

властивостей та процесів фазоутворення доцільне проведення термодинамічного аналізу процесів, що протікають, на основі термодинамічних розрахунків: ΔH^0_{298} – зміна ентальпії утворення сполуки при 298 °К; S^0_{298} – ентропія сполуки при 298 °К; рівняння залежності теплоємності від температури $C_p=f(T)$ і ΔG^0_{298} – зміна енергії Гіббса утворення сполуки при 298 °К.

Розрахунки ΔH^0_{298} проводилися по наслідку із закону Геса [2]; S^0_{298} – по напівемпіричній формулі Яцимівського (на можливість використання цієї методики для даного типу сполук вказано в роботі А. С. Бережного) [3]; рівняння теплоємності були визначені за ентропійним методом, розробленим Н. А. Ландія, в основі якого лежить зв'язок між теплоємностями та ентропіями твердих речовин [4]. Для розрахунків використовували вихідні термодинамічні дані для γ - Al_2O_3 , як одного з твердих оксидів, що є часткою складної кисневої сполуки; ΔG^0_{298} – відповідно до формул, наведених в [5]. Результати розрахунків наведені в табл. 1 та табл. 2.

Таблиця 1

Термодинамічні константи потрійних сполук, що мають загальну формулу
 $BaAl_xFe_{12-x}O_{19}$

Сполука	$-\Delta H^0_{298}, \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$	$S^0_{298}, \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$	$-\Delta G^0_{298}, \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$
$BaAlFe_{11}O_{19}$	5894.23	591.38	6070.46
$BaAl_2Fe_{10}O_{19}$	6302.15	572.66	6472.80
$BaAl_3Fe_9O_{19}$	6710.07	553.93	6875.14
$BaAl_4Fe_8O_{19}$	7117.99	535.21	7277.48
$BaAl_5Fe_7O_{19}$	7525.91	516.48	7679.82
$BaAl_6Fe_6O_{19}$	7933.83	502.08	8083.45
$BaAl_7Fe_5O_{19}$	8341.75	479.03	8484.50
$BaAl_8Fe_4O_{19}$	8749.67	460.31	8886.84
$BaAl_9Fe_3O_{19}$	9157.99	441.58	9289.18
$BaAl_{10}Fe_2O_{19}$	9565.51	422.86	9691.52
$BaAl_{11}FeO_{19}$	9973.43	404.13	10093.86

Таблиця 2

Константи рівнянь теплоємності потрійних сполук, що мають загальну формулу
 $BaAl_xFe_{12-x}O_{19}$

Сполука	$C_p=a+bT+cT^{-2}, \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$			Інтервал тем пера тур, К
	a	$b \cdot 10^3$	$-c \cdot 10^{-5}$	
$BaAlFe_{11}O_{19}$	179.43	33.15	—	700 – 1148
$BaAl_2Fe_{10}O_{19}$	167.9	44.85	—	630 – 1185
$BaAl_3Fe_9O_{19}$	163.24	54.40	—	570 – 1225
$BaAl_4Fe_8O_{19}$	157.35	62.87	—	518 – 1268