

ских потерь. Аналогичные гипотезы были высказаны в экспериментах по изучению способов получения пористого диоксида кремния [3].

1. Почтарь, О.В. Исследование свойств диоксида титана модифицированного углеродом. / Н.А. Шелестов, О.В. Почтарь // Интернет конференция участников ГПО ТУСУР. – 2016. – 2 с.
2. Троян, П.Е, Сахаров, Ю. В. Электрическая формовка тонкопленочных структур металл–диэлектрик–металл в сильных электрических полях. Монография – Томск, издательство ТУСУРа, 2013. – 247 с.
3. Пат. 2 439 743 РФ. Способ получения пористого диоксида кремния РФ / П.Е. Троян, Ю.В. Сахаров, С.П. Усов (РФ). № 2 010 118 778 / 28; заявл. 11.05.2010; опубл. 10.01.2012. Бюл. № 1.

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ УСЛОВИЙ ГИДРОХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ СЕЛЕНИДОВ МЕДИ (I) И (II)

Тими́на А.А.<sup>1\*</sup>, Федорова Е.А.<sup>1</sup>, Маскаева Л.Н.<sup>1,2</sup>, Марков В.Ф.<sup>1,2</sup>

<sup>1)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2)</sup> Уральский институт ГПС МЧС России, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [aatimina@mail.ru](mailto:aatimina@mail.ru)

## THERMODYNAMIC ANALYSIS OF HYDROCHEMICAL DEPOSITION CONDITIONS OF COPPER (I), (II) SELENIDES

Timina A.A.<sup>1\*</sup>, Fedorova E.A.<sup>1</sup>, Maskaeva L.N.<sup>1,2</sup>, Markov V.F.<sup>1,2</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> Ural Institute of State Fire Service of EMERCOM of Russia, Ekaterinburg, Russia

Boundary conditions of formation copper selenide  $Cu_2Se$  and  $CuSe$  and also its hydroxides defines by means of calculation of ionic equilibrium with using of thermodynamic constants for systems “copper chloride – tartaric acid– sodium selenosulphate” taking into account the crystallization factorat 298 K.

Выбор состава реакционной смеси и установление параметров гидрохимического синтеза пленок халькогенидов металлов значительно облегчается после проведения термодинамических расчетов, позволяющих определить граничные условия осаждения требуемого соединения, в частности селенидов одно- и двухвалентной меди, а также области возможного образования примесных гидроксидных фаз металлов. С этой целью был проведен анализ ионных равновесий в многокомпонентной системе “ $CuCl_2 - C_4H_6O_6 - Na_2SeSO_3$ ”, при этом в его основу легло положение об обратимом характере гидролитического разложения халькогенизатора.

В качестве критерия образования твердой фазы селенидов металла с учетом создания необходимого пересыщения  $\Delta_{кр}$ , обеспечивающего образование зародышей критического размера, использовали соотношение:

$$ПР_{Me_mSe_n} \cdot \Delta_{кр} = [Me^{n+}]^m \cdot [Se^{2+}]^n = ПИ_{Me_mSe_n}, \quad (1)$$

где ПР – произведение растворимости соответствующего селенида металла; ПИ – ионное произведение, т.е. произведение концентраций свободных ионов металла  $[Me^{2+}]$  и селенид-ионов  $[Se^{2-}]$ .

Поскольку велика вероятность существования в реакционной смеси как одно-, так и двухвалентной меди, при проведении анализа ионных равновесий учитывали образование всех комплексных форм металла.

Граничные условия образования твердых фаз  $CuSe$  (1),  $Cu_2Se$  (2),  $CuOH$  (3) и  $Cu(OH)_2$  (4) в системе « $CuCl_2 - C_4H_6O_6 - Na_2SeSO_3$ », выполненные при температуре 298 К в виде зависимостей  $pC_H = f(pH)$ , представлены на рисунке 1.

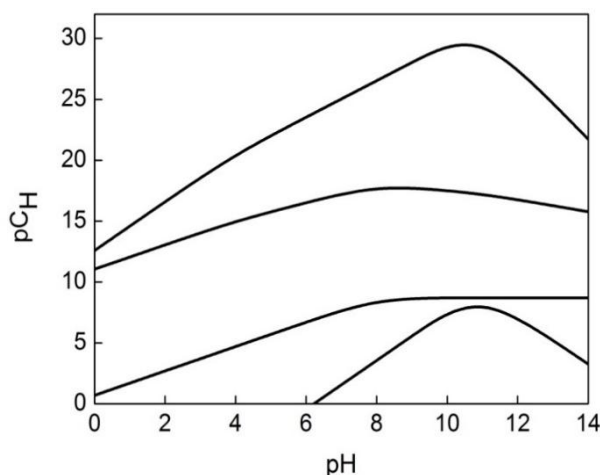


Рис. 1. Граничные условия образования селенидов  $CuSe$  (1),  $Cu_2Se$  (2) и гидроксидов  $CuOH$  (3),  $Cu(OH)_2$  (4) в системе « $CuCl_2 - C_4H_6O_6 - Na_2SeSO_3$ ».

Из сопоставления положения границ образования селенидов  $CuSe$  (1),  $Cu_2Se$  (2) и гидроксидов  $CuOH$  (3) и  $Cu(OH)_2$  (4) следует, что в диапазоне  $pH = 0-14$  образуется индивидуальная твердая фаза селенида  $CuSe$  между кривыми 1 и 2. В области, расположенной между кривыми 2 и 3, возможно совместное осаждение селенидов одно- и двухвалентной меди. В условиях, охватывающих пространство ниже кривых 3 и 4, происходит формирование одновременно с  $CuSe$  (1) и  $Cu_2Se$  (2) примесных кислородсодержащих соединений меди  $CuOH$  и  $Cu(OH)_2$ , причем, если фаза  $CuOH$  существует во всем рассматриваемом диапазоне  $pH$ , то гидроксид меди (II) в более узкой области значений от 6.1 до 14.