

Cu₅SmSe₄ BİRLƏŞMƏSİNİN İSTİLİK TUTUMU VƏ TERMODİNAMİK FUNKSİYALARI

Y.R.ƏLİYEVƏ, Z.İ.SÜLEYMANOV, A.S.ABBASOV, M.Ə.ALCANOV

Azərbaycan MEA akademik H.M. Abdullayev adına

Fizika İnstitutu

AZ-1143, H. Cavid pr., 33,

Cu₅SmSe₄ birləşməsinin istilik tutumunun temperaturdan asılılığına əsasən 80 – 300⁰K temperatur intervalında əsas termodinamik funksiyalar – entropiyanın (S_T – S₀), entalpiyanın (H_T – H₀) və sərbəst Gibbs enerjisinin ΔF dəyişməsi hesablanmışdır.

По температурной зависимости теплоёмкости нами вычислены основные термодинамические характеристики - изменение энтропии (S_T – S₀), энтальпии (H_T – H₀) и свободной энергии Гиббса Cu₅SmSe₄ в интервале 80 – 300⁰K

On temperature dependence of a thermal capacity we calculate the basic thermodynamic characteristics – change entropy (S_T – S₀), enthalpy (H_T – H₀) and free energy Gibbs in an interval 80 – 300⁰K.

Sm₂Se₃ – Cu₂Se sistemi Cu₅SmSe₄, Cu₃SmSe₃, CuSmSe₂ və CuSm₅Se₈ fazalarının əmələgəlməsi ilə xarakterizə olunur [1].

Cu₅SmSe₄ birləşməsi yarımkeçirici xassəyə malik olub radiotexnika və elektronikanın müxtəlif sahələrində tətbiq olunma imkanlarına malikdir. Cu₅SmSe₄ fazası 1048K temperatura qədər qızdırdıqda əmələgəlir və 1353K temperaturda inkonqruent əriyir [2]. İlk dəfə olaraq biz e.h.q. metodu ilə Cu₅SmSe₄ birləşməsinin termodinamik parametrlərini (entalpiya, entropiya, sərbəst Gibbs enerjisi) 300 – 380K temperatur intervalında elektrodların nisbi konsentrasiyalı (-)Sm_{bark}/Sm^{z+} elektrolitdə / (Sm₂Se₃)_x (Cu₂Se)_{1-x} (+) növ dövrəni tədqiq etmişik [3]. Burada z- Sm-nin ion yükü, x- xəlitədə Sm₂Se₃-ün molyar hissəsidir. Fazaların əmələgəlmə Gibbs enerjisi (ΔG_T⁰), entalpiya (ΔH_T⁰) və entropiya (ΔS_T⁰) uyğun düsturlarla hesablanmışdır:

$$\Delta \mathcal{E}_T^0 = -zFE$$

$$\Delta S_T^0 = -\frac{d(\Delta G_T^0)_p}{dT} = zF\left(\frac{dE}{dT}\right)_p$$

$$\Delta \mathcal{H}_T^0 = \Delta \mathcal{E}_T^0 + T \Delta S_T^0 = -zFE \left[E - T \left(\frac{dE}{dT} \right)_p \right]$$

Elektrolit kimi qliserinin kalium xlorid və samari ilə məhlulundan istifadə olunmuşdur. Aralıq tərkibli xəlitələr (30,00; 60,00; 65,00; 79,00; 85,00; 90,00 mol % Cu₂Se) ampulalarda elementlərdən Cu - 99,99%, Sm- markası CMM-1, Se - 99,999% sintez olunmuşdur, sonra rentgenfaza analizi aparılmışdır. Tədqiqat dörd ayrı faza sahələrinin e.h.q. – nin öyrənilməsinə bölünmüşdür. Cu₅SmSe₄ birləşməsinin termodinamik parametrlərinin alınmış nəticələri

$$\Delta \mathcal{E}^0 = -73,6 \text{ Kkal / mol,}$$

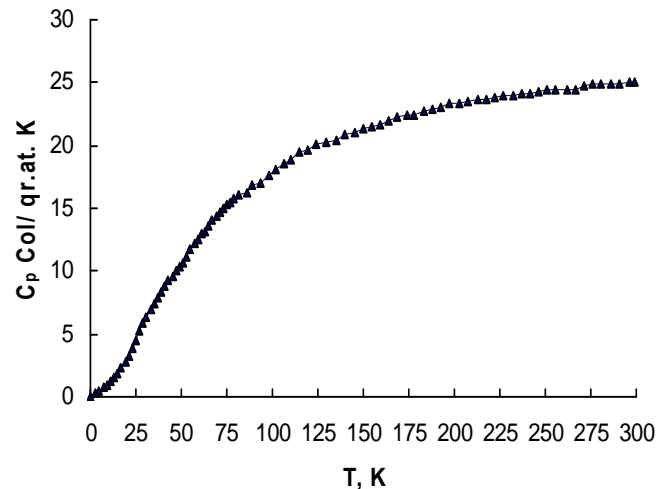
$$\Delta \mathcal{H}^0 = -94,7 \text{ Kkal / mol,}$$

$$\Delta \mathcal{H}^{gr} = -747,8 \text{ Kkal / mol,}$$

$$\Delta S^0 = -34,33 \text{ Kal / mol K,}$$

$$S^0 = 130,8 \text{ Kal / mol K [3].}$$

Şəkil 1- də Cu₅SmSe₄ birləşməsinin istilik tutumunun temperaturdan asılılığı qrafiki verilmişdir.



Şəkil 1. Cu₅SmSe₄ birləşməsinin istilik tutumunun temperaturdan asılılığı

İstilik tutumunun temperatur asılılığı bu birləşmədə heç bir anomalıyanın olmadığını göstərmişdir. Belə ki, C_p (T) monoton artan əyridir. Otaq temperaturuna yaxın temperaturunda C_p (T) özünün klassik qiymətinə çatır ~ 6 Kal / mol K. Ölçülən temperatur intervalında istilik tutumunun 47 qiyməti götürülmüşdür.

Cu₅SmSe₄ birləşməsinin istilik tutumunun temperaturdan asılılığına əsasən tərəfimizdən 80 – 300⁰K temperatur intervalında əsas termodinamik funksiyalar – entropiyanın (S_T – S₀), entalpiyanın (H_T – H₀) və sərbəst Gibbs enerjisinin ΔF dəyişməsi hesablanmışdır.

ΔS_T, ΔH_T və ΔF_T aşağıdakı formulalarla təyin edilmişdir:

Cu₂SmSe₄ BİRLƏŞMƏSİNİN İSTİLİK TUTUMU VƏ TERMODİNAMİK FUNKSİYALARI

$$\Delta S_T = \int_0^T \frac{C_p(T)}{T} \partial T$$

$$\Delta H_T = \int_0^T C_p(T) \partial T$$

$$\Delta F_T = - \left(S_T - \frac{\Delta H_T}{T} \right)$$

Bu üsulla hesablanmış termodinamik parametrlərin qiyməti standart temperaturda (T = 298,15K)

$$\Delta S_T = 421,6 \text{ Col / mol K};$$

$$\Delta H_T = 54,76 \text{ K Col / mol K};$$

$$\Delta F_T = - 237,9 \text{ Col / mol K}.$$

Qeyd edək ki, termodinamik parametrlər nəzəri tədqiqatlarda birləşmələrin sintezi və onların monokristallarının alınması ilə bağlı texnoloji proseslərin hesablanmasında istifadə olunur.

[1]. *J.P. Maud, M. Guittard.* C.r. Acad. Sc. C267, №14, 823, 1968.

[2]. *A.A. Калинин.* Лазерные кристаллы. М. Наука, 1975.

[3]. *Е.Р.Алиева, И.Я.Алиев, З.И.Сулейманов, А.С.Аббасов* Исследование термодинамических свойств системы Cu₂Se-Sm₂Se₃. Журнал «Физика», том XIII, № 4, Баку, «Элм», 2007, стр. 134-135.