Дополнительные материалы к статье

Пройдакова В. Ю., Воронов В. В., Кузнецов С. В., Некрылов И. Н., Завражнов А. Ю., Федоров П. П. Фазовая диаграмма системы $Na_2SO_4 – In_2(SO_4)_3$. Сравнительный анализ систем $Na_2SO_4 – R_2(SO_4)_3$ (R = Al, Ga, Fe, In, Sc, Yb). DOI: 10.17308/kcmf.2025.27/12805

✉Кузнецов Сергей Викторович, e-mail: kouznetzovsv@gmail.com

Таблица S1. Рентгенограмма низкотемпературной γ-модификации соединения $Na_3In(SO_4)_3$ (тригональная сингония, пр. группа *R*-3, параметры решетки: *a* = 13.970, *c* =8.871 Å, Z = 6)

hkl	***d,*** Å	**2Θ**	***I*, %**
1 0 1	7.148	12.372	15
1 1 0	6.989	12.655	82
0 2 1	4.997	17.734	20
2 1 1	4.065	21.846	27
0 3 0	4.035	22.010	25
2 2 0	3.495	25.468	4
1 -3 -2	3.182	28.017	21
1 -4 -1	3.139	28.406	100
0 0 3	2.953	30.247	7
4 0 1	2.864	31.207	9
1 3 -2	2.676	33.465	15
2 3 -1	2.650	33.797	19
1 4 0	2.642	33.908	22
0 4 2	2.499	35.911	2
3 0 3	2.383	37.723	2
2 -5 -2	2.353	38.221	3
3 3 0	2.330	38.616	4
2 -6 -1	2.215	40.701	4
1 0 4	2.178	41.420	1
5 0 2	2.124	42.520	1
1 5 -1	2.112	42.791	4
2 4 -2	2.033	44.541	5
0 6 0	2.018	44.890	1
1 2 -4	1.993	45.469	1

1 4 -3	1.969	46.068	4
1 -6 -2	1.952	46.492	6
5 2 0	1.938	46.829	8

Таблица S2. Рентгенограмма среднетемпературной β-модификации соединения $Na_3In(SO_4)_3$ (при T = 200 °C). Моноклинная сингония, пр. группа $P21/c$, параметры решетки: a = 16.187(4) Å, b = 13.584(3) Å, c = 9.639(2) Å, β = 91.6°

hkl			***d*, Å**	**2Θ**	***I*, %**
1	-1	-1	7.134	12.398	100
1	1	1	7.007	12.624	17
2	-1	-1	5.703	15.526	3
2	1	1	5.574	15.887	3
3	1	0	5.013	17.678	4
0	0	2	4.818	18.401	27
2	0	-2	4.191	21.180	4
0	3	1	4.098	21.668	23
2	0	2	4.089	21.716	3
4	0	0	4.045	21.955	2
2	-1	-2	4.005	22.178	25
4	1	0	3.877	22.920	5
3	0	-2	3.644	24.406	3
2	3	1	3.638	24.446	2
2	-2	-2	3.567	24.944	1
3	-1	-2	3.520	25.283	2
3	3	0	3.468	25.667	1
3	-3	-1	3.282	27.149	38
5	1	0	3.148	28.327	11
0	1	3	3.126	28.535	50
1	-1	-3	3.085	28.923	4
2	-4	-1	2.988	29.883	1
2	-1	-3	2.943	30.350	2
5	2	0	2.922	30.575	4
4	-3	-1	2.896	30.849	3
2	1	3	2.889	30.926	1
3	-3	-2	2.839	31.487	1
1	-4	-2	2.743	32.617	7
5	0	-2	2.722	32.878	11
2	2	3	2.711	33.014	1

6	0	0	2.697	33.193	1
1	5	0	2.679	33.417	5
5	0	2	2.652	33.769	20
0	3	3	2.620	34.201	7
5	1	2	2.603	34.426	5
4	4	1	2.500	35.895	3
6	-2	-1	2.441	36.785	1
6	0	-2	2.382	37.737	4
0	4	3	2.333	38.551	2
1	4	3	2.303	39.082	2
5	1	3	2.218	40.641	2
3	-4	-3	2.158	41.832	2
5	4	2	2.090	43.249	1
7	-1	-2	2.082	43.421	1
7	1	2	2.038	44.409	5
1	-6	-2	2.036	44.466	4
7	-2	-2	2.013	45.006	5
4	-2	-4	2.003	45.246	3
8	2	0	1.938	46.828	1
1	7	0	1.927	47.130	1
1	7	1	1.888	48.154	2
5	-2	-4	1.882	48.319	1

Таблица S3. Рентгенограмма соединения 93 % Na_2SO_4 – 7 % $In_2(SO_4)_3$ (фаза φ) моноклинной сингонии. пр. группа *P*21/*c*, параметры решетки: *a* = 7.836, *b* = 14.845, *c* = 4.57 Å, β = 91.14°

hkl	***d*,** Å	**2Θ**	***I*, %**
1 0 0	7.850	11.263	15
0 2 0	7.438	11.888	17
1 1 0	6.943	12.740	57
1 2 0	5.399	16.404	11
1 3 0	4.192	21.175	15
2 0 0	3.925	22.636	6
1 -1 -1	3.869	22.969	100
2 1 0	3.795	23.422	12
0 4 0	3.719	23.907	14
2 2 0	3.471	25.642	6
0 3 1	3.359	26.514	2
1 -3 -1	3.117	28.620	1
2 3 0	3.078	28.990	17
2 1 1	2.873	31.109	49
2 -2 -1	2.804	31.885	17
1 5 0	2.782	32.147	1
1 4 1	2.688	33.303	2
3 0 0	2.617	34.241	33
3 2 0	2.468	36.368	8
2 5 0	2.371	37.916	4
3 3 0	2.314	38.884	3
1 0 -2	2.213	40.748	1
1 0 2	2.173	41.532	5
1 1 2	2.150	41.993	2
2 6 0	2.096	43.120	3
1 6 1	2.091	43.236	1
3 -3 -1	2.090	43.260	1
2 5 1	2.087	43.323	1
0 3 2	2.074	43.607	2
1 7 0	2.051	44.111	1
3 3 1	2.040	44.377	1

1	-3	-2	2.021	44.819	1
2	0	-2	2.003	45.225	1
1	3	2	1.990	45.547	2
2	-1	-2	1.985	45.657	1
3	5	0	1.965	46.162	1
4	0	0	1.962	46.222	3
2	-2	-2	1.934	46.932	12
4	2	0	1.898	47.901	2
2	6	1	1.892	48.048	1
2	2	2	1.882	48.329	1
2	-3	-2	1.858	49.000	2
4	3	0	1.825	49.939	4
4	-1	-1	1.812	50.313	1
0	5	2	1.811	50.336	1
2	3	2	1.811	50.354	1

Таблица S4. Рентгенограмма соединения $Na_3Al(SO_4)_3$

(тригональная сингония, пр. группа *R*-3, параметры решетки: *a* = 13.3516, *c* = 8.9080Å, Z = 6)

hkl	***d,*** Å	**2Ɵ**	***I,*%**
1 1 0	6.671	13.262	63
0 2 1	4.846	18.288	2
0 1 2	4.156	21.365	35
2 1 1	3.921	22.657	62
2 0 2	3.527	25.232	5
2 2 0	3.335	26.707	7
1 2 2	3.118	28.608	100
1 3 1	3.015	29.672	89
4 0 1	2.748	32.564	1
1 -2 -3	2.713	32.996	18
1 3 -2	2.601	34.449	11
2 3 -1	2.541	35.296	15
0 4 2	2.424	37.064	2
0 3 3	2.351	38.249	13
0 5 1	2.237	40.284	4
3 3 0	2.223	40.539	1
1 0 4	2.187	41.261	2
2 -6 -1	2.121	42.592	3
0 2 4	2.078	43.521	4
1 5 -1	2.021	44.804	12
1 2 -4	1.984	45.697	2
2 4 -2	1.961	46.266	3
1 4 -3	1.922	47.255	6
3 4 -1	1.858	48.990	1
5 2 0	1.850	49.203	6
1 -4 -4	1.828	49.825	2
3 -6 -3	1.778	51.288	3
0 1 5	1.761	51.891	2
3 -7 -2	1.747	52.315	1
1 6 1	1.729	52.924	1
2 3 -4	1.705	53.715	1

2 0 5	1.702	53.808	3
4 4 0	1.668	55.013	1
1 -3 -5	1.649	55.679	3
1 6 -2	1.639	56.083	1
3 -8 -1	1.623	56.664	1
6 0 3	1.616	56.947	1
0 5 4	1.604	57.420	2
2 5 -3	1.570	58.751	1
2 -6 -4	1.559	59.215	3
3 5 -2	1.548	59.691	4
1 7 0	1.531	60.436	1
0 4 5	1.516	61.064	2
2 -8 -2	1.508	61.445	2
0 0 6	1.485	62.516	1
1 -2 -6	1.449	64.225	4
3 4 -4	1.445	64.417	2
0 8 1	1.426	65.403	1
4 -9 -2	1.404	66.546	1
0 3 6	1.385	67.573	1
2 4 -5	1.380	67.840	1
8 0 2	1.374	68.201	1
2 -4 -6	1.356	69.216	2

Таблица S5. Рентгенограмма соединения $NaAl(SO_4)_2$ (моноклинная сингония, пр. группа *C2/m*, параметры решетки: *a* = 7.9007, *b* = 5.003, *c* = 7.1202 Å, β = 92.87º Z = 2)

hkl	***d*,** Å	**2Ɵ**	***I*,%**
0 0 1	7.103	12.452	100
2 0 0	3.946	22.516	8
1 -1 -1	3.676	24.194	69
1 1 1	3.590	24.780	43
2 0 -1	3.525	25.247	14
2 0 1	3.378	26.361	38
1 -1 -2	2.756	32.465	38
1 1 2	2.684	33.359	19
0 2 0	2.503	35.852	10
0 0 3	2.368	37.973	9
3 1 0	2.328	38.637	17
3 1 1	2.184	41.303	1
2 2 0	2.113	42.752	4
1 -1 -3	2.090	43.263	4
2 -2 -1	2.040	44.356	8
2 0 3	1.987	45.624	5
4 0 0	1.973	45.966	2
2 -2 -2	1.838	49.559	3
2 2 2	1.795	50.819	2
0 0 4	1.776	51.41702	1
4 0 2	1.689	54.264	3
2 0 -4	1.650	55.645	4
1 1 4	1.622	56.717	2
1 -3 -1	1.594	57.776	4
2 0 4	1.526	60.625	1
4 2 1	1.501	61.733	1
1 -3 -2	1.489	62.310	1
1 3 2	1.477	62.856	1
5 1 1	1.456	63.763	1
4 -2 -2	1.441	64.632	4
0 0 5	1.421	65.672	2

3	3	0	1.409	66.291	1
4	2	2	1.400	66.763	3
3	1	4	1.383	67.707	2
1	3	3	1.337	70.336	2

Таблица S6. Рентгенограмма соединения $Na_3Ga(SO_4)_3$

(тригональная сингония, пр. группа *R*-3, параметры решетки: *a* = 13.413, *c* = 8.980 Å, Z = 6)

hkl	***d,*** Å	**2Ɵ**	***I,*%**
1 1 0	6.705	13.192	100
0 1 2	4.187	21.202	2
2 1 1	3.943	22.52983	37
0 3 0	3.871	22.956	4
2 0 2	3.552	25.053	21
1 2 2	3.138	28.416	96
1 3 1	3.032	29.439	60
1 -2 -3	2.733	32.743	9
1 3 -2	2.617	34.237	20
2 3 -1	2.554	35.107	5
1 4 0	2.534	35.392	7
0 3 3	2.36767	37.972	8
2 -5 -2	2.291	39.293	4
0 5 1	2.249	40.068	4
1 0 4	2.204	40.918	3
2 -6 -1	2.132	42.363	1
1 5 -1	2.032	44.562	9
1 2 -4	1.998	45.344	2
2 4 -2	1.972	45.995	5
1 4 -3	1.934	46.944	6
1 -6 -2	1.892	48.062	1
3 4 -1	1.867	48.724	1
5 2 0	1.860	48.943	11
1 -4 -4	1.842	49.454	3
3 -6 -3	1.791	50.956	2
0 1 5	1.775	51.453	3
3 -7 -2	1.757	52.010	2
1 6 1	1.737	52.635	1
2 0 5	1.716	53.362	3
1 -3 -5	1.662	55.225	2
0 5 4	1.614	57.012	2

2 5 -3	1.579	58.378	1
1 3 -5	1.568	58.831	4
3 5 -2	1.556	59.341	3
7 1 0	1.5385	60.105	2
0 4 5	1.527	60.583	3
2 -8 -2	1.516	61.084	2
1 -2 -6	1.460	63.665	2
3 4 -4	1.454	63.969	2
0 8 1	1.433	65.033	1
4 -9 -1	1.411	66.151	2
0 3 6	1.396	66.994	1
2 4 -5	1.389	67.321	1
8 0 2	1.381	67.794	1
2 -4 -6	1.366	68.628	3
2 7 -2	1.353	69.419	1
1 8 -1	1.344	69.946	1
5 5 0	1.341	70.122	1
3 -8 -4	1.334	70.532	1
3 6 -3	1.314	71.753	1
1 -9 -2	1.301	72.618	2
1 4 -6	1.289	73.428	1
4 6 -2	1.277	74.197	2

Таблица S7. Рентгенограмма соединения $NaGa(SO_4)_2$ (моноклинная сингония, пр. группа *C*2/*m*, параметры решетки: *a* = 7.912, *b* = 5.095, *c* = 7.143 Å, β = 92.70º Z = 2)

hkl	***d,*** Å	**2Θ**	***I*,%**
0 0 1	7.135	12.394	100
1 1 0	4.282	20.726	2
2 0 0	3.951	22.482	20
1 -1 -1	3.714	23.937	69
1 1 1	3.630	24.499	2
2 0 -1	3.529	25.215	8
2 0 1	3.389	26.276	12
1 -1 -2	2.777	32.212	20
1 1 2	2.707	33.067	18
0 2 0	2.547	35.200	15
0 2 1	2.399	37.455	1
3 1 0	2.340	38.438	12
1 -1 -3	2.102	42.983	3
0 2 2	2.073	43.621	4
2 -2 -1	2.065	43.792	1
2 2 1	2.036	44.454	4
3 -1 -2	1.996	45.403	2
4 0 0	1.976	45.894	3
2 -2 -2	1.857	49.008	6
2 2 2	1.815	50.218	1
0 0 4	1.784	51.164	1
4 0 -2	1.764	51.768	1
0 2 3	1.738	52.599	1
4 0 2	1.694	54.079	2
2 0 -4	1.656	55.446	1
1 3 1	1.614	57.027	1
2 2 3	1.571	58.714	1
4 0 -3	1.557	59.312	1
4 -2 -1	1.537	60.141	2
5 1 0	1.510	61.363	1
0 2 4	1.461	63.625	1

3 -1 -4	1.449	64.246	3
0 0 5	1.427	65.333	1
4 2 2	1.411	66.183	2
2 -2 -4	1.388	67.398	2
1 -1 -5	1.364	68.735	1