

Синтез и рентгенографическое исследование двойного никелито-мanganита неодима и магния $NdMg_2NiMnO_6$

Ш.Б. Касенова¹, Ж.И. Сагинтаева¹,
Б.К. Касенов^{1*}, Е.Е. Куанышбеков¹,
А.Т. Ордабаева², М.А. Исабаева³,
Э.М. Темирбаева¹

¹Химико-металлургический институт им. Ж. Абишева, Караганда, Казахстан

²Институт органического синтеза и углехимии РК, Караганда, Казахстан

³Торайгыров университет,

Павлодар, Казахстан

*E-mail: kasenov1946@mail.ru

Мanganиты-перовскиты являются важным классом материалов, обладающих уникальными физическими свойствами, такими как колоссальное магнетосопротивление и магнитокалорический эффект. Они имеют структуру перовскита и могут быть описаны общей формулой $AMnO_3$, где A – это редкоземельный или щелочной металл, а Mn – марганец.

Введение допантов в состав мanganита редкоземельного элемента может служить эффективным способом улучшения свойств полупроводников. Целью данной работы является синтез и рентгенографическое исследование нового никелито-мanganита неодима и магния состава $NdMg_2NiMnO_6$.

Методом керамической технологии синтезирован новый никелито-мanganит неодима и магния состава $NdMg_2NiMnO_6$. Идентификация проведен методом РФА. На основании индицирования установлено, что $NdMg_2NiMnO_6$ кристаллизуется в кубической сингонии со следующими параметрами решетки: $a=10,056 \pm 0,067 \text{ \AA}$; $Z=4$; $V=4139,39 \pm 0,20 \text{ \AA}^3$; $V_{\text{эл.рах.}}=1034,85 \pm 0,02 \text{ \AA}^3$; $\rho_{\text{рент.}}=2,5824$; $\rho_{\text{ники.}}=2,4970 \pm 0,052 \text{ г/см}^3$. Проведен расчет фактор толерантности, который является критерием стабильности структуры. Получены ИК-спектры исследуемого никелито-мanganита.

Полученные результаты представляют интерес для дальнейшей работы по исследованию термодинамических, электрофизическими свойств данного соединения и могут быть использованы в неорганическом материаловедении для получения аналогичных веществ с перспективными физико-химическими свойствами, а также в качестве исходных информационных массивов для загрузки в фундаментальные базы данных по рентгенографическим характеристикам.

Ключевые слова: никелито-мanganит; щелочноземельный металл; твердофазный синтез; рентгенография; индицирование; ИК-спектр.

$NdMg_2NiMnO_6$ неодим және магний қос никелит мanganитінің синтезі және оны рентгендік түрғыдан зерттеу

Ш.Б. Қасенова¹, Ж.И. Сағынтаева¹, Б.Қ. Қасенов^{1*}, Е.Е. Қуанышбеков¹, А.Т. Ордабаева², М.А. Исабаева³, Э.М. Темірбаева¹

¹Ж.Әбішев атындағы Химия металлургия институты, Караганда, Қазақстан

²Органикалық синтез және көмір химиясы институты РК, Караганда, Қазақстан

³Торайгыров университеті, Павлодар, Қазақстан

*E-mail: kasenov1946@mail.ru

Перовскит мanganиттері-бұл үлкен магниттік қарсылық және магнетокалориялық әсер сияқты ерекше физикалық қасиеттері бар материалдардың маңызды класы. Олар перовскит құрылымына ие және оларды $AMnO_3$ жалпы формуласымен сипаттауға болады, мұндағы A сирек жер немесе сілтілі металл, ал Mn марганец.

Сирек жер мanganитінің құрамына ие және оларды $NdMg_2NiMnO_6$ кристаллизацияның қасиеттерін жақсартудың тиімді едісі бола алды. Бұл жұмыстың маңызы $NdMg_2NiMnO_6$ құрамды жаңа неодим мен магний никель-мanganитін синтездеу және оны рентгенографиялық түрғыдан зерттеу болып табылады.

Керамикалық технология едісімен $NdMg_2NiMnO_6$ құрамды неодим мен магнийдің жаңа никелит-мanganиті синтезделді. Сәйкестендірле рентгенофазалық едісімен жүзеге асырылады. Индицирлеу негізінде $NdMg_2NiMnO_6$ кубтық сингонияда келесі тор параметрлерімен кристалданатыны анықталды: $a=10,056 \pm 0,067 \text{ \AA}$; $Z=4$; $V=4139,39 \pm 0,20 \text{ \AA}^3$; $V_{\text{эл.рах.}}=1034,85 \pm 0,02 \text{ \AA}^3$; $\rho_{\text{рент.}}=2,5824$; $\rho_{\text{ники.}}=2,4970 \pm 0,052 \text{ г/см}^3$. Құрылымының тұрақтылығының критерий болып табылатын $t = 0.90$ тәзімділік факторы есептелді. Зерттеліп отырған никелит мanganитінің ИК спектрлері алынды.

Алынған нәтижелер осы қосылыстың термодинамикалық, электрофизикалық қасиеттерін зерттеу бойынша одан әрі жұмыс істеуге қызығушылық тұдырады және бейограникалық материалтану ғылымында перспективалы физика-химиялық қасиеттері бар ұқсас заттарды алу үшін, сондай-ақ рентгенографиялық сипаттамалары бойынша іргелі деректер банктеріне жүктеу үшін бастапқы ақпараттық массивтер ретінде пайдаланылуы мүмкін.

Түйін сөздер: никелит-мanganит; сілтілі-жер металдары; қатты фазалы синтез; рентгенография; индицирлеу; ИК-спектр.

Synthesis and X-ray examination of neodymium and magnesium double nickel-manganite $NdMg_2NiMnO_6$

Sh.B. Kasenova¹, Zh.I. Sagintayeva¹, B.K. Kasenov^{1*}, E.E. Kuanyshbekov¹, A.T. Ordabayeva², M.A. Isabayeva³, E.M. Temirbaeva¹

¹Abishev Chemical and Metallurgical Institute, Karaganda, Kazakhstan

²Institute of Organic Synthesis and Chemistry of Coal of RK, Karaganda, Kazakhstan

³Toraigyrov University, Pavlodar, Kazakhstan

*E-mail: kasenov1946@mail.ru

Manganites-perovskites are an important class of materials with unique physical properties such as tremendous magnetoresistance and magnetocaloric effect. They have a perovskite structure and can be described by the general formula $AMnO_3$, where A is a rare earth or alkali metal and Mn is manganese.

The introduction of dopants into the composition of rare-earth element manganite can serve as an effective way to improve the properties of semiconductors. The aim of this work is the synthesis and X-ray diffraction study of a new nickelite-manganite of neodymium and magnesium of the composition $NdMg_2NiMnO_6$.

A new nickelite-manganite of neodymium and magnesium composition $NdMg_2NiMnO_6$ was synthesized by the method of ceramic technology. The identification was carried out by XRD method. On the basis of indication it was found that $NdMg_2NiMnO_6$ crystallizes in cubic syngony with the following lattice parameters: $a=10.056 \pm 0.067 \text{ \AA}$; $Z=4$; $V=4139.39 \pm 0.20 \text{ \AA}^3$; Vounit cell. $=1034.85 \pm 0.02 \text{ \AA}^3$, rx-ray. $=2.5824$; $\rho_{\text{рент.}}=2.4970 \pm 0.052 \text{ g/cm}^3$. The tolerance factor $t=0.90$, which is a criterion of structure stability, was calculated. IR spectra of the investigated nickelite-manganite were obtained.

The obtained results are of interest for further work on the study of thermodynamic, electrophysical properties of this compound and can be used in inorganic materials science to obtain similar substances with promising physical and chemical properties, and as initial information arrays for loading into fundamental data banks on X-ray characteristics.

Keywords: nickelite-manganite; alkaline earth metal; solid-phase synthesis; X-ray diffraction; indexing; IR spectrum.



CHEMICAL BULLETIN

of Kazakh National University

<http://bulletin.chemistry.kz/>



МРНТИ 31.17.15; 31.15.19; 31.15.17

https://doi.org/10.15328/cb2025_66

Статья (Article)

Синтез и рентгенографическое исследование двойного никелито-мanganита неодима и магния $\text{NdMg}_2\text{NiMnO}_6$

Ш.Б. Касенова^{1*} , Ж.И. Сагинтаева¹ , Б.К. Касенов¹ , Е.Е. Куанышбеков¹ ,
А.Т. Ордабаева² , М.А. Исабаева³ , Э.М. Темирбаева¹

¹Химико-металлургический институт им. Ж. Абишева, ул. Алиханова 1, 100012 Караганда, Казахстан

²Институт органического синтеза и углехимии РК, ул. Ермекова 63, 100009 Караганда, Казахстан

³Торайтыров университет, ул. Ломова 64, 140000 Павлодар, Казахстан

*E-mail: kasenov1946@mail.ru

1. Введение

Мanganиты – первоскиты являются чрезвычайно интересными объектами для исследований благодаря их уникальным физическим свойствам. Колossalное магнетосопротивление (КМС) – это явление, при котором электрическое сопротивление материала значительно изменяется при воздействии магнитного поля [1]. Мanganиты нашли свое применение в области спиновой электроники, которая рассматривает использование спинов электронов в дополнение к их заряду для хранения и передачи информации.

Оксиды первоскита ABO_3 обладают широким спектром применения благодаря своим уникальным кристаллографическим и физико-химическим свойствам. Рассматривается применение их в качестве суперконденсатора электродного материала и для всех трех компонентов (катода, анода и электролита) твердооксидных топливных элементов (ТОТЕ). Также обсуждается возможность анионного, а также катионного механизма накопления в суперконденсаторах на основе первоскита [2].

В литературах [3-6] синтезированы и проведены исследования свойств ряда мanganитов $\text{Nd}_{0.6}\text{Sr}_{0.4-x}\text{M}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.0, 0.1$; $\text{M} = \text{K}, \text{Na}$), $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{Mn}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ ($0 \leq x \leq 0.3$), $\text{La}_{0.67}\text{Ba}_{0.33}\text{Mn}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ ($x = 0, 0.025$ и 0.075), $\text{Ca}_{0.5-x}\text{Sr}_{0.5}\text{Lu}_x\text{MnO}_3$ – аналогично мanganита $\text{NdMg}_2\text{NiMnO}_6$.

Редкоземельные материалы проявляют множество многофункциональных свойств: магнитокалорический эффект, магнитоемкость, магнетосопротивление.

Авторами [7] изучены структурные, электронные и магнитные свойства чистых фазовых и стехиометрических образцов двойного первоскита $\text{Nd}_2\text{NiMnO}_6$ были исследованы с помощью комбинации рентгеновской и нейтронной дифракции, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и магнитометрии.

Исследовано влияние присоединения MgO на микроструктуру, электрические и диэлектрические свойства керамики $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$. Добавление MgO увеличивало отклик электродов $\text{La}_2\text{NiMnO}_{6+x}\text{MgO}$ при комнатной температуре и улучшало перестраиваемость [8].

В [9] представлены магнитные измерения $\text{Nd}_2\text{NiMnO}_6$, которые показали, что при охлаждении ниже 200 K переходит из парамагнитного в ферромагнитное состояние.

В исследовании [10] подробно изучены структура, проводимость и диэлектрические свойства $\text{Gd}_2\text{NiMnO}_6$, полученного методом низкотемпературного самовоспламенения. Полученные результаты показали, что $\text{Gd}_2\text{NiMnO}_6$ обладает высокой диэлектрической проницаемостью и уникальными механизмами переноса заряда, что делает его перспективным материалом для функциональных приложений в электронике.

Авторами в [11] синтезированы мультиферроиды $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiMnO}_6$ ($x = 0.0-0.6$) золь-гель методом, изучены их структурные, оптические и электрические свойства с помощью рентгеновской дифракции, инфракрасной спектроскопии и измерений сопротивления. Исследование показало, что увеличение концентрации Sr приводит к изменениям в структуре, а также подтверждает полупроводниковую природу всех образцов.

Received 04 Mar 2025; Received in revised form 30 Apr 2025; Accepted 23 Jul 2025; Available online 30 Dec 2025.

Целью данной работы является синтез и рентгенографическое исследование нового никелито-манганита неодима и магния состава $\text{NdMg}_2\text{NiMnO}_6$.

2. Эксперимент

Синтез двойного никелито-манганита неодима и магния $\text{NdMg}_2\text{NiMnO}_6$ проведен керамическим методом. Метод позволяет получать материалы с высокой прочностью, твердостью и устойчивостью к химическим воздействиям [12, 13]. Исходными веществами для синтеза использованы Nd_2O_3 («ос.ч.»), NiO , Mn_2O_3 , MgCO_3 («ч.д.а.»), которые предварительно прокалили при 400°C . Далее смесь тщательно перемешивается, перетирается и проводятся отжиги при 800°C в течение 15 ч, 1000°C – 15 ч, 1200°C – 15 ч. После каждой температуре смесь охлаждается, перемешивается и перетирается. Далее для получения устойчивых фаз при низкой температуре проводили отжиг при 400°C в течение 10 ч. Схема синтеза приведены ниже на рисунке 1. Аналогичные соединения были получены в работах [14-18].

Образование равновесного состава двойного никелито-манганита неодима и магния $\text{NdMg}_2\text{NiMnO}_6$ идентифицировано методом рентгенофазового анализа на дифрактометре ДРОН-2.0. Условия съемки: CuK_α – излучение, $U = 30 \text{ кВ}$, $J = 10 \text{ мА}$, скорость вращения – 1000 импульсов в секунду, постоянная времени $\tau = 5 \text{ с}$, интервал углов 2θ от 10 до 90° . Интенсивность дифракционных максимумов оценивали по стобальной шкале. Определены тип сингонии и параметры кристаллических решеток.

Основной задачей РФА является идентификация различных фаз в их смеси на основе анализа дифракционной картины, даваемой исследуемым образцом [19]. В настоящее время регистрация дифракционной картины от порошковых образцов и поликристаллов производится с помощью автоматических дифрактометров. Ориентация

атомных плоскостей в трехмерном пространстве, от которых возможно получить «отражение» рентгеновских лучей, однозначно определяется кристаллографическими индексами плоскости – индексами Миллера (hkl). Под кристаллографическими индексами понимают три целых числа hkl , равных числу частей, на которые делятся ребра элементарной ячейки a , b и c данным семейством плоскостей. Между индексами (hkl), величиной d_{hkl} и периодами решетки a , b , c существует математическая зависимость. Для каждой сингонии эта зависимость может быть представлена своим уравнением. Для кубических кристаллов, у которых $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, квадратичная формула запишется в виде (1):

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \quad (1)$$

где a – параметр кристаллической решетки, d – межплоскостное расстояние.

Химическую формулу кристаллического соединения можно задать соотношением количества атомов в структуре, используя целочисленные коэффициенты. С учетом этого число формульных единиц (Z) показывает, на сколько надо умножить стехиометрические коэффициенты в формуле, чтобы определить количество атомов того или иного элемента, приходящихся на одну элементарную ячейку [19]. Кратность позиции зависит от количества элементарных ячеек – соседей, которым одновременно принадлежит данный атом в бесконечной кристаллической решетке. Определив параметры элементарной ячейки, можно определить число формульных единиц (2):

$$Z = \frac{V \cdot \rho_{\text{эксп.}}}{1,66 \cdot M} \quad (2)$$

где V – объем ячейки, M – молекулярный вес.

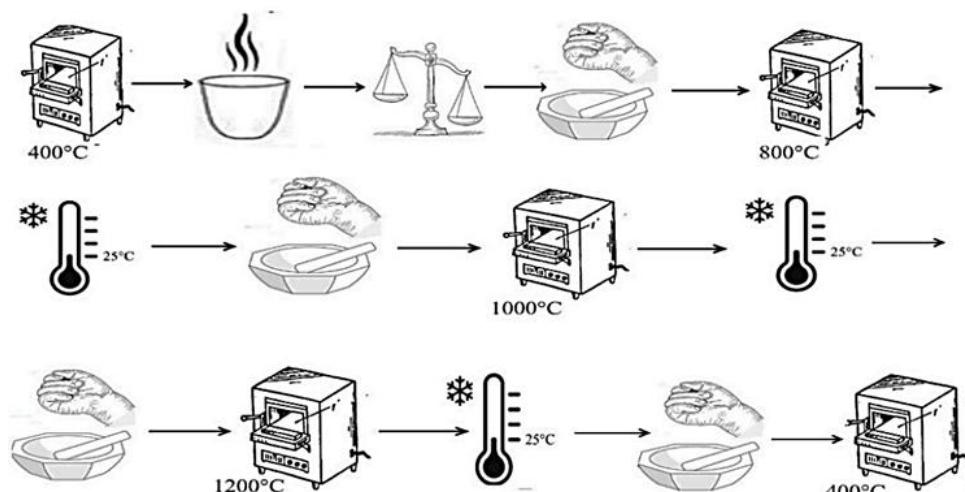


Рисунок 1 – Схема синтеза

Объём элементарной ячейки (V°) исследуемой фазы для кубической сингонии определяли по формуле (3):

$$V^{\circ} = a^3 \quad (3)$$

Рентгеновскую (вычисленную) плотность ($\rho_{\text{рент}}$) исследуемого соединения определяли по формуле (4):

$$\rho_{\text{рент}} = \frac{1,66 \cdot Mr \cdot Z}{V^{\circ}} \quad (4)$$

где Mr – молекулярный вес соединения, Z – число формульных единиц в ячейке.

В процессе расшифровки рентгенограмм можно выделить шесть основных этапов: первичная обработка рентгенограммы; идентификация вещества; определение сингонии кристалла и индицирование рентгенограммы; расчет и уточнение параметров элементарной ячейки; проверка правильности расчетов; определение типа решетки Бравэ.

Запись рентгенограмм проводится на автоматическом дифрактометре ДРОН (дифрактометр рентгеновский общего назначения). В методе порошка в качестве интенсивности максимумов дифракции принимают их высоту. Каждый из таких дифракционных максимумов соответствует отражению от того или иного семейства узловых плоскостей, характеризуемых своим набором индексов Миллера (hkl) и межслоевым расстоянием (d). Положение максимума на рентгенограмме и значение межслоевого расстояния ($d_{\text{эксп}}$) задается формулой Вульфа-Брэгга [19]. Для этого высоту самого интенсивного рефлекса принимают за 100 %, высоты всех остальных (в %) рассчитывают методом пропорции.

Индицирование рентгенограммы проводили аналитическим методом [19].

Индицирование рентгенограммы – это процедура присвоения дифракционным максимумам индексов Миллера (hkl). Для проверки правильности индицирования рентгенограммы необходимо рассчитать значения межплоскостных расстояний и соответствующие значения hkl . Критерием качества индицирования и расчета является степень совпадения экспериментальных и вычисленных значений межплоскостных расстояний ($d_{\text{эксп}}, d_{\text{расч}}$). Кроме того, в случае правильного определения параметров ячейки число формульных единиц будет близко к целому значению. Должно соблюдаться хорошее соответствие между экспериментальными и вычисленными значениями плотности [20,21]. Результаты индицирования представлены ниже в таблице 1.

Пикнометрическую плотность определяли по известной методике [22] в стеклянной пикнометре объемом 1 мл. Индифферентной жидкостью служил толуол, т.к. он хорошо смачивает данное соединения и химически инертен по отношению к нему, а также его плотность обладает стабильностью к изменениям температуры.

Плотность соединения рассчитывали по формуле (5):

$$\rho = \frac{\frac{M_3 - M_0}{M_1 - M_0} - \frac{M_4 - M_3}{M_2 - M_3}}{\rho_1 - \rho_2} \quad (5)$$

где M_0 – масса пустого пикнометра, г; M_1 – масса пикнометра с водой, г; M_2 – масса пикнометра с толуолом, г; M_3 – масса пикнометра с исследуемым веществом, г; M_4 – масса пикнометра с толуолом и веществом, г; ρ_1 – плотность воды при определенной температуре воздуха, г/см³ (справочная величина); ρ_2 – плотность толуола, г/см³.

ИК-спектры записаны на Фурье-спектрометре ALPHA Bruker (Германия) в интервале 400-4000 см⁻¹ (рисунок 2).

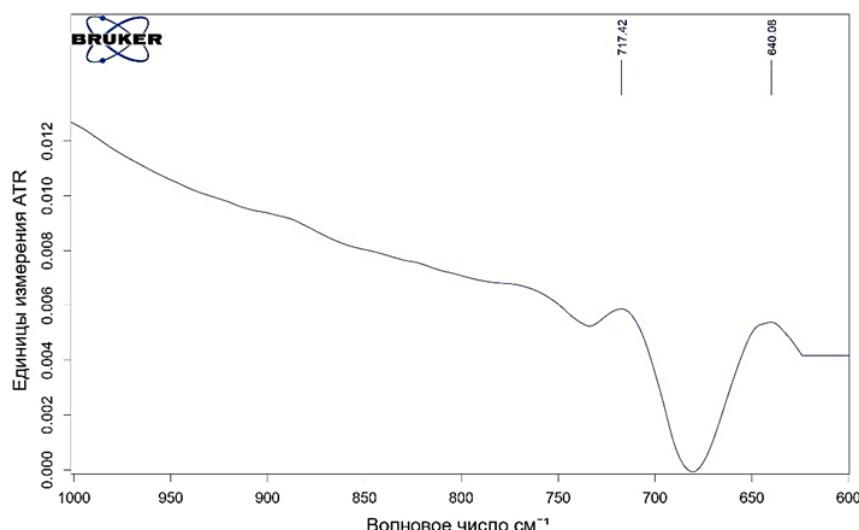


Рисунок 2 – ИК-спектры никелито-манганита неодима и магния $\text{NdMg}_2\text{NiMnO}_6$.

3. Результаты и обсуждение

На основании индицирования (таблица 1) установлено, что $\text{NdMg}_2\text{NiMnO}_6$ кристаллизуется в кубической сингонии со следующими параметрами решетки: $a = 10,056 \pm 0,067 \text{ \AA}$; $Z = 4$; $V^o = 4139,39 \pm 0,20 \text{ \AA}^3$; $V^o_{\text{эл.яч.}} = 1034,85 \pm 0,02 \text{ \AA}^3$; $\rho_{\text{рент.}} = 2,5824$; $\rho_{\text{пикн.}} = 2,4970 \pm 0,052 \text{ г/см}^3$.

Таблица 1 – Индицирование рентгенограммы порошка $\text{NdMg}_2\text{NiMnO}_6$

I/I_0	$d/\text{\AA}$	$10^4/d^2_{\text{эксп.}}$	hkl	$10^4/d^2_{\text{выч.}}$
16,6667	3,882	663,6	410	663,6
7,6923	3,457	836,8	421	819,7
6,4103	3,061	1067	333/511	1054
100	2,735	1337	433/530	1327
10,2564	2,604	1457	532/611	1483
10,2564	2,514	1582	443/540	1601
16,6667	2,420	1708	622	1718
12,8205	2,244	1986	551/711	1991
16,6667	2,218	2033	640	2030
10,2564	2,142	2180	642	2186
37,1795	2,099	2270	730	2264
28,2051	1,932	2679	742/821	2693
12,8205	1,881	2826	660/822	2811
10,2564	1,706	3436	664	3435
15,3846	1,582	3996	722/10.1.1	3982
35,8974	1,571	4052	862/10.2.0	4060
20,5128	1,484	4541	10.4.0	4528
14,1026	1,364	5375	875/11.4.1	5387

Достоверность индицирования контролировалась удовлетворительным совпадением экспериментальных и расчетных значений ($10^4/d^2$), а также согласованностью значений рентгеновской ($\rho_{\text{рент.}}$) и пикнометрической ($\rho_{\text{пикн.}}$) плотностей исследуемой фазы.

Толерантный фактор (t) играет ключевую роль в определении устойчивости кристаллической структуры перовскитоподобных соединений [23]. Радиусы катионов взяты из [24,25]. Расчет проводится по формуле (6) Гольдшмидта:

$$t = \frac{r_A + r_O}{\sqrt{2(r_B + r_O)}} \quad (6)$$

где: r_A – эффективный радиус катионов в А-позиции (Nd^{3+}), r_B – средний радиус катионов в В-позиции (Mg^{2+} , Ni^{2+} и Mn^{3+}), r_O – радиус кислорода (O^{2-}), V^o – геометрический коэффициент для перовскитных структур.

Расчет толерантного фактора для $\text{NdMg}_2\text{NiMnO}_6$.

r_A – эффективный радиус катионов в А-позиции (Nd^{3+}) Nd^{3+} равно $1,27 \text{ \AA}$, Mg^{2+} : $0,72 \text{ \AA}$, Ni^{2+} : $0,69 \text{ \AA}$, Mn^{3+} : $0,645 \text{ \AA}$, O^{2-} : $1,40 \text{ \AA}$

Средний радиус для катионов В будет (7):

$$r_B = \frac{2 \cdot r_{\text{Mg}^{2+}} + r_{\text{Ni}^{2+}} + r_{\text{Mn}^{3+}}}{4} = \frac{1,44 + 0,69 + 0,72}{4} = 0,69375 \text{ \AA} \quad (7)$$

Подставляем в формулу (6) и получаем $t=0,90$.

Значения фактора толерантности указывают на кубическую структуру. Фактор толерантности является критерием стабильности структуры для перовскитов и может принимать значения от 0,8 до 1,11 [26].

Интерпретации для указанных пиков 630.83; 717.54 согласно [27]:

630,83 cm^{-1} : Этот пик может быть связан с колебаниями связей Ni-O (никель-кислород) или Mn-O (марганец-кислород). Такие колебания обычно наблюдаются в диапазоне частот от 600 до 700 cm^{-1} и могут указывать на деформационные движения в кристаллической структуре.

717,54 cm^{-1} : Этот пик может быть связан с колебаниями связей Nd-O (неодим-кислород) или Mg-O (магний-кислород). Колебания в этом диапазоне часто свидетельствуют о взаимодействии редкоземельных элементов или магния с кислородом и могут быть связаны с симметричными или асимметричными растягиваниями в кристаллической решетке.

4. Заключение

По керамической технологии из Nd_2O_3 («ос.ч.»), NiO , Mn_2O_3 , MgCO_3 («ч.д.а.») синтезирован двойной никелито-манганит неодима и магния $\text{NdMg}_2\text{NiMnO}_6$. Методом рентгенофазового анализа установлен тип сингонии и вычислены параметры решетки. Установлено, что $\text{NdMg}_2\text{NiMnO}_6$ кристаллизуется в кубической сингонии со следующими параметрами решетки: $a = 10,056 \pm 0,067 \text{ \AA}$; $Z = 4$; $V^o = 4139,39 \pm 0,20 \text{ \AA}^3$; $V^o_{\text{эл.яч.}} = 1034,85 \pm 0,02 \text{ \AA}^3$; $\rho_{\text{рент.}} = 2,5824$; $\rho_{\text{пикн.}} = 2,4970 \pm 0,052 \text{ г/см}^3$. Проведен расчет фактора толерантности, который является критерием стабильности структуры. Получены ИК-спектры исследуемого никелито-манганита.

Полученные результаты представляют интерес для дальнейшей работы по исследованию термодинамических, электрофизических свойств данного соединения и могут быть использованы в неорганическом материаловедении для получения аналогичных веществ с перспективными физико-химическими свойствами, а также в качестве исходных информационных массивов для загрузки в фундаментальные базы данных по рентгенографическим характеристикам.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (ИРН №AP23486147).

References

- 1 Bebenin NG, Zainullina RI, Ustinov VV (2018) Physics-Uspekhi 61:719-738. <https://doi.org/10.3367/UFNe.2017.07.038180>
- 2 Gadjiev AB, Gamzatov AG, Batdalov AB, Hurshilova ZA, Aliev AM (2022) Physics of the Solid State 64:2261-2265. <https://doi.org/10.21883/PSS.2022.14.54326.28s>
- 3 Lassoued RA, Massoudi J, Jeddi M, Dhahri E, Bessais L (2023) Journal of Materials Research 38:4559-4572. <https://doi.org/10.1557/s43578-023-01171-x>
- 4 Zhou Y, Wu X, Wu W, Wen Ch, Wang Q (2018) Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 31:521-528. <https://doi.org/10.1007/s10948-017-4200-8>
- 5 Kharrat N, Chihaoui S, Cheikhrouhou-Koubaa W, Koubaa M, Cheikhrouhou A (2018) Journal of Materials Science: Materials in Electronics 29:17187-17194. <https://doi.org/10.1007/s10854-018-9810-9>
- 6 Konstantinova EI, Litvinov VA, Koryakov AD, Leonidov IA (2023) Журнал неорганической химии 68:1398-1404. (In Russian). <https://doi.org/10.31857/S0044457X23600536>
- 7 Johan Cedervall, Ivanov SA, Lewin E, Beran P, Andersson MS, et al. (2019) Journal of Materials Science. Materials in Electronics 30:16571-16578. <https://doi.org/10.1007/s10854-019-02035-z>
- 8 Chen H, Cao Zh, Wang L, He W, Sun J, Zhang Y, Ruan X (2014) Journal of Alloys and Compounds 616:213-220. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.07.119>
- 9 S. Pal S, Jana S, Govinda S, Pal B, Mukherjee S, et al. (2019) Phys Rev B 100(4):045122. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.045122>
- 10 Anirban S, Dutta A (2021) Journal of Physics and Chemistry of Solids 159:110292. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2021.110292>
- 11 Ahmad J, Hassan S, Khan JA, Nissar U, Abbas H (2021) Proceedings of the Pakistan Academy of Sciences: A. Physical and Computational Sciences 58(2):59-71. [https://doi.org/10.53560/PPASA\(58-2\)610](https://doi.org/10.53560/PPASA(58-2)610)
- 12 Pankov VV, Ivashenko DV (2021) Computational nanotechnology 8:18-23. (In Russian). <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2021-8-2-18-23>
- 13 Gavrilova LY (2008) Methods of synthesis and research of promising materials [Методы синтеза и исследование перспективных материалов]. Textbook. Yekaterinburg: USU. 74 p. (In Russian).
- 14 Kasenov BK, Kasenova ShB, Sagintaeva Zhl, Kuanyshbekov EE, Mukhtar AA, et al. (2021) Metalurgija. (Croatia) 60(3-4):447-450.
- 15 Kasenov BK, Kasenova ShB, Sagintaeva Zhl, Ermagambet BT, Kuanyshbekov EE, Mukhtar AA (2021) Metalurgija. (Croatia) 60(3-4): 454-456.
- 16 Kasenov BK, Kasenova ShB, Sagintaeva Zhl, Kuanyshbekov EE, Mukhtar AA, Kakenov KS (2022) High Temperature 60(1):45-49. <https://doi.org/10.1134/s0018151x22010114>
- 17 Kasenov BK, Kasenova ShB, Sagintaeva Zhl, Kuanyshbekov EE, Mukhtar AA, Kakenov KS (2022) High Temperature 60(4):474-478. (In English). <https://doi.org/10.1134/s0018151x22020225>
- 18 Kasenov BK, Kasenova ShB, Sagintaeva Zhl, Baisanov SO, Lu NYu, et al. (2023) Molecules 28: 5194. <https://doi.org/10.3390/molecules28135194>
- 19 Kovba LM, Trunov VK (1976) X-ray phase analysis [Rentgenofazovyj analiz]. Moscow: Moscow State University, 2nd ed. 256 p. (In Russian)
- 20 Monina LN (2016) Radiography. Qualitative X-ray phase analysis [Rentgenografiya. Kachestvennyj rentgenofazovyj analiz]. The training manual. Tyumen: Tyumen State University, 120 p. (In Russian)
- 21 Khabas TA, Vakalova TV, Gromov AA, et al. (2007) X-ray phase analysis. Methodological guidelines. Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia. 40 p. (In Russian)
- 22 Kivilis SS (1959) Technique of measuring the density of liquids and solids [Tekhnika izmerenij plotnosti zhidkostej i tverdyh tel]. Standartgiz, Moscow, USSR. (In Russian)
- 23 Likun P, Zhu G (eds.) (2016) Perovskite Materials: Synthesis, Characterisation, Properties, and Applications. ExLi4EvA Copyright. 637 p. ISBN-10:953-51-2245-2
- 24 Database of Ionic Radii <http://abulafia.mt.ic.ac.uk\shannon/>
- 25 Wells AF (1987) Structural inorganic chemistry. Mir, Moscow, USSR. 2:696 p.
- 26 Kostrominka NA, Kumok VN, Skorik NA (1990) Chemistry of coordination compounds [Химия координационных соединений]. Higher School, Moscow, USSR. 432 p. ISBN: 5-06-001020-1.
- 27 Nakamoto K (1991) IR and RAMAN spectra of inorganic and coordination compounds [ИК спектры и спектры KR неорганических и координационных соединений]. Mir, Moscow, USSR. ISBN: 5-03-001749-6.

Сведения об авторах

Касенова Шуга Булатовна – доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории термохимических процессов Химико-металлургического института им. Ж. Абишева, Караганда, Казахстан, e-mail: kasenovashuga@mail.ru;

Сагинтаева Женисгуль Имангалиевна – кандидат химических наук, ассоциированный профессор, ведущий научный сотрудник лаборатории термохимических процессов Химико-металлургического института им. Ж. Абишева, Караганда, Казахстан, e-mail: kai_sagintaeva@mail.ru;

Касенов Булат Кунурович – доктор химических наук, профессор, заведующий лабораторией термохимических процессов Химико-металлургического института им. Ж. Абишева, Караганда, Казахстан, e-mail: kasenov1946@mail.ru;

Куанышбеков Ерболат Ермекович – магистр технических наук, старший научный сотрудник лаборатории термохимических процессов Химико-металлургического института им. Ж. Абишева, Караганда, Казахстан, e-mail: mr.ero1986@mail.ru;

Ордабаева Айгуль Танирбергеновна – кандидат химических наук, заведующая лабораторией химии угля Институт органического синтеза и углехимии РК, Караганда, Казахстан, e-mail: aigul_serik_kz@mail.ru;

Исабаева Манар Амангельдиевна – кандидат химических наук, профессор кафедры химии и химических технологий НАО «Торайғыров университет», Павлодар, Казахстан, e-mail: isabaeva.manar@mail.ru;

Темірбаева Эльдира Махметқызы – инженер 2 категорий лаборатории термохимических процессов Химико-металлургического института им. Ж. Абишева, Караганда, Казахстан, e-mail: eldira.110203@mail.ru.