

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ХЛОРИДА НАТРИЯ

Игишева А.Л., Соболева Э.Г.

Научный руководитель: Соболева Э.Г., к.ф.-м.н.

Юргинский технологический институт (филиал) Томского политехнического университета, 652055,

Россия, г. Юрга, ул. Ленинградская, 26

E-mail: sobolevaeno@mail.ru

THERMODYNAMIC PROPERTIES OF SODIUM CHLORIDE

Igisheva A.L., Soboleva E.G.

Scientific Supervisor: Soboleva E.G., c.p.-m.s.

Yurga Technological Institute (branch) of Tomsk Polytechnic University,

652055, Russia, Yurga, str. Leningradskaya, 26

E-mail: sobolevaeno@mail.ru

Measured values of the molar heat capacity of sodium chloride, depending on the temperature (293-673 K). According to the experimental curves $C_p(T)$ by numerical integration to calculate the changes of thermodynamic functions: enthalpy, entropy, Gibbs energy.

Среди большого класса кристаллических диэлектриков особый интерес представляет изучение ионных кристаллических диэлектриков и, в частности, монокристаллов галогенидов щелочных металлов, так как они служат идеальным объектом для построения и проверки различных моделей кристаллических решеток, теорий дислокационной неупругости, являются модельными объектами в радиационном материаловедении и геофизике [1].

В качестве объекта исследования были использованы оптически однородные монокристаллы NaCl, выращенные из водных растворов этих химически чистых солей при комнатной температуре. Ориентированные по плоскостям куба и октаэдра монокристаллы представляли собой исходный материал для получения способом мокрой нити образцов в виде стержней с примерными размерами $10 \times 5 \times 5$ мм³. Некоторые физические свойства хлорида натрия приведены в таблице 1.

Таблица 1

Некоторые физические свойства NaCl (300 K) [2]

Свойство	NaCl
1. Плотность ρ , 10^3 кг/м ³	2,17
2. Температура плавления $T_{пл}$, К	1074
3. Температура Дебая θ , К	299,2
4. Энергия решетки U , кДж/моль	765
5. Энтропия вещества в стандартном состоянии S , Дж/моль·К	72,36
6. Молярная теплоемкость при постоянном давлении C_p , Дж/моль·К	49,71
7. Энтальпия образования ΔH , кДж/моль·К	-410,9
8. Энергия Гиббса образования ΔG , кДж/моль	-384,0
9. Соотношение Коши $\Delta = c_{12}/c_{44}$	1,03
10. Фактор упругой анизотропии $\dot{A} = \frac{2\tilde{n}_{44}}{\tilde{n}_{11} - \tilde{n}_{12}}$	0,70

В работе использовался метод монотонного охлаждения, с помощью которого для объекта исследования прибором БИТ-400 были измерены удельные теплоемкости в температурном интервале 293–673 К, с шагом 10 К с погрешностью не более 5 %. Принцип действия прибора основан на тепловой стимуляции образца с последующим монотонным охлаждением образца и регистрацией процесса охлаждения адиабатической камеры с образцом.

Влияние температуры на молярную теплоемкость кристалла NaCl представлена на рис. 1. Видно, что с увеличением температуры теплоемкость возрастает, на зависимости $C_p(T)$ нет каких-либо экстремумов.

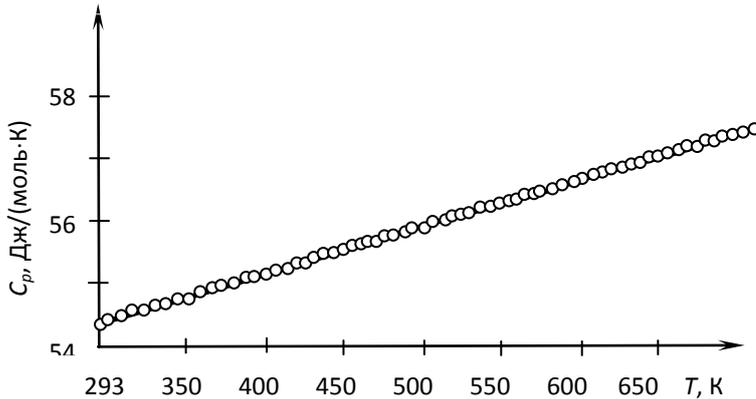


Рис.1. Влияние температуры на теплоемкость NaCl [3]

Зависимость теплоемкости от температуры может быть описана уравнением Майера-Келли (в единицах Дж·моль⁻¹·К⁻¹) [4]:

$$C_p = 45,94 + 16,32 \cdot 10^{-3} T, \quad (1)$$

На основании соотношения (1) рассчитаны термодинамические функции (изменения энтальпии $H_T^0 - H_{293}^0$ и энтропии $S_T^0 - S_{293}^0$). Для этого использованы известные уравнения, связывающие теплоемкость C_p с функциями энтальпии и энтропии [5]:

$$H_T - H_0 = \int C_p(T) dT,$$

$$S_T - S_0 = \int \frac{C_p(T)}{T} dT.$$

Для определения изменения энергии Гиббса при нагреве от температуры T_1 до температуры T_2 воспользовались уравнением [5]:

$$G_{T_2}^0 - G_{T_1}^0 = \int_{T_1}^{T_2} \tilde{N}_s dT - (T_2 - T_1) \cdot S_{T_1}^0 - T_2 \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT.$$

Сглаженные значения молярной теплоемкости и рассчитанные по ним изменения энтропии, энтальпии и энергии Гиббса хлорида натрия представлены в таблице 2.

Таблица 2

Молярная теплоемкость, термодинамические функции и энергия Гиббса NaCl

T, K	$C_p, Дж/(моль·К)$	$S_T^0 - S_{293}^0,$ Дж/(моль·К)	$H_T^0 - H_{293}^0,$ кДж/(моль·К)	$G_T^0 - G_{293}^0,$ кДж/(моль·К)
293	50,72	–	–	–
313	51,05	3,36	1,02	-1,48
333	51,37	6,53	2,04	-3,03
353	51,70	9,54	3,07	-4,64
373	52,03	12,40	4,11	-6,30
393	52,35	15,13	5,15	-8,03
413	52,68	17,75	6,20	-9,81
433	53,01	20,25	7,26	-11,64
453	53,33	22,67	8,32	-13,53
473	53,66	24,99	9,39	-15,46
493	53,99	27,24	10,47	-17,43
513	54,31	29,42	11,55	-19,46
533	54,64	31,52	12,64	-21,53
553	54,96	33,56	13,74	-23,63
573	55,29	35,55	14,84	-25,79
593	55,62	37,49	15,95	-27,99
613	55,94	39,37	17,07	-30,22
633	56,27	41,21	18,19	-32,50
653	56,60	43,00	19,32	-34,81
673	56,92	44,76	20,45	-37,17

Таким образом, зная основные закономерности, присущие термодинамическим системам, и владея аппаратом дифференциальных уравнений термодинамики, мы рассмотрели термодинамические свойства хлорида натрия, такие как энтальпия, энтропия, теплоемкость, энергия Гиббса, обращая при этом главное внимание на анализ характера зависимостей, связывающих одни свойства исследуемого вещества с другими.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Беломестных В.Н., Похолков Ю.П., Ульянов В.Л., Хасанов О.Л. Упругие и акустические свойства ионных, керамических диэлектриков и высокотемпературных сверхпроводников. – Томск: СТТ, 2001. – 226 с.
2. Беломестных В. Н. , Соболева Э. Г. Коэффициенты Пуассона щелочно-галогидных кристаллов. Ч.II. Галогениды натрия // Известия Томского политехнического университета. - 2013 - Т. 323 - №. 2. - С. 140-142.
3. Игишева А.Л. Теплоемкость кристалла NaCl в области температура 293-673 К // Прогрессивные технологии и экономика в машиностроении: сборник трудов VI Всероссийской научно-практической конференции для студентов и учащейся молодежи, Юрга, 9-11 Апреля 2015. - Томск: Изд-во ТПУ, 2015 - С. 563-565.
4. Краткий справочник физико-химических величин / Под ред. К.П. Мищенко и А.А. Равделя. – Л.: Химия, 1974 г. – 200 с.
5. Семиохин И.А. Физическая химия: Учебник. Изд-во МГУ, 2001. 272 с.