

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ТРИХЛОРИДА ИТТРИЯ И ЕГО ДИМЕРА

*Горохов Л.Н.,¹ Осина Е.Л.,*¹ Осин С.Б.²*

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

**j-osina@yandex.ru*

Выполнен критический анализ экспериментальных и теоретических данных по структуре и частотам колебаний молекул трихлорида иттрия и его димера. Выбраны значения молекулярных постоянных и рассчитаны термодинамические функции. В результате обработки литературных данных по давлению пара трихлорида иттрия с использованием новых термодинамических функций молекул YCl_3 получено уточненное значение энтальпии сублимации трихлорида иттрия в форме мономера и рассчитана энтальпия образования YCl_3 (г). С использованием литературных данных по составу пара при температуре 1312 К найдена энтальпия сублимации трихлорида иттрия в форме димера и вычислена энтальпия образования Y_2Cl_6 (г). Рассчитан состав пара трихлорида иттрия в температурном интервале между 1317 и 1646 К: отношение давлений Y_2Cl_6 и YCl_3 увеличивается от 0,15 до 0,21. Полученные величины добавлены в базу данных программного комплекса ИВТАНТЕРМО.