. Б. Касенова, Ж. И. Сагинтаева,
С. Ж. Давренбеков, Ж. К. Тухметова, М. А. Акубаева, Термодина-
мическое исследование манганитов $\text{NdMe}_3\text{Sr}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}$ (M–Li, Na, K) в
интервале 298.15–673 К, *ТВТ*, 2010, том 48, выпуск 2, 217–223

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы
прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.86

19 января 2025 г., 03:12:34



УДК 536.7+546.65+546.711/.717

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАНГАНИТОВ NdMe₃Sr₃Mn₄O₁₂ (Me – Li, Na, K) В ИНТЕРВАЛЕ 298.15–673 К

© 2010 г. Б. К. Касенов, С. Т. Едильбаева, Ш. Б. Касенова, Ж. И. Сагинтаева,
С. Ж. Давренбеков, Ж. К. Тухметова, М. А. Акубаева

АО «Научно-производственный центр «Фитохимия»»

Министерства образования и науки Республики Казахстан, г. Караганда

Поступила в редакцию 01.04.2008 г.

Высокотемпературным синтезом по керамической технологии получены новые манганиты NdMe₃Sr₃Mn₄O₁₂ (Me – Li, Na, K). Методом порошковой рентгенографии установлено, что соединения кристаллизуются в тетрагональной сингонии, определены параметры их кристаллических решеток. Методом динамической калориметрии в интервале 298.15–673 К определены теплоемкости манганитов, при этом выявлено наличие фазовых переходов II рода. С учетом фазовых переходов выведены уравнения, описывающие зависимость $C_p^0 \sim f(T)$, в интервале 298.15–673 К. При 303–503 К исследованы температурные зависимости диэлектрической проницаемости и электросопротивления манганитов, которые также подтверждают наличие в них фазовых переходов II рода.

ВВЕДЕНИЕ

Твердофазные материалы практически можно считать основой современной электронной техники: СВЧ, лазерной, радиотехники, оптики, вычислительной техники и прочих ее видов [1, 2]. Исторически первой в электронной технике была использована керамика: поликристаллические материалы, получаемые преимущественно спеканием порошков. Многие из этих материалов обладают комплексами уникальных свойств и не имеют альтернативы. По составу твердофазные материалы достаточно разнообразны, важнейшим классом из них являются сложные оксиды (манганиты, ферриты, кобальтаты, купраты, ниобаты, молибдаты, манганаты и другие соединения щелочных, щелочноземельных, редкоземельных элементов и их различные более сложные сочетания).

Цель настоящей работы – калориметрическое исследование теплоемкостей манганитов NdMe₃Sr₃Mn₄O₁₂ (Me – Li, Na, K) в интервале 298.15–673 К.

Новые манганиты синтезированы твердофазным взаимодействием при высокой температуре стехиометрических количеств оксидов Nd₂O₃ (ос. ч.), Mn₂O₃, карбонатов щелочных металлов и стронция квалификации ч.д.а. Методом рентгенографии установлено, что манганиты кристаллизуются в тетрагональной сингонии со следующими параметрами кристаллической решетки: NdLi₃Sr₃Mn₄O₁₂ – $a = 10.88 \text{ \AA}$; $c = 9.52 \text{ \AA}$; $V^0 = 1126.9 \text{ \AA}^3$; $Z = 4$; $\rho_{\text{рент}} = 4.95 \text{ г/см}^3$; $\rho_{\text{пикн}} = 4.87 \pm 0.05 \text{ г/см}^3$;

NdNa₃Sr₃Mn₄O₁₂ – $a = 10.73 \text{ \AA}$; $c = 10.66 \text{ \AA}$; $V^0 = 1227.3 \text{ \AA}^3$; $Z = 4$; $\rho_{\text{рент}} = 4.80 \text{ г/см}^3$; $\rho_{\text{пикн}} = 4.73 \pm 0.07 \text{ г/см}^3$; NdK₃Sr₃Mn₄O₁₂ – $a = 10.87 \text{ \AA}$; $c = 11.71 \text{ \AA}$; $V^0 = 1382.6 \text{ \AA}^3$; $Z = 4$; $\rho_{\text{рент}} = 4.50 \text{ г/см}^3$; $\rho_{\text{пикн}} = 4.43 \pm 0.09 \text{ г/см}^3$.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Изобарная теплоемкость ферритов исследовалась в интервале температур 298.15–673 К на калориметре ИТ-С-400. Продолжительность измерений во всем температурном интервале с обработкой экспериментальных данных составляла не более 2.5 ч. Предел допускаемой погрешности прибора по паспортным данным составил $\pm 10.0\%$. Градуировка прибора проводилась путем определения тепловой проводимости тепломера K_T [3, 4]. С этой целью проведено несколько экспериментов с медным образцом и пустой ампулой. Время запаздывания достижения необходимой температуры фиксировалось с помощью микровольтамперметра Ф-136 и серийного секундомера СЭЦ-100 с шагом 25 К. Теплоемкости образцов были измерены также через 25 К. При каждой температуре проводилось по пять параллельных опытов, результаты усреднялись по [5], откуда вычислены случайные составляющие погрешности (Δ) для значений $C_{p(\text{уд})}$ (удельных) и $C_{p(\text{м})}^0$ (мольных) теплоемкостей.

Проверка работы прибора определялась измерением теплоемкости образца из $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ в интервале 298.15–673 К. Полученное значение

Таблица 1. Экспериментальные значения теплоемкости α -Al₂O₃

T, K	$C_{P(уд)} \pm \Delta, Дж/(г К)$	$C_{P(м)}^{\circ} \pm \Delta, Дж/(моль К)$	T, K	$C_{P(уд)} \pm \Delta, Дж/(г К)$	$C_{P(м)}^{\circ} \pm \Delta, Дж/(моль К)$
298.15	0.745 ± 0.039	76 ± 4	498	1.026 ± 0.078	105 ± 8
323	0.805 ± 0.059	82 ± 6	523	1.055 ± 0.088	108 ± 9
348	0.881 ± 0.069	90 ± 7	548	1.072 ± 0.059	109 ± 6
373	0.904 ± 0.049	92 ± 5	573	1.091 ± 0.079	111 ± 8
398	0.935 ± 0.069	95 ± 7	598	1.106 ± 0.059	113 ± 6
423	0.963 ± 0.079	98 ± 8	623	1.138 ± 0.049	115 ± 5
448	0.995 ± 0.049	101 ± 5	648	1.140 ± 0.079	116 ± 8
473	1.013 ± 0.069	103 ± 7	673	1.155 ± 0.059	118 ± 6

$C_p^{\circ}(298.15)Al_2O_3 = 76.0$ Дж/(моль К) в пределах погрешности прибора удовлетворительно согласуется с его рекомендованным значением 79.0 Дж/(моль К) [6, 7].

В табл. 1 приведены экспериментальные значения теплоемкости α -Al₂O₃ в интервале 298.15–673 К, измеренные нами на калориметре ИТ-С-400.

О корректности полученных результатов по $C_p^{\circ}(T)Al_2O_3$ можно также сказать следующее. Наряду с удовлетворительным совпадением опытных и литературных данных по $C_p^{\circ}(298.15) Al_2O_3$ наблюдается хорошее согласие его значений, полученных интерполяцией опытных данных I с литературными данными II [7] при различных температурах: 400 К (I – 95.1; II – 96.2), 500 К (I – 105.7; II – 106.0), 600 К (I – 113.1; II – 112.9 Дж/(моль К)).

Из данных табл. 1 можно получить уравнение температурной зависимости теплоемкости α -Al₂O₃ [Дж/(моль К)]

$$C_p^{\circ} = (99.3 \pm 6.3) + (37.2 \pm 2.3) \times 10^{-3} T - (30.4 \pm 1.9) \times 10^5 T^{-2}. \quad (1)$$

В табл. 2 приведены данные по удельной и мольной теплоемкостям образцов. Графическая зависимость $C_p^{\circ} \sim f(T)$ представлена на рис. 1.

Далее для выяснения природы наблюдаемых на кривой зависимости $C_p^{\circ} \sim f(T)$ эффектов фазового перехода II рода нами проведены электрофизические исследования манганитов.

Исследование электрофизических свойств (диэлектрической проницаемости и электрического сопротивления) при $\Delta T = 303$ –503 К проводилось путем измерения электроемкости образцов на серийном приборе Е7-8 (измеритель L, C, R) при рабочей частоте 1 кГц непрерывно в сухом воздухе в термостатном режиме со временем выдержки при каждой фиксированной температуре. Измерения проводились через 10 К.

Предварительно изготавливались плоскопараллельные образцы в виде дисков диаметром 10 мм и толщиной 1.3 мм со связующей добавкой (~1.5%). Прессование осуществлялось под давлением 20 кг/см². Полученные диски обжигались в силитовой печи при 1000°C в течение шести часов.

С целью придания достаточной для проведения эксперимента прочности образцы выдерживали в течение восьми часов при температуре 600°C. Далее проводилось их тщательное двухстороннее шлифование. Применена двухэлектродная система, электроды нанесены вжиганием серебряной пасты.

Диэлектрическая проницаемость определялась из электроемкости образца при известных значениях толщины образца и площади поверхности электродов. Для получения зависимости между электрической индукцией D и напряженностью электрического поля E использована схема Сойера–Тауэра. Визуальное наблюдение D (E – петли гистерезиса) проводилось на осциллографе С1-83 с делителем напряжения, состоящим из сопротивления 6 МОм и 700 кОм, и эталонным конденсатором 0.15 мкФ. Частота генератора – 300 Гц. Во всех температурных исследованиях образцы помещались в печь, температура измерялась хромель-алюмелевой термопарой, подключенной к вольтметру В2-34 с погрешностью ± 0.1 мВ. Скорость изменения температуры ~5 К/мин.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Из данных, приведенных в табл. 2 и на рис. 1, видно, что на зависимостях $C_p^{\circ} \sim f(T)$ для NdLi₃Sr₃Mn₄O₁₂ при 348 и 523 К, NdNa₃Sr₃Mn₄O₁₂ при 323 и 523 К, NdK₃Sr₃Mn₄O₁₂ при 448 и 523 К имеются аномальные пики, которые, по-видимому, относятся к фазовым переходам II рода. Эти переходы, возможно, связаны с катионными перераспределениями, вызванными изменениями коэффициентов термического расширения, электрического сопротивления, диэлектрической про-

Таблица 2. Экспериментальные значения теплоемкостей манганитов $NdMe_3^I Sr_3Mn_4O_{12}$ ($Me^I - Li, Na, K$)

T, K	$C_{(уд)} \pm \Delta, Дж/(г К)$	$C_{P(м)}^{\circ} \pm \Delta, Дж/(моль К)$	T, K	$C_{(уд)} \pm \Delta, Дж/(г К)$	$C_{P(м)}^{\circ} \pm \Delta, Дж/(моль К)$
$NdLi_3Sr_3Mn_4O_{12}$					
298.15	0.617 ± 0.044	518 ± 37	498	0.803 ± 0.051	675 ± 43
323	0.658 ± 0.025	552 ± 21	523	0.811 ± 0.041	681 ± 34
348	0.674 ± 0.031	566 ± 26	548	0.710 ± 0.057	596 ± 48
373	0.564 ± 0.055	474 ± 46	573	0.767 ± 0.042	644 ± 35
398	0.670 ± 0.026	563 ± 22	598	0.798 ± 0.042	670 ± 35
423	0.719 ± 0.030	604 ± 25	623	0.813 ± 0.043	682 ± 36
448	0.733 ± 0.056	615 ± 47	648	0.836 ± 0.063	702 ± 53
473	0.754 ± 0.044	633 ± 37	673	0.859 ± 0.055	721 ± 46
$NdNa_3Sr_3Mn_4O_{12}$					
298.15	0.625 ± 0.044	555 ± 39	498	0.868 ± 0.059	771 ± 52
323	0.644 ± 0.032	572 ± 28	523	0.882 ± 0.046	783 ± 41
348	0.574 ± 0.025	510 ± 22	548	0.757 ± 0.054	672 ± 48
373	0.524 ± 0.030	465 ± 27	573	0.783 ± 0.051	695 ± 45
398	0.658 ± 0.047	584 ± 42	598	0.806 ± 0.050	715 ± 44
423	0.774 ± 0.035	687 ± 31	623	0.844 ± 0.064	749 ± 57
448	0.832 ± 0.046	738 ± 41	648	0.861 ± 0.069	764 ± 61
473	0.851 ± 0.043	755 ± 38	673	0.876 ± 0.060	777 ± 53
$NdK_3Sr_3Mn_4O_{12}$					
298.15	0.509 ± 0.033	476 ± 31	498	0.684 ± 0.048	640 ± 45
323	0.549 ± 0.038	514 ± 36	523	0.723 ± 0.051	677 ± 48
348	0.569 ± 0.025	533 ± 23	548	0.598 ± 0.045	560 ± 42
373	0.592 ± 0.034	555 ± 32	573	0.577 ± 0.051	540 ± 48
398	0.618 ± 0.054	579 ± 51	598	0.563 ± 0.044	527 ± 41
423	0.624 ± 0.053	584 ± 50	623	0.658 ± 0.045	616 ± 42
448	0.636 ± 0.050	595 ± 47	648	0.679 ± 0.035	635 ± 33
473	0.605 ± 0.044	567 ± 41	673	0.698 ± 0.057	654 ± 53

нищаемости и эффектами Шоттки. Известно [8], что соединения, имеющие в своем составе парамагнитные ионы переходных металлов (особенно 4f-элементов), испытывают аномалии теплоемкости, обусловленные электронными переходами (эффектами Шоттки).

С учетом наличия фазовых переходов были рассчитаны уравнения зависимости $C_p^{\circ} \sim f(T)$, которые представлены в табл. 3.

Как видно из данных рис. 2, исследования электрофизических свойств манганитов также подтвердили наличие в них фазовых переходов II рода. На кривых зависимостей диэлектрической проницаемости $lg \epsilon \sim f(T)$ и электросопротивления $lg R \sim f(T)$ от температуры наблюдаются соответственно максимумы (при $lg \epsilon$) и минимумы (при $lg R$) у $NdLi_3Sr_3Mn_4O_{12}$ при 373 К, у $NdNa_3Sr_3Mn_4O_{12}$ при

323 К и у $NdK_3Sr_3Mn_4O_{12}$ при 443 К, которые неплохо согласуются с данными калориметрических исследований. При этих температурах полупроводниковый характер проводимости изменяется на металлический. У $NdLi_3Sr_3Mn_4O_{12}$ в интервалах 303–343 К и 373–493 К характер зависимости электросопротивления от температуры является полупроводниковым с шириной запрещенной зоны 0.13 эв и 0.09 эв соответственно. В исследованном интервале температур $NdNa_3Sr_3Mn_4O_{12}$ проявляет полупроводниковые свойства при $\Delta T = 303–323$ К ($\Delta E = 0.02$ эв) и $\Delta T = 373–393$ К ($\Delta E = 0.017$ эв). Как было указано выше, $NdK_3Sr_3Mn_4O_{12}$ имеет очень резкий скачок изменения диэлектрической проницаемости и электросопротивления при 443 К, когда полупроводниковый характер проводимости переходит к металлическому. При $\Delta T = 303–443$ К ширина запрещенной зоны равна 0.07 эв.

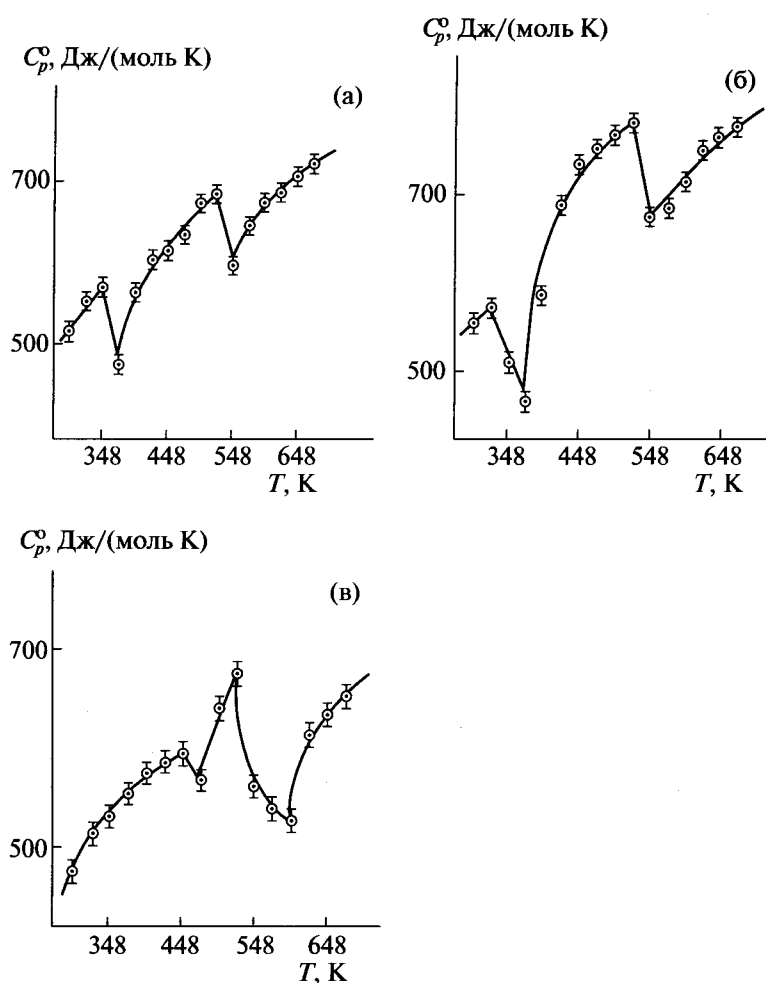


Рис. 1. Температурная зависимость теплоемкостей манганитов: (а) – $\text{NdLi}_3\text{Sr}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}$, (б) – $\text{NdNa}_3\text{Sr}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}$, (в) – $\text{NdK}_3\text{Sr}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}$.

РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИИ

В работе [9] авторами данной статьи разработан приближенный метод расчета стандартной энтальпии образования соединений данного состава, суть которого заключается в следующем.

В связи с отсутствием в фундаментальных справочниках величин стандартной энтальпии образования солей на основе марганца (III) в первом приближении проанализированы данные по теплотам образования перманганатов и оксидов редкоземельных элементов щелочных, щелочноземельных металлов, как единственных ключевых источников, имеющих в литературе [10–12].

Методом ионных инкрементов на основании значения энтальпийного инкремента $[\Delta_f H^\circ(298.15)]$ иона MnO_4^- и коэффициентов подобия (K), значения которых для разновалентных катионов представлены в [13], рассчитаны $\Delta_f H^\circ(298.15)$ перманганатов, отсутствующих в справочниках.

1. Коэффициент подобия K_1 найден по соотношению

$$K_1 = \frac{\Delta_f H^\circ(298.15)\text{Ln}(\text{MnO}_4)_3}{\Delta_{\text{ок}} H^\circ(298.15)\text{Ln}(\text{MnO}_4)_3}, \quad (2)$$

где энтальпия образования из оксидов манганатов лантоноидов приближенно оценена по схеме

$$\begin{aligned} \Delta_{\text{ок}} H^\circ(298.15)\text{Ln}(\text{MnO}_4)_3 &= \\ &= 0.5\Delta_f H^\circ(298.15)\text{Ln}_2\text{O}_3 + 1.5\Delta_f H^\circ(298.15)\text{Mn}_2\text{O}_7. \end{aligned} \quad (3)$$

2. Найден коэффициент подобия K_2 по схеме

$$K_2 = \frac{\Delta_f H^\circ(298.15)\text{MeMnO}_4}{\Delta_{\text{ок}} H^\circ(298.15)\text{MeMnO}_4}. \quad (4)$$

Здесь энтальпия образования из оксидов щелочных металлов (Me) аналогично (3) вычисляется по уравнению

$$\begin{aligned} \Delta_{\text{ок}} H^\circ(298.15)\text{MeMnO}_4 &= \\ &= 0.5\Delta_f H^\circ(298.15)\text{Me}_2\text{O}_3 + \\ &+ 0.5\Delta_f H^\circ(298.15)\text{Mn}_2\text{O}_7. \end{aligned} \quad (5)$$

Таблица 3. Уравнения температурной зависимости теплоемкости манганитов $NdMe_3Sr_3Mn_4O_{12}$ (Me – Li, Na, K)

Соединение	Коэффициенты уравнения			$\Delta T, K$
	$C_p^\circ = a + bT + cT^{-2}, Дж/(моль K)$			
	a	$b \times 10^{-3}$	$-c \times 10^5$	
$NdLi_3Sr_3Mn_4O_{12}$	231 ± 14	963 ± 58	–	298–348
	1851 ± 111	$-(3692 \pm 221)$	–	348–373
	2271 ± 136	$-(2030 \pm 122)$	1447 ± 87	373–523
	2461 ± 148	$-(3404 \pm 204)$	–	523–548
	2290 ± 137	$-(1441 \pm 86)$	2715 ± 163	548–673
$NdNa_3Sr_3Mn_4O_{12}$	348 ± 21	694 ± 43	–	298–323
	1266 ± 78	$-(2147 \pm 132)$	–	323–373
	3355 ± 207	$-(3292 \pm 203)$	2313 ± 142	373–523
	3120 ± 192	4469 ± 275	–	523–548
	1703 ± 105	$-(778 \pm 48)$	1817 ± 112	548–673
$NdK_3Sr_3Mn_4O_{12}$	724 ± 52	$-(62 \pm 4)$	204 ± 15	298–448
	1110 ± 80	$-(1148 \pm 82)$	–	448–473
	$-(474 \pm 34)$	2199 ± 157	–	473–523
	$-(13635 \pm 976)$	16239 ± 1163	$-(15915 \pm 1139)$	523–598
	7407 ± 530	$-(6577 \pm 471)$	10540 ± 755	598–673

3. Коэффициент подобия K_3 найден по схеме

$$K_3 = \frac{\Delta_f H^\circ(298.15)Met(MnO_4)_2}{\Delta_{ок} H^\circ(298.15)Met(MnO_4)_2}, \quad (6)$$

где энтальпия образования из оксидов щелочно-земельных металлов (Met) аналогично (2) вычислялась по уравнению

$$\begin{aligned} \Delta_{ок} H^\circ(298.15)Met(MnO_4)_2 = \\ = \Delta_f H^\circ(298.15)MetO + \Delta_f H^\circ(298.15)Mn_2O_7. \end{aligned} \quad (7)$$

4. Определено среднее значение коэффициента подобия

$$K_{cp} = (K_1 + K_2 + K_3)/3.$$

5. Вычислено $\Delta_{ок} H^\circ(298.15) LnMe_3Met_3Mn_4O_{12}$ по схеме

$$\begin{aligned} \Delta_{ок} H^\circ(298.15)LnMe_3Met_3Mn_4O_{12} = \\ = 0.5\Delta_f H^\circ(298.15)Ln_2O_3 + \\ + 1.5\Delta_f H^\circ(298.15)Me_2O + \\ + 3\Delta_f H^\circ(298.15)MetO + \\ + 2\Delta_f H^\circ(298.15)Mn_2O_3. \end{aligned} \quad (8)$$

6. Из соотношения

$$K_{cp} = \frac{\Delta_f H^\circ(298.15)LnMe_3Met_3Mn_4O_{12}}{\Delta_{ок} H^\circ(298.15)LnMe_3Met_3Mn_4O_{12}} \quad (9)$$

определена энтальпия образования $LnMe_3Met_3Mn_4O_{12}$ из простых веществ:

$$\begin{aligned} \Delta_f H^\circ(298.15)LnMe_3Met_3Mn_4O_{12} = \\ = \Delta_{ок} H^\circ(298.15)LnMe_3Met_3Mn_4O_{12} \cdot K_{cp}. \end{aligned} \quad (10)$$

Исходные данные для расчетов по $\Delta_{ок} H^\circ(298.15)Ln(MnO_4)_3$, $\Delta_{ок} H^\circ(298.15)Met(MnO_4)_2$, $\Delta_{ок} H^\circ(298.15)MeMnO_4$; $\Delta_f H^\circ(298.15)Ln_2O_3$, Mn_2O_7 , Me_2O , $MetO$, Mn_2O_3 заимствованы из [10–12].

Ниже в табл. 4 приведены результаты расчета $\Delta_f H^\circ(298.15)$ соединений $NdMe_3Met_3Mn_4O_{12}$ (Me – щелочные, Met – щелочноземельные металлы). Точность расчета $\pm 10.0\%$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Впервые в интервале 298.15–673 К измерены изобарные теплоемкости манганитов $NdLi_3Sr_3Mn_4O_{12}$, $NdNa_3Sr_3Mn_4O_{12}$, $NdK_3Sr_3Mn_4O_{12}$.

2. Выявлены резкие скачки теплоемкости: ($NdLi_3Sr_3Mn_4O_{12}$ при 348 и 523 К, $NdNa_3Sr_3Mn_4O_{12}$ при 323 и 523 К, $NdK_3Sr_3Mn_4O_{12}$ при 448 и 523 К), связанные с наличием фазовых переходов II рода.

3. Получены уравнения температурной зависимости теплоемкости манганитов с учетом выявленных температур фазовых переходов.

4. В интервале 303–503 К исследованы температурные зависимости диэлектрической проницаемости и электросопротивления манганитов. Установлено, что исследуемые соединения имеют полупроводниковые свойства, а также имеют эффекты на кривых $lg \epsilon \sim f(T)$ и $lg R \sim f(T)$: при 373 К – $NdLi_3Sr_3Mn_4O_{12}$, при 323 К – $NdNa_3Sr_3Mn_4O_{12}$, при 443 К – $NdK_3Sr_3Mn_4O_{12}$. При этом полупроводниковый характер проводимости переходит к

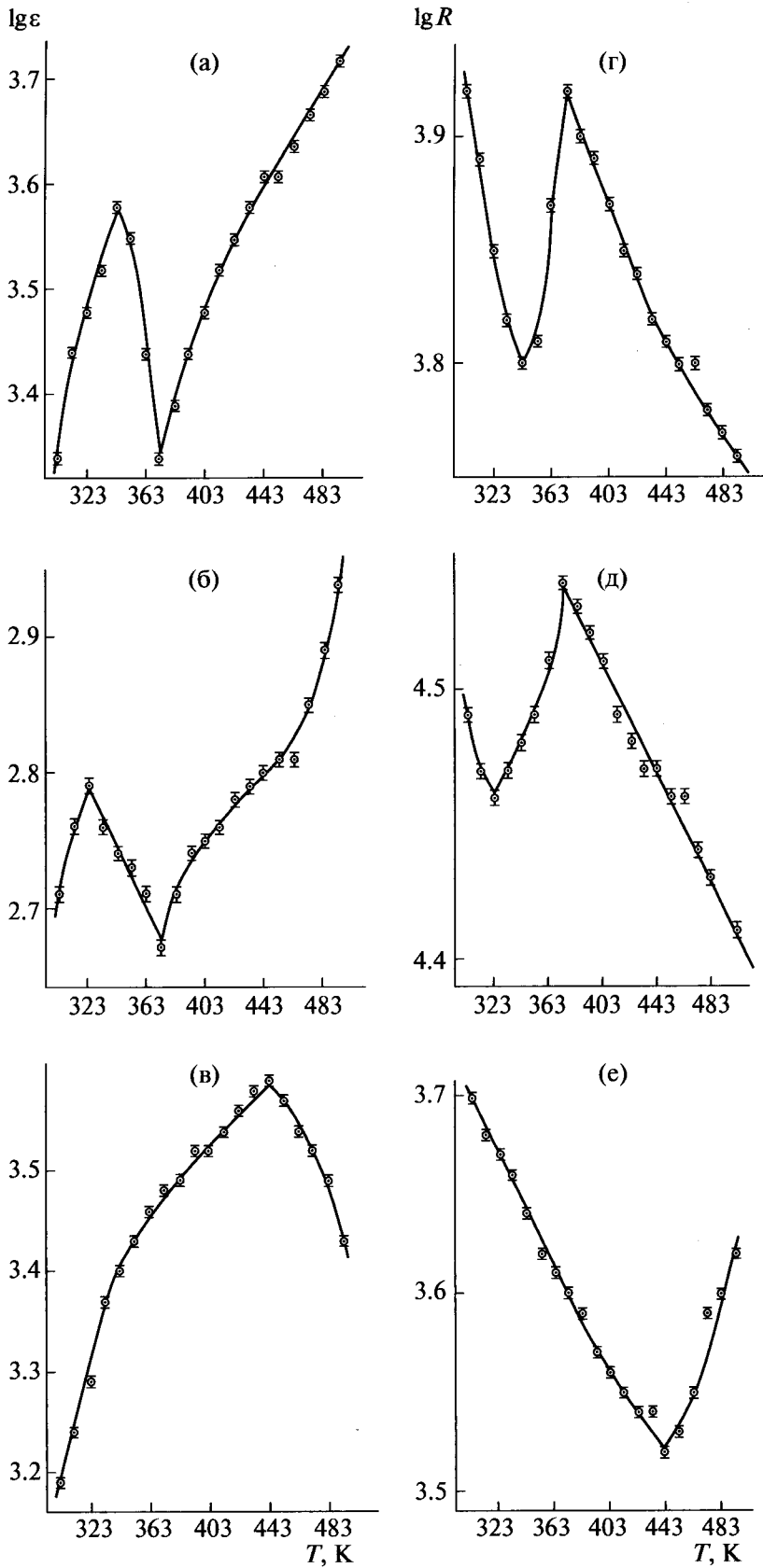


Рис. 2. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости: (а) – $\text{NdLi}_3\text{Sr}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}$, (б) – $\text{NdNa}_3\text{Sr}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}$, (в) – $\text{NdK}_3\text{Sr}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}$ и электросопротивления: (г) – $\text{NdLi}_3\text{Sr}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}$, (д) – $\text{NdNa}_3\text{Sr}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}$, (е) – $\text{NdK}_3\text{Sr}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}$.

Таблица 4. Стандартные энтальпии образования [$\Delta_f H^\circ(298.15)$] манганитов $NdMe_3Met_3Mn_4O_{12}$

Соединение	$-\Delta_f H^\circ(298.15)$, кДж/моль	Соединение	$-\Delta_f H^\circ(298.15)$, кДж/моль
$NdLi_3Mg_3Mn_4O_{12}$	6813.4	$NdLi_3Sr_3Mn_4O_{12}$	6907.7
$NdNa_3Mg_3Mn_4O_{12}$	6797.8	$NdNa_3Sr_3Mn_4O_{12}$	6883.3
$NdK_3Mg_3Mn_4O_{12}$	6852.7	$NdK_3Sr_3Mn_4O_{12}$	6936.2
$NdRb_3Mg_3Mn_4O_{12}$	6848.3	$NdRb_3Sr_3Mn_4O_{12}$	6929.7
$NdCs_3Mg_3Mn_4O_{12}$	6849.3	$NdCs_3Sr_3Mn_4O_{12}$	6931.0
$NdLi_3Ca_3Mn_4O_{12}$	6989.8	$NdLi_3Ba_3Mn_4O_{12}$	6790.2
$NdNa_3Ca_3Mn_4O_{12}$	6977.9	$NdNa_3Ba_3Mn_4O_{12}$	6755.8
$NdK_3Ca_3Mn_4O_{12}$	7036.1	$NdK_3Ba_3Mn_4O_{12}$	6804.2
$NdRb_3Ca_3Mn_4O_{12}$	7031.2	$NdRb_3Ba_3Mn_4O_{12}$	6796.4
$NdCs_3Ca_3Mn_4O_{12}$	7166.1	$NdCs_3Ba_3Mn_4O_{12}$	6798.1

металлическому. Определены ширины запрещенной зоны манганитов.

5. Приближенным методом расчета вычислены стандартные энтальпии образования соединений $NdMe_3Met_3Mn_4O_{12}$ (Me – щелочные, Met – щелочноземельные металлы).

6. Полученные результаты представляют интерес для направленного синтеза аналогичных соединений с заданными свойствами, а также прогнозирования их термодинамических и электрофизических свойств.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Третьяков Ю.Д., Метлин Ю.Г. Керамика – материал будущего. М.: Изд-во МГУ, 1987. 254 с.
2. Третьяков Ю.Д., Лепис У. Химия и технология твердофазных материалов. М.: Изд-во МГУ, 1985. 256 с.
3. Платунов Е.С., Буравой С.Е., Курепин В.В., Петров Г.С. Теплофизические измерения и приборы. Л.: Машиностроение, 1986. 256 с.
4. Техническое описание и инструкции по эксплуатации ИТ-С-400. Актюбинск: Актюбинский завод “Эталон”, 1986. 48 с.
5. Спиридонов В.П., Лопаткин Л.В. Математическая обработка экспериментальных данных. М.: Изд-во МГУ, 1970. 221 с.
6. Robie R.A., Hewingway B.S., Fisher J.K. Thermodynamic Properties of Minerals and Related Substances at 298,15 and (10⁵ Paskals) Pressure and at Higher Temperatures. Washington: United States government printing office, 1978. 456 p.
7. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. III. Кн. 2. М.: Наука, 1981. 395 с.
8. Резницкий Л.А. Калориметрия твердого тела. М.: Изд-во МГУ, 1981. 184 с.
9. Оралова А.Т., Касенов Б.К., Едильбаева С.Т. и др. Оценка термодинамических свойств манганитов $LnMe_3Met_3Mn_4O_{12}$ (Ln-La, Nd, Dy; Me-щелочные, Met-щелочноземельные металлы) // Вестник Казахского национального ун-та им. аль-Фараби. Серия хим. 2007. № 2. (46). С. 150.
10. Термические константы веществ: Справочник / Под ред. Глушко В.П. М.: ВИНТИ, 1978. Вып. 8. Ч. 1. 536 с.
11. Термические константы веществ: Справочник / Под ред. Глушко В.П. М.: ВИНТИ, 1979. Вып. 9. 574 с.
12. Термические константы веществ: Справочник / Под ред. Глушко В.П. М.: ВИНТИ, 1974. Вып. 7. Ч. 1. 344 с.
13. Касенов Б.К., Алдабергенов М.К., Пашинкин А.С. Термодинамические методы в химии и металлургии. Алматы: Изд-во Рауан, 1994. 256 с.