

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Al_2Se_3

А.С. АББАСОВ, С.И. МЕХТИЕВА, К.А. АСКЕРОВА, А.М. МАЛАХОВА

Институт Физики АН Азербайджана

370143, Баку, пр. Г. Джавида, 33

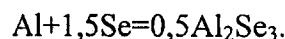
В интервале 300-450 К изучены эдс сплавов системы Al-Se. Из уравнения температурной зависимости эдс рассчитаны энергия Гиббса, энтальпия, энтропия образования, а также энергия атомизации полупроводникового соединения Al_2Se_3 .

В системе Al-Se образуются соединения состава Al_2Se_3 и Al_2Se [1]. Полуторный селенид алюминия Al_2Se_3 плавится при 1253 К, характеризуется вюрцитной дефектной структурой с гексагональной ячейкой: $a=3,89$; $c=6,30$ Å [2]. Ширина запрещенной зоны Al_2Se_3 равна $\Delta E=3,1$ эВ. Теплота образования Al_2Se_3 в работе Голутвина [3] определена методом прямого синтеза в калориметре. Найденное значение $\Delta H_{298}^\circ = -135,5 \pm 3$ ккал/моль. Шнайдер [4] вычислил теплоту образования Al_2Se_3 из результатов сжигания соединения в калориметрической бомбе. Полученная величина оказалась равной $\Delta H_{298}^\circ = -129,7 \pm 2$ ккал/моль. Изучению температурной зависимости теплоемкости Al_2Se_3 в интервале 200-298 К посвящена работа [5]. Автор рассчитал из экспериментальных данных стандартное значение абсолютной энтропии соединения $S_{298}^\circ = 37,0 \pm 7$ кал/моль·К. Целью настоящей работы являлось изучение термодинамических свойств Al_2Se_3 . Нами был применен метод эдс, принципиальные основы которого описаны в [6]. Синтез сплавов валового состава 67,00; 70,00; 76,00 ат.% Se, относящихся к гетерогенной области Al_2Se_3 -Se, был осуществлен прямым сплавлением при 1373 К из компонентов чистоты Al-99,99, Se-99,999 % в графитовых тиглях, помещенных в кварцевые трубки с дальношим отжигом при 973К. Электролитом являлся глицериновый раствор хлоридов алюминия и калия. Измерялись эдс концентрационных относительно электродов гальванических элементов



- [1] М. Хансен, К. Андерко. В кн. «Структуры двойных сплавов» т.1, М. Металлургиздат, 1962, 211.
 [2] «Физико-химические свойства полупроводниковых веществ» М. 1979, 68.
 [3] А.Ф. Капустинский, Ю.М. Голутвин. Изв. АН СССР, сер. хим., 1951, №2, 34.
 [4] G. Gattow, A. Shneider, A. Angew Chem., 1956, 68.

в температурном интервале 300-450 К, x – атомная доля селена в сплаве. Электроды – чистый алюминий и сплав алюминия с селеном были напессованы на индифферентный металл – вольфрамовые отводы. Эдс измерялась с помощью вольтметра И7-21, температура – хромель-алюмелевой термопарой. Стабильность значений измеряемых эдс при постоянной температуре и их воспроизводимость при цикле нагрев-охлаждение в рабочем интервале температур свидетельствовало об обратимой работе элемента. Совокупность данных эдс для Al_2Se_3 -Se была обработана методом наименьших квадратов [7]. Полученное уравнение имело вид $E=(0,980-0,09 \cdot T \cdot 10^{-3}) \pm 13 \cdot 10^{-3}$ В. С помощью этого уравнения и известных термодинамических соотношений были рассчитаны энергия Гиббса, энтальпия, энтропия образования соединения Al_2Se_3 из элементов (Al,Se) в твердом состоянии по уравнению реакции:



Были также рассчитаны стандартные значения абсолютной энтропии и величин атомизации соединения Al_2Se_3 , характеризующих прочность химической связи. Полученные данные приведены ниже:

$$\begin{aligned} \Delta G_{298}^\circ &= -133,4 \pm 2 \text{ ккал/моль}; \Delta H_{298}^\circ = -137,2 \pm 12 \text{ ккал/моль}; \\ \Delta S_{298}^\circ &= -12,6 \pm 2,5 \text{ кал/моль·К}; S_{298}^\circ = 31,4 \pm 2,8 \text{ кал/моль·К}; \\ \Delta H_{298}^{np} &= 90,8 \text{ ккал/г-ат}; \Delta G_{298}^{np} = 77,0 \text{ ккал/г-ат}; \\ \Delta S_{298}^{at} &= 43,4 \text{ кал/г-ат·К}. \end{aligned}$$

Необходимые данные по энтропии элементов и теплотам сублимации заимствованы из [8].

A.S. Abbasov, S.I. Mehdiyeva, K.Ə. Əskərova, A.M. Malahova

Al_2Se_3 -NİN TERMODİNAMİK XASSƏLƏRİ

Al-Se sisteminin xətlələrinin ehq temperaturdan (300-450 K) və qatılıqdan asılılığı öyrənilmişdir. 298 K əmələ gəlmə Hibbs enerjisi, entalpiyası, entropiyası, entropiyanın standart qiyməti və atomlara ayrılma enerjisi hesablanıb.

A.S. Abbasov, S.I. Mekhtiyeva, K.A. Askerova, A.M. Malahova

THERMODYNAMIC PROPERTIES OF Al_2Se_3

The temperature (300-450 K) and concentrative dependence of EMF for the alloys of Al-Se systems have been investigated. There have been calculated Gibbs energy, enthalpies, entropies, absolute entropy values and atomization energies of Al_2Se_3 at 298 K.