

РП-41
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ХРОМИТА NdLiCr₂O₅ В
ИНТЕРВАЛЕ 298,15-673 К

Давренбеков С.Ж., Касенова Ш.Б., Сагинтаева Ж.И., Касенов Б.К.,
Мустафин Е.С., Едильбаева С.Т.

Институт фитохимии Министерства образования и науки Республики Казахстан
ул. М. Газалиева 4, 470032, Караганда, Казахстан
E-mail: biblioteka@nursat.kz

Исследование термодинамических свойств хромитов имеет определенный теоретический и практический интерес для их направленного синтеза. Нами по керамической технологии из оксидов Nd, Cr (III) и карбоната лития синтезирован хромит состава NdLiCr₂O₅, который кристаллизуется в ромбической сингонии. Целью данной работы является исследование термодинамических свойств данного хромита.

Калориметрическое исследование теплоемкости NdLiCr₂O₅ проводили на приборе ИТ-С-400 в интервале 298,15-673 К. Ниже приведены результаты калориметрических исследований [$C_p \pm \bar{\delta}$, Дж/г·К); $C_p^\circ \pm \Delta$, Дж/(моль·К)].

| Т,К | $C_p \pm \bar{\delta}$ | $C_p^\circ \pm \Delta$ | Т,К | $C_p \pm \bar{\delta}$ | $C_p^\circ \pm \Delta$ |
|--------|------------------------|------------------------|-----|------------------------|------------------------|
| 298,15 | 0,498±0,014 | 167±8 | 498 | 0,627±0,014 | 210±6 |
| 323 | 0,510±0,015 | 171±8 | 523 | 0,637±0,022 | 213±9 |
| 348 | 0,527±0,011 | 177±6 | 548 | 0,478±0,014 | 160±8 |
| 373 | 0,544±0,018 | 182±9 | 573 | 0,386±0,011 | 129±8 |
| 398 | 0,559±0,016 | 187±8 | 598 | 0,473±0,016 | 158±9 |
| 423 | 0,573±0,016 | 192±8 | 623 | 0,625±0,010 | 209±4 |
| 448 | 0,594±0,020 | 199±9 | 648 | 0,627±0,017 | 210±7 |
| 473 | 0,608±0,017 | 204±8 | 673 | 0,645±0,011 | 216±5 |

Из данных таблицы видно, что NdLiCr₂O₅ при 523 К претерпевает фазовый переход II – рода, связанный скачкообразным изменением теплоемкости. С учетом наличия фазового перехода вычислены уравнения температурной зависимости теплоемкости, которые описываются следующими уравнениями [Дж/(моль·К)]:

$$C_{p(1)}^\circ = (108,5 \pm 8,0) + (203,0 \pm 15,0) \cdot 10^{-3}T + (3,2 \pm 0,2) \cdot 10^5 T^{-2}, \quad (298,15-523 \text{ К}), \quad (1)$$

$$C_{p(2)}^\circ = (1094 \pm 83) - (1683 \pm 128) \cdot 10^{-3}T, \quad (523-573 \text{ К}), \quad (2)$$

$$C_{p(3)}^\circ = (1960 \pm 149) - (1602 \pm 122) \cdot 10^{-3}T + (2996 \pm 228) \cdot 10^5 T^{-2}, \quad (573-673 \text{ К}). \quad (3)$$

Так, как технические возможности калориметра не позволяют вычислить стандартную энтропию хромита непосредственно из опытных данных, ее оценили методом ионных инкрементов¹. Далее на основании данных по $C_p^\circ(T)$ и $S^\circ(298,15)$ по известным соотношениям вычислены температурные зависимости термодинамических функций $S^\circ(T)$, $H^\circ(T) - H^\circ(298,15)$ и $\Phi^{\text{ex}}(T)$ NdLiCr₂O₅.

¹ Кумок В.Н. В сб.: *Прямые и обратные задачи химической термодинамики*. Новосибирск: Наука, 1987, 108-123 с.