**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТРИГАЛОГЕНИДОВ СКАНДИЯ В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ**

Аристова Н.М.\*, Белов Г.В.\*,\*\*

\**Объединенный институт высоких температур РАН, Россия,* ***125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2,*** *e-mail:* [*aristo2012@yandex.ru*](mailto:aristo2012@yandex.ru)

\*\* *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова. Россия.*

*119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3, ГСП-1, МГУ, химический факультет. e-mail: gbelov@yandex.ru*

Галогениды скандия нашли практическое применение в электротехнической промышленности. В качестве одного из компонентов наполнителя в безртутной металлогалогенной лампе используются тригалогениды скандия, в частности, ScBr3 и ScI3. Техническим результатом этого изобретения является повышение экологической безопасности производства, эксплуатации и хранения ламп. Безводные очищенные от кислорода ScF3 и ScCl3 применяется в качестве исходных реагентов в процессе получения металлического скандия.

Для решения ряда научных и технических проблем необходимы знания о термодинамических свойствах тригалогенидов скандия. Уравнения теплоемкости в интервалах температур 298.15 - *Т*пл ( К) получены в результате анализа и обработки высокотемпературных данных по энтальпии, имеющихся в литературе [1-3]. В случае отсутствия экспериментальных данных термодинамические характеристики были оценены расчетным путем.

Уравнения для теплоемкостей кристаллических тригалогенидов скандия в температурных интервалах 298.15-*Т*пл ( К ) :

ScF3 (298.15-1825 К) *Ср*o(*T*) = 98.923 + 2.930·10-3·*T* - 14.487·105·*T* -2

ScCl3 (298.15-1240 К) *Ср*o(*T*) = 95.904 + 15.143·10-3·*T* - 7.484·105·*T* -2

ScBr3 (298.15-1242 К) *Ср*o(*T*) = 95.220 + 16.752·10-3·*T* - 4.635·105·*T* -2

ScI3 (298.15-1225 К) *Ср*o(*T*) = 83.115 + 74.193·10-3·*T* – 81.446·10-6·*T* 2 +

+36.019·10-9·*T* 3 ( в Дж⋅K‑1⋅моль‑1 )

Теплоемкость жидкого ScCl3 принята на основании экспериментальных данных [1], в то время как для остальных тригалогенидов скандия теплоемкости жидкой фазы оценены. Энтальпии плавления ScF3, ScCl3 и ScI3 были определены в работах [2], [1] и [3] соответственно. С учетом этих данных оценена энтальпия плавления ScBr3.

С помощью полученных уравнений *Ср*o(*T*) для твердого состояния и данных для жидкой фазы рассчитаны термодинамические функции: энтропии, энергии Гиббса, изменения энтальпии - в интервале температур 298.15-2500 К для ScF3 и до 2000 К для ScCl3, ScBr3 и ScI3. Во всех случаях выполнена оценка погрешностей рекомендуемых величин.

Полученные данные занесены в базу данных информационно-справочной системы ИВТАНТЕРМО.

Работа выполнена при финансовой поддержке по Программе  
фундаментальных исследований ПРАН по стратегическим направлениям развития науки  №1 "Фундаментальные проблемы математического моделирования" (коорд. ак. Бетелин В.Б.).

**ЛИТЕРАТУРА**

1. A. S. Dworkin, M. A. Bredig. *High Temper. Sci*. **3** (1971) 81.

2. F. H. Spedding, D. J. Beaudry, D. C. Henderson, J. Moorman. *J. Chem. Phys*. **60** (1974) 1578.

3. P. A. G. O'Hare, G. K. Johnson, I. R. Tasker, H. E. Flotow, C. W. Struck. *J. Chem. Thermodyn*. **19 (**1987) 77.