

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕРНАРНЫХ ГАЛОГЕНИДОВ ЦЕЗИЯ-СВИНЦА

*Заславский А.А., Малышкин Д.А., Мазурин М.О., Середа В.В.,*

*Иванов И.Л., Цветков Д.С., Зуев А.Ю.*

Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Тернарные галогениды  $\text{CsPbX}_3$ ,  $\text{CsPb}_2\text{X}_5$  и  $\text{Cs}_4\text{PbX}_6$  ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ ) являются перспективными полупроводниковыми материалами в виду потенциальной возможности их использования в оптоэлектронике и фотовольтаике, в частности при создании фотоэлементов солнечных батарей. Серьёзное внимание уделяется определению устойчивости данных соединений в реальных условиях функционирования солнечных фотоэлементов как по отношению к распаду на составные компоненты, так и по отношению к действию кислорода, углекислого газа и паров воды, находящихся в воздухе. Количественную оценку стабильности соединений можно получить с помощью аппарата равновесной химической термодинамики, эта задача требует в том числе определения таких характеристик, как энтальпии образования и изобарные теплоёмкости.

Синтез поликристаллических образцов  $\text{CsPbX}_3$  осуществляли посредством кристаллизации из расплава,  $\text{Cs}_4\text{PbX}_6$  – методом твердофазного спекания,  $\text{CsPb}_2\text{X}_5$  – методом осаждения из раствора. В качестве исходных реагентов для получения  $\text{CsPbX}_3$  и  $\text{Cs}_4\text{PbX}_6$  ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ ) были использованы галогениды цезия и свинца  $\text{CsX}$  и  $\text{PbX}_2$ , взятые в стехиометрических количествах. Навески реагентов смешивали и подвергали измельчению в агатовой ступке, полученные порошки прессовали в виде таблеток диаметром 1 см и высотой около 0.5 см, которые запаивали под вакуумом в кварцевых ампулах и подвергали термической обработке по следующим схемам:  $\text{CsPbX}_3$  быстро нагревали и выдерживали при  $T = 630^\circ\text{C}$  (12 ч), затем охлаждали со скоростью  $2^\circ\text{C}/\text{мин}$ ;  $\text{Cs}_4\text{PbX}_6$  трижды отжигали по 24 ч при  $T = 300^\circ\text{C}$  со скоростью нагрева/охлаждения  $1^\circ\text{C}/\text{мин}$  и промежуточным перетиранием образцов. В качестве исходных реагентов при синтезе  $\text{CsPb}_2\text{X}_5$  использовались  $(\text{CH}_3\text{COO})_2\text{Pb} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{HX}$  и  $\text{CsX}$  ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ ), осадки отделяли на стеклянном фильтре, промывали этанолом и высушивали при  $T = 50^\circ\text{C}$  (1 ч).

Определение стандартных энтальпий образования проводилось с помощью калориметрии растворения. Полученные значения для всех исследуемых образцов являются отрицательными величинами порядка  $-20$  кДж/моль, что свидетельствует о термодинамической устойчивости данных веществ при  $T = 25^\circ\text{C}$ . Для образцов  $\text{CsPbX}_3$  установлены температурные зависимости инкрементов энтальпии методом калориметрии сброса (в интервале 373 – 873 К) и температурные зависимости изобарной теплоёмкости посредством адиабатной калориметрии (в интервале 77 – 350 К).

*Работы выполнены при финансовой поддержке РФФ (грант № 24-23-00492).*