

Калориметрическое определение стандартной энтальпии образования станнина**Научный руководитель – Осадчий Евгений Григорьевич****Баранов Александр Валерьевич***Студент (бакалавр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра геохимии, Москва, Россия

E-mail: baranov.alex911@mail.ru

Синтетические минералы группы станнина (МГС) и родственные соединения интенсивно используются в последнее время в качестве функциональных материалов. Прежде всего, в качестве перспективных материалов для солнечных батарей. Эффективность геохимических и прикладных исследований тормозится практически полным отсутствием термодинамических свойств МГС, особенно, полученных экспериментально методами классической термохимии. В последнее время появилось большое количество публикаций по определению энтальпии образования МГС расчетом из первых принципов (*ab-initio*), однако расхождение в данных достигает до $300 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$ [3, 4].

В ходе нашей работы мы провели экспериментальное определение стандартной энтальпии образования станнина калориметрическим методом с помощью вакуумно-блочного калориметра, разработанного в ИЭМ РАН и предназначенного для прямого определения теплоты реакций, проходящих в калориметре [2]. Ввиду невозможности синтеза станнина из элементов (избыточное давление паров серы может привести к разрушению ампулы), изучалась реакция (R_1) его образования из простых сульфидов (Cu_2S , FeS_2 , SnS), стандартные энтальпии, образования которых известны:



Было проведено 7 опытов по измерению теплоты реакции (R_1). Среднее значение получилось равным $-(60.75 \pm 1.89) \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$. Стандартная энтальпия образования станнина из элементов согласно реакции (R_1) определяется следующим образом:

$$\Delta_f H^0_{298.15}(\text{Cu}_2\text{FeSnS}_4) = \Delta_{(R_1)} H^0_{298.15} + \Delta_f H^0_{298.15}(\text{Cu}_2\text{S}) + \Delta_f H^0_{298.15}(\text{FeS}_2) + \Delta_f H^0_{298.15}(\text{SnS})$$

Используя данные по стандартным энтальпиям образования сульфидов из источника [1], получаем следующее значение стандартной энтальпии образования станнина из элементов $\Delta_f H^0_{298.15}(\text{Cu}_2\text{FeSnS}_4) = -(413.59 \pm 1.89) \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$.

Источники и литература

- 1) Глушко В. П. (ред) Термические константы веществ, 1978
- 2) Флейшер Л. Л., Столярова Т. А. Автоматизация процесса измерения электрической энергии высокотемпературной калориметрической установки //Измерительная техника. – 1978. – №. 2. – С. 60.
- 3) Jackson A. J., Walsh A. *Ab initio* thermodynamic model of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ //Journal of Materials Chemistry A. – 2014. – Т. 2. – №. 21. – С. 7829-7836.
- 4) Shang S. L. et al. Insight into structural, elastic, phonon, and thermodynamic properties of α -sulfur and energy-related sulfides: a comprehensive first-principles study //Journal of Materials Chemistry A. – 2015. – Т. 3. – №. 15. – С. 8002-8014.