# **Дополнительные материалы**

**Термодинамические свойства *M*-EuTaO4// Журнал неорганической химии.**

П. Г. Гагаринa, А. В. Гуськовa, В. Н. Гуськовa,\*, Л. Х. Балдаевb, Е. Г. Сазоновb, А. В. Тюринa, М. А. Рюминa, К. С. Гавричевa

**Thermodynamic properties of *M*-EuTaO4' Russian Journal of Inorganic Chemistry**

P. G. Gagarin, A. V. Guskov, V. N. Guskov, L. H. Baldaev, E. G. Sazonov, A. V. Tyurin, M. A. Ryumin, K. S. Gavrichev

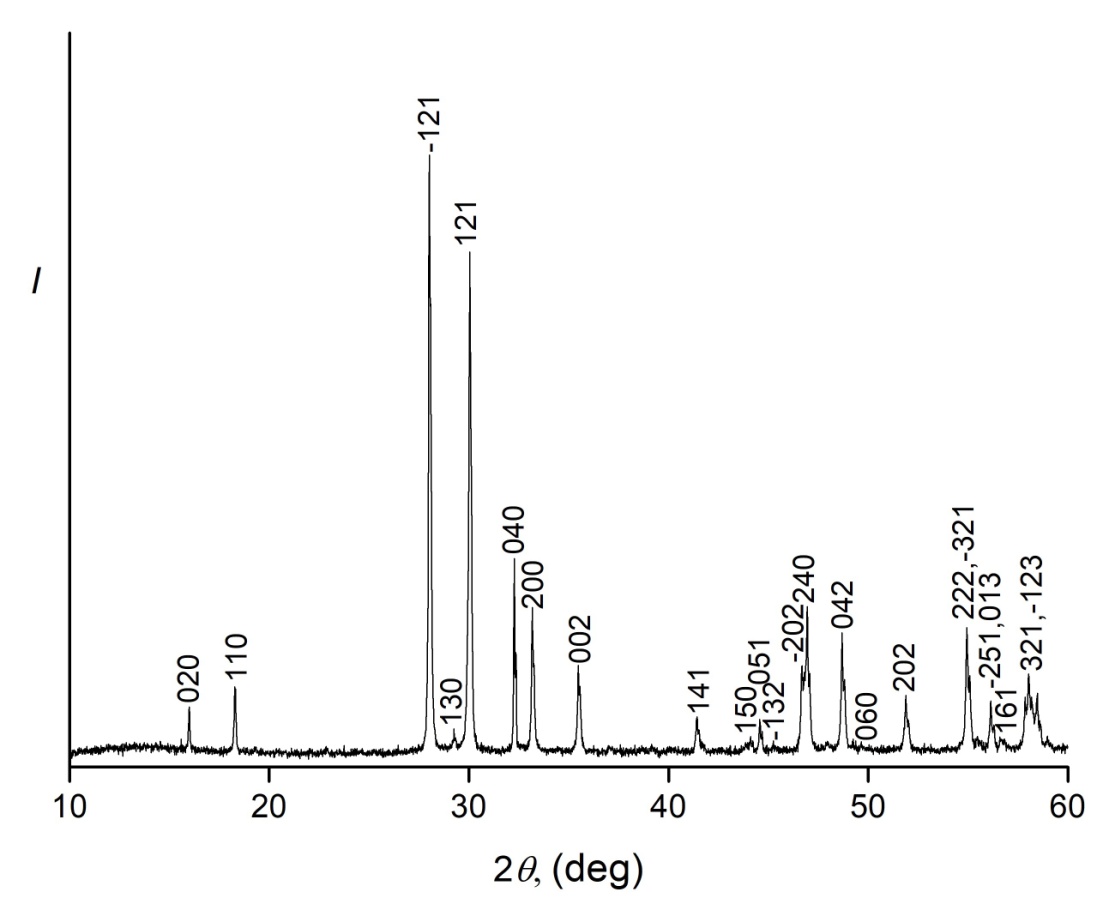


Рис.S1 Дифрактограмма *M*-EuTaO4.

Fig. S1 Diffractogram M-EuTaO4.

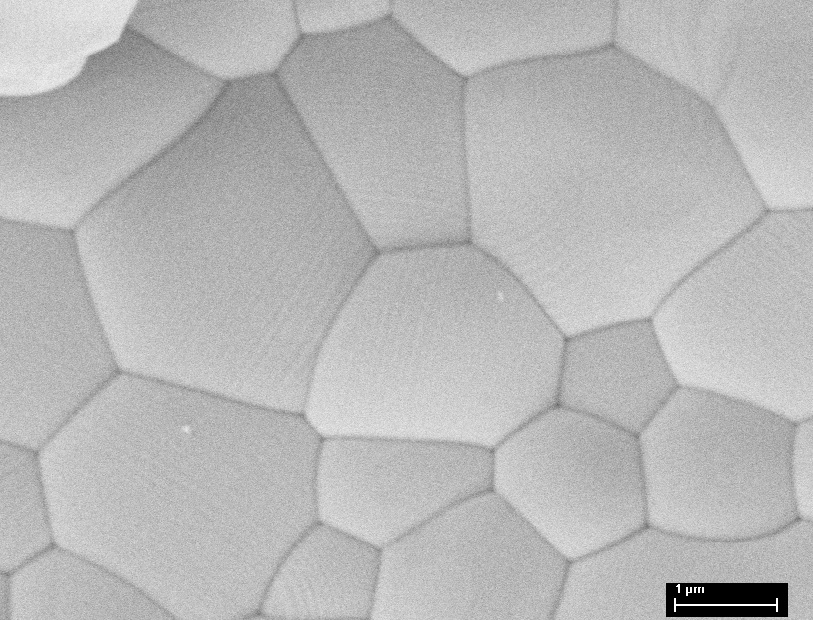


Рис.S2 Морфология образца *M*-EuTaO4.

Fig. S2 Morphology of the m-EuTaO4 sample.

S3. Оценка влияния отклонения от стехиометрии образца *M*-EuTaO4 на величину молярной теплоемкости.

Определение химического состава ортотанталата европия показало, что атомное соотношение металлов Eu:Ta составляет 50.15: 49.85. Проведем оценку теплоемкости по Нейману-Коппу для состава Eu1.03Ta0.997O4= 0.5×[1.03×*C*p (Eu2O3) + 0.997×*C*p(Ta2O5)] =(0.5015×123.9 + 0.4985×139.279) = 131.57 Дж моль-1K-1  и стехиометрического состава EuTaO4= 0.5×[*C*p (Eu2O3) + *C*p(Ta2O5)] =0.5×(123.9 + 139.279) = 131,59 Дж моль-1K-1, взяв теплоемкости для индивидуальных оксидов из [1] и [2] и температуры 298.15 K. Разность составляет 0.02 Дж моль-1K-1 или ~0,015 % - величину много меньшую, чем погрешность экспериментальных измерений.

S3. Estimation of the effect of deviation from the stoichiometry of the m-EuTaO4 sample on the molar heat capacity.

Determination of the chemical composition of europium orthotantalate showed that the atomic ratio Of EU metals: Ta is 50.15: 49.85. We estimate the Neumann-Kopp heat capacity for the composition Eu1. 03Ta0. 997O4= 0.5×[1.03×Cp (Eu2O3) + 0.997×Cp(Ta2O5)] =(0.5015×123.9 + 0.4985×139.279) = 131.57 j mol-1K-1 and stoichiometric composition EuTaO4= 0.5×[Cp (Eu2O3) + Cp(Ta2O5)] =0.5×(123.9 + 139.279) = 131,59 j mol-1K-1, taking the heat capacity for individual oxides from [1] and [2] and a temperature of 298.15 K. The difference is 0.02 j mol-1K-1 or ~0.015 % - a value much smaller than the error of experimental measurements.

1. R. J. M. Konings et al., J. Phys. Chem. Refer. Data. 43, 013101 (2014). doi: 10.1063/1.4825256
2. K. T. Jacob et al., J. Chem. Thermodynamics. 41, 748 (2009). doi:10.1016/j.jct.2008.12.006

Табл.S1 Экспериментальные результаты измерения молярной теплоемкости *M*-EuTaO4. M.м = 396.90948 г/моль, m = 3.41087 г, Р = 101.3 кПа

Table S1 Experimental results of measuring the molar heat capacity of M-EuTaO4. m = 396.90948 g/mol, m = 3.41087 g, P = 101.3 kPa

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *T*  K | *C*p  Дж моль-1K-1 | *T*  K | *C*p  Дж моль-1K-1 | *T*  K | *C*p  Дж моль-1K-1 |
| 8.78 | 1.300 | 50.65 | 20.08 | 147.0 | 81.25 |
| 9.58 | 1.460 | 52.32 | 21.25 | 150.6 | 82.98 |
| 10.38 | 1.607 | 54.00 | 22.45 | 154.2 | 84.66 |
| 11.14 | 1.737 | 55.68 | 23.66 | 157.8 | 86.31 |
| 11.87 | 1.859 | 55.94 | 23.86 | 161.4 | 87.90 |
| 12.57 | 1.977 | 57.36 | 24.90 | 165.0 | 89.46 |
| 13.26 | 2.097 | 57.63 | 25.10 | 168.7 | 91.02 |
| 13.96 | 2.224 | 59.06 | 26.15 | 176.5 | 94.14 |
| 14.65 | 2.359 | 59.32 | 26.35 | 180.3 | 95.58 |
| 15.35 | 2.509 | 60.75 | 27.42 | 183.8 | 96.89 |
| 16.02 | 2.664 | 61.01 | 27.61 | 187.4 | 98.19 |
| 16.69 | 2.828 | 62.45 | 28.69 | 191.0 | 99.39 |
| 17.34 | 3.003 | 62.71 | 28.89 | 194.5 | 100.7 |
| 17.99 | 3.187 | 64.15 | 29.97 | 198.1 | 101.9 |
| 18.58 | 3.367 | 64.41 | 30.16 | 202.1 | 103.1 |
| 18.62 | 3.379 | 66.16 | 31.48 | 206.5 | 104.5 |
| 19.19 | 3.562 | 67.87 | 32.77 | 210.9 | 105.9 |
| 19.26 | 3.584 | 69.59 | 34.05 | 215.3 | 107.2 |
| 19.78 | 3.759 | 71.50 | 35.48 | 219.7 | 108.4 |
| 19.92 | 3.807 | 73.65 | 37.07 | 224.0 | 109.6 |
| 20.39 | 3.969 | 75.13 | 38.06 | 228.4 | 110.7 |
| 20.57 | 4.034 | 75.81 | 38.53 | 232.8 | 111.8 |
| 21.02 | 4.197 | 77.32 | 39.54 | 237.1 | 113.1 |
| 21.20 | 4.265 | 77.97 | 39.99 | 238.0 | 113.3 |
| 22.28 | 4.677 | 79.53 | 41.05 | 241.7 | 114.1 |
| 22.33 | 4.700 | 81.76 | 42.54 | 242.5 | 114.4 |
| 23.59 | 5.207 | 84.01 | 44.05 | 246.8 | 115.4 |
| 23.69 | 5.248 | 84.22 | 44.21 | 251.1 | 116.4 |
| 24.98 | 5.795 | 86.27 | 45.61 | 255.4 | 117.4 |
| 25.13 | 5.860 | 86.84 | 45.99 | 259.7 | 118.3 |
| 26.39 | 6.410 | 89.19 | 47.56 | 263.9 | 119.2 |
| 26.60 | 6.502 | 91.54 | 49.13 | 268.1 | 120.1 |
| 27.83 | 7.061 | 93.89 | 50.68 | 272.3 | 120.9 |
| 28.07 | 7.171 | 96.26 | 52.22 | 276.5 | 121.8 |
| 29.29 | 7.736 | 98.62 | 53.75 | 280.6 | 122.6 |
| 29.56 | 7.865 | 101.0 | 55.25 | 284.7 | 123.3 |
| 31.11 | 8.605 | 104.0 | 57.16 | 288.7 | 124.1 |
| 32.69 | 9.376 | 107.5 | 59.38 | 292.8 | 124.8 |
| 34.28 | 10.18 | 111.1 | 61.58 | 296.8 | 125.5 |
| 35.86 | 11.00 | 114.7 | 63.72 | 300.7 | 126.2 |
| 37.46 | 11.86 | 118.2 | 65.82 | 305.2 | 126.9 |
| 39.07 | 12.75 | 121.8 | 67.90 | 311.5 | 128.0 |
| 40.70 | 13.69 | 125.4 | 69.94 | 318.9 | 129.1 |
| 42.34 | 14.66 | 129.0 | 71.94 | 322.2 | 129.7 |
| 43.98 | 15.67 | 132.7 | 73.96 | 333.2 | 131.8 |
| 45.63 | 16.72 | 136.2 | 75.84 | 346.4 | 134.1 |
| 47.33 | 17.83 | 139.8 | 77.68 |  |  |
| 48.99 | 18.94 | 143.4 | 79.48 |  |  |

Табл. S2. Коэффициента аппроксимирующего уравнения (1) *C*p = Σ*ai*× ln(*T*/400)*i*

Table S2. Coefficient of the approximating equation (1) Cp = Σai× ln (T / 400)i

|  |  |
| --- | --- |
| *i* | *а* |
| 0 | 3.0275358380 |
| 1 | -0.5473175873 |
| 2 | 0.0571867951 |
| 3 | -2.31489×10-3 |
| 4 | 6.56362×10-5 |
| 5 | -1.19464×10-6 |
| 6 | 1.425035037920130×10-8 |
| 7 | -1.149752325410270×10-10 |
| 8 | 6.390452234469780×10-13 |
| 9 | -2.451613646072540×10-15 |
| 10 | 6.379906037424010×10-18 |
| 11 | -1.075619092261320×10-20 |
| 12 | 1.060118436042430×10-23 |
| 13 | -4.637974695611770×10-27 |