

ТЕРМОДИНАМИКА ИСПАРЕНИЯ ТРИФТОРИДА ИТТРИЯ В ФОРМЕ МОЛЕКУЛ YF_3 И Y_2F_6

*Горохов Л.Н.,¹ Осина Е.Л.,*¹ Ковтун Д.М.²*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МГУ, Москва, Россия

*j-osina@yandex.ru

В связи с проводящимися работами по получению надежных термодинамических данных галогенидов иттрия выполнены новые расчеты функций для YF_3 и Y_2F_6 в газовой фазе с привлечением квантово-химических расчетов методами MP2 и CCSD(T).

В результате обработки литературных данных по давлению пара трифторида иттрия с использованием новых термодинамических функций молекул YF_3 получено уточненное значение энтальпии сублимации трифторида иттрия в форме мономера и рассчитана энтальпия образования YF_3 (г). Проведены квантово-химические расчеты молекул YF_3 и Y_2F_6 , из которых рассчитана энергия диссоциации димерных молекул на две мономерные. С использованием этих данных найдена энтальпия сублимации трифторида иттрия в форме димера и рассчитана энтальпия образования Y_2F_6 (г). Рассчитан состав пара трифторида иттрия: отношение давлений Y_2F_6 и YF_3 в интервале 1400–3000 К увеличивается от 2×10^{-4} до 2×10^{-2} . Полученные термодинамические и термохимические величины введены в базу данных программного комплекса ИВТАНТЕРМО.