

# CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub> BƏRK MƏHLUL KRİSTALININ YÜKSƏK TEMPERATURLU RENTGENDİFRAKSIYA ÜSULU İLƏ İSTİDƏN GENİŞLƏNMƏ XASSƏSİNİN TƏDQIQI

**S.İ. İBRAHİMOVA**

*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutu,  
Azərbaycan, Bakı, H. Cavid pr.131, Az-1143*

CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub> bərk məhlul kristalı sintez edilmiş və onun yüksəktemperaturlu rentgendifraksiya üsulu ilə xətti və həcmi istidən genişlənmə xassəsi tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, 350-1200K temperatur intervalında kristalın xətti və həcmi parametrlərində ciddi dəyişiklik müşahidə edilmir ki, bu da kristalın xarici təsirlərə davamlı olması ilə bağlıdır.

**Açar sözləri:** Kristal, rentgen-difraksiya, istidən genişlənmə, xətti və həcmi parametr.

**PACS:** 544.223.

## GİRİŞ

Məlumdur ki, temperaturun, təzyiqin, şüalanmanın, elektrik sahəsinin təsirindən asılı olaraq istənilən cismin xətti və həcmi ölçülərinin dəyişməsi prosesi böyük elmi və təcrübə əhəmiyyətə malikdir. Qeyd etmək lazımdır ki, göstərilən xarici təsirlər nəticəsində maddələrdə baş verən xətti və həcmi dəyişmələr bütün qurğular, cihazlar və maşınqayırma sənayesində mütləq nəzərə alınmalıdır [1, 2]. Fiziki yanaşmada bu proses maddənin istilikdən genişlənmə qanunu kimi qəbul edilir və  $L$  xətti ölçülü cismin temperaturunu  $\Delta T$  qədər qızdırdıqda onun ölçüsü  $\Delta L = \alpha L \Delta T$  qədər genişlənir. Burada  $\alpha$  - istidən genişlənmə əmsalındır. Qeyd edək ki, verilən formul cismin temperaturdan asılı olaraq sahə və həcmnin dəyişməsinin hesabı üçün də eynidir.

Cismin ölçüsünün istidən genişlənmə əmsalını təyin etməyin bir neçə üsulu var. Bunlardan ən əsası müxtəlif xarakteristikaya malik dilatometriya və yüksək temperaturlu rentgen difraksiya üsullarıdır.

Bu iş yüksək temperaturlu rentgen-difraksiya üsulundan istifadə edərək, CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub> bərk məhlul kristalında bəzi qəfəs parametrlərinin istidən genişlənmə prosesinin tədqiqinə həsr olunub.

## EKSPERİMENTAL HİSSƏ

A<sub>2</sub>X-B<sub>2</sub>X<sub>3</sub>(A-Cu, Ag; B-Ga, In; X-S, Se, Te) sistemlərində əmələ gələn mürəkkəb birləşmələr və bərk məhlullar deffekt tip quruluşa malik yarımkeçiricilər sinfinə aid olan [3-5] kristallar olmaqla geniş tətbiq sahələri olan materiallar sayılırlar. Qeyd olunan materiallar bir çox optoelektron cihazlar hazırlanması sahəsində perspektiv əhəmiyyətə malikdirlər [6, 7]. Qeyd etmək lazımdır ki, xalkopirit tip quruluşa malik birləşmə və bərk məhlul kristalları bu cəhətdən olduqca maraqlı tədqiqat obyektləri sayılırlar. Tədqiqat üçün seçilən CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub> bərk məhlul kristallarına maraq da bununla əlaqədardır. Qeyd etmək lazımdır ki, CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub>-nin alınması və onun kristal quruluşuna həsr edilən məqalə [8] işdə verilmişdir. Yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi bu işdə CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub> kristalında bir sıra qəfəs parametrlərinin geniş temperatur intervalında (1200 K) istidən genişlənmə xüsusiyyətinin tədqiqinə həsr edilir.

Tədqiqatın aparılması üçün tədqiqata cəlb edilən

kristalın stexiometriyasına uyğun çəkilmiş elementlər kvarts ampulaya doldurulmuş, havası  $\sim 10^{-2}$  Pa tərtibində sorulmuş, ağız bağlanaraq bir zonalı sobaya yerləşdirilmiş və temperaturu 50K/saat sürətlə 1200K-ə qədər artırılaraq 1.5 saat müddətində saxlanılmışdır. Bundan sonra sobanın temperaturu 700K-ə qədər soyudularaq 50 saat müddətində tablanma prosesində saxlanılmışdır. Tablanma prosesi bitdikdən sonra, sintez olunmuş nümunənin faza tərkibini müəyyən etmək və nəzərdə tutulan eksperimenti aparmaq üçün nümunədən olduqca narın ovuntu hazırlanmışdır. Qeyd edək ki, yüksək temperaturlu rentgendifraksiya işləri Almaniyaya istehsalı olan D8 ovuntu difraktometrində  $\sim 8 \cdot 10^3$  tərtib vakuum şəraitində CuK $\alpha$ -şüalanmada  $\lambda=1.5406$ , 40mA, 40kv-da aparılmışdır. Temperaturun artma sürəti 3K/dəq olmuşdur. Nəzərdə tutulan tədqiqat işinin aparılması üçün, hazırlanmış dispers ovuntu cihazın nümunə üçün olan xüsusi müstəvi lövhəsinin üzərinə tökülmüş, müəyyən tərtibdə yüngülcə sıxılmış, cihaz işə salınaraq əvvəlcə otaq temperaturunda ondan rentgen difraksiya spektrləri alınmış, atom müstəvilərəarası məsafələri ( $d$ ) və, ən müasir hesablama proqramı olan TOPAS 4.2-dən istifadə edərək, nümunədən alınmış difraksiya spektrlərinin Müllər indeksləri ( $hkl$ ) hesablanmışdır. Alınan nəticələrin təhlili göstərmişdir ki, nümunə bir fazalıdır və onun qəfəs parametrləri  $a=5.6792\text{Å}$ ,  $c=11.3344\text{Å}$ , fəz.qr. I42c. Quruluş tetraqonalıdır və deffekt tip xalkopirit kimidir. Tədqiq edilən kristalın quruluşunun xalkopirit olmasını nəzərə alaraq tərkibin quruluşa uyğun olması üçün onun 2/5-ə vurmaq tələb olunur.

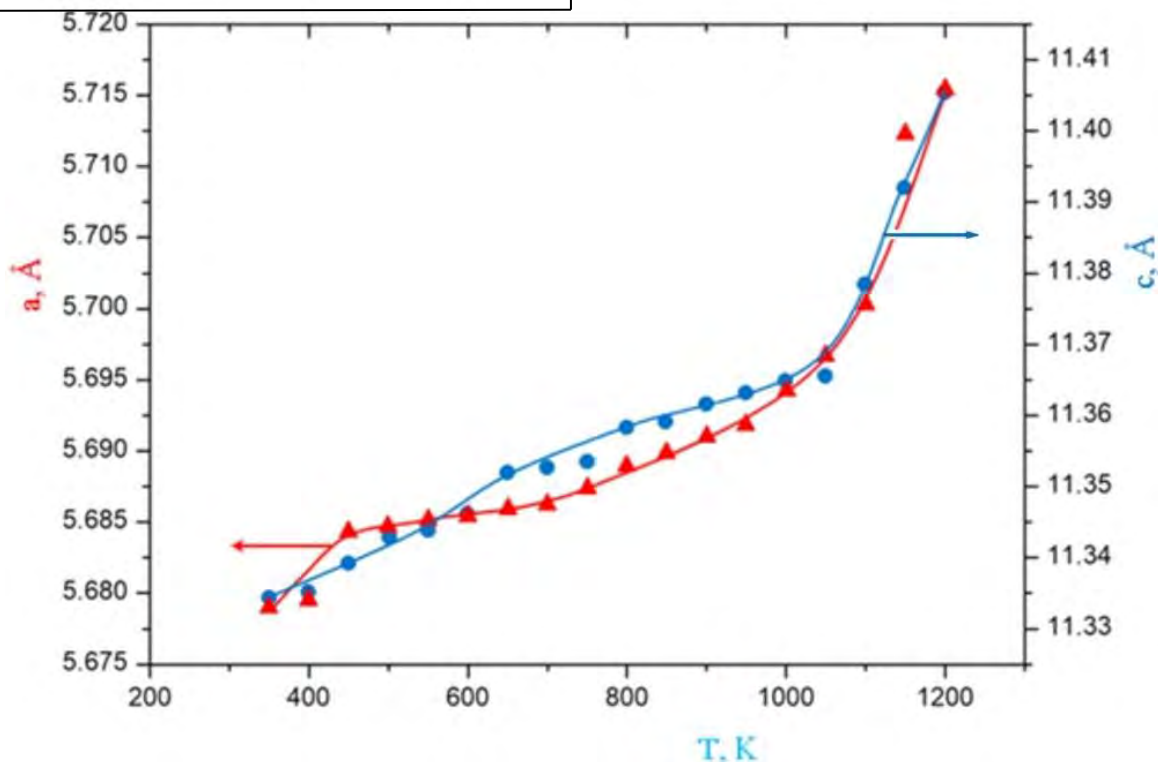
$(\text{CuGaIn}_2\text{Se}_5) \cdot 2/5 = \text{Cu}_{0.4}\text{Ga}_{0.4}\text{In}_{0.8}\text{Se}_2$  yalnız bu halda  $z=4$  olur.

Növbəti etapda nümunənin istilikdən genişlənmə xüsusiyyətinin təyin edilməsi üçün lazım olan eksperimentlərin alınmasına başlandı. Bunun üçün otaq temperaturunda tədqiq edilən olduqca narın ovuntudan istifadə edildi və ondan yuxarıda göstərilən qayda ilə hər 50K-dən bir 350-1200K intervalında difraktoqramlar (rentgen difraksiya spektrləri) alındı. Onların hər birindən  $2\theta$ -lara uyğun olan atom müstəvilərəarası məsafələr ( $d$ ), Müllər indeksləri ( $d_{hkl}$ ), kristalın qəfəs parametrləri  $a = b, c$ , qəfəsin həcmi ( $V$ )

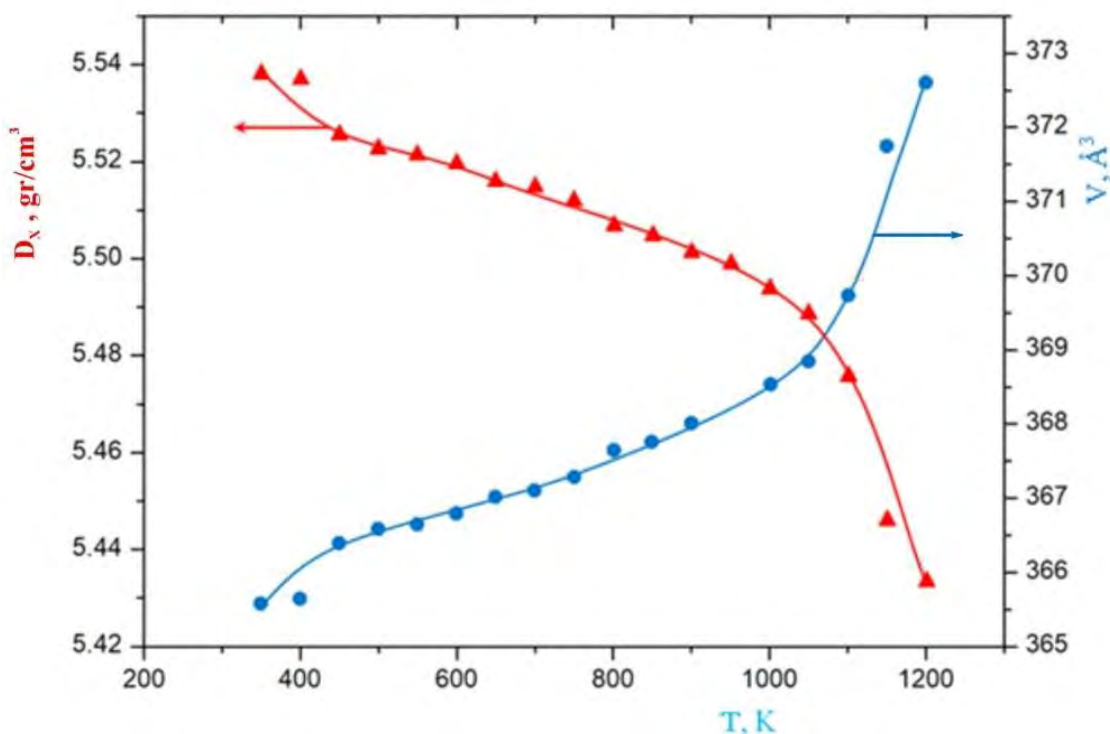
və rentgen sıxlığı hesablanmışdır. Həmin nəticələr cədvəl 1-də, onlar əsasında qurulan əyrilər isə şəkil 1 və şəkil 2-də verilmişdir.

Aparılan eksperimentlər və əldə edilən nəticələr əsasında demək olar ki, olduqca geniş praktik əhəmiyyəti olan materialların istidən genişlənmə hadisəsini dilatometrik üsulla yanaşı, yüksək temperaturlu rentgendifraksiya üsulu ilə də tədqiq etmək xüsusi əhəmiyyətə malikdir və bəlkə də bu üsul daha əhatəli üsuldur. Bu mənada aparılan tədqiqatın nəticələrinə

yanaşdıqda məlum olur ki, defekt xalkopirit tip quruluşlar üçün xarakter olan temperatura davamlı olmalarını bir daha təsdiq edir. Belə ki, göstərilən qrafiklərin təhlili göstərir ki, kristalın xətti, həcmi və rentgen  $D_x$  kəmiyyətlərinin temperaturdan asılı dəyişmələr sinxron xarakterlidir və göstərilən temperatur intervalında kristal qəfəs parametrlərinin xətti və həcmi dəyişmə xarakterləri ədəbiyyatda mövcud nəticələrə uyğundur [9,10].



Şəkil 1. CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub> kristalında a və b parametrlərinin temperatur asılılıqları.



Şəkil 2. CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub> kristalında qəfəs həcmnin və xüsusi çəkinin temperatur asılılıqları.

CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub>-nin qəfəs parametrlərinin temperaturdan asılılıq cədvəli.

T(K)	d(400)	a=b	d(800)	c	V Å <sup>3</sup>	D <sub>x</sub> (q/sm <sup>3</sup> )
350	1,4198	5,6792	1,4168	11,3344	365,5719	5,538145
400	1,4199	5,6796	1,4169	11,3352	365,6493	5,536974
450	1,4211	5,6844	1,4174	11,3392	366,3968	5,525677
500	1,4212	5,6848	1,4179	11,3432	366,5776	5,522951
550	1,4213	5,6852	1,418	11,344	366,6551	5,521785
600	1,4214	5,6856	1,4183	11,3464	366,7843	5,51984
650	1,4215	5,686	1,419	11,352	367,0169	5,516341
700	1,4216	5,6864	1,4191	11,3528	367,0944	5,515176
750	1,4219	5,6876	1,4192	11,3536	367,2753	5,512461
800	1,4223	5,6892	1,4198	11,3584	367,6373	5,507032
850	1,4225	5,69	1,4199	11,3592	367,7666	5,505096
900	1,4228	5,6912	1,4202	11,3616	367,9995	5,501612
950	1,423	5,692	1,4204	11,3632	368,1548	5,499292
1000	1,4236	5,6944	1,4206	11,3648	368,5172	5,493883
1050	1,4242	5,6968	1,4207	11,3656	368,8538	5,488869
1100	1,4251	5,7004	1,4223	11,3784	369,7361	5,475772
1150	1,4281	5,7124	1,424	11,392	371,7382	5,44628
1200	1,4289	5,7156	1,4257	11,4056	372,5991	5,433697

- [1] Дж. Оприр. Популярная Физика, Изд-во «Мир» Москва, 1964, 445с.
- [2] И.В. Воднаръ. Физика и техника полупроводников. 2011, том 46, вып 5.
- [3] C. Paorici, L. Zanotti, L. Gastaldi. Mater. Res. Bull, 1979, 14, 469.
- [4] G. Dagan, S. Endo, G. Hodes, G. Sawatzky, D.Cahan. Sol. Energy Mater., 1984, 11, 57.
- [5] L. Makhova, R. Szargan, I. Kononov. Thin Sol. Films, 2005, 472, 157.
- [6] L.Lewerenz, H.Goslowsky, K.D. Husemann, S. Fiechter. Nature, 1985, 321, 687.
- [7] И.В. Воднаръ, Е.А. Кудрицкая, И.К. Полушина, В.Ю. Рудь, Ю.В. Рудь. ФТП, 1998, 32, 1043.
- [8] S.I.Ibragimova, G.G.Guseinov, S.S.Ragimov, Yu.G. Asadov. Crystallography Reports, 2019, vol.64, No. 6, pp. 883-886.
- [9] В.Ф.Гременок, В.Б.Залесский, Н.Н.Мурсакулов и др. Тонкопленочные солнечные элементы на основе полупроводниковых материалов Cu(In,Ga)(Se,S)<sub>2</sub> со структурой халькопирита, Баку, Элм, 2013, 249с.
- [10] Н.А. Гарюнова, Сложные алмазоподобные полупроводники, Москва, 1968, 264с.

S.I. Ibrahimova

#### AN INVESTIGATION OF THE THERMAL EXPANSION PROPERTIES IF CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub> SOLID SOLUTION CRYSTAL BY HIGH-TEMPERATURE X-RAY DIFFRACTION

A solid solution of the CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub> composition has been synthesized and investigated its linear and volumetric thermal expansion by high-temperature X-ray diffraction methods in the temperature range of 350–1200K. It was determined that there is no significant change in linear and volumetric coefficients in the indicated temperature range, which is associated with the stability of the structure, i.e. lack of structural change.

С.И. Ибрагимова

#### ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ КРИСТАЛЛА CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub> РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННЫМ МЕТОДОМ

Синтезирован твердый раствор состава CuGaIn<sub>2</sub>Se<sub>5</sub> и методом высокотемпературной рентгенодифракции исследовано ее температурное расширение в температурном интервале 350-1200К. Установлено, что в указанном температурном интервале в линейных и объемных коэффициентах не наблюдаются серьезные изменения, что связано с устойчивостью структуры, т.е. отсутствием структурных изменений.

Qəbul olunma tarixi: 20.11.2020