

XALKOPİRİT QURULUŞLU $\text{Cu}_{0,25}\text{In}_{0,25}\text{Se}_{0,5}$ BİRLƏŞMƏSİNİN ALINMASI, MÖRFOLOGİYASI VƏ RENTGENOQRAFİK TƏDQIQI

A.Ç. MƏMMƏDOVA^{1,2}, S.İ. MEHDİYEVA¹, R.İ. ƏLƏKBƏROV^{1,2}, L.Ə. ƏLİYEVA¹

¹Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu, AZ-1073, H. Cavid pr. 131, Bakı, Azərbaycan

²Bakı Dövlət Univeristeteti Az-1148, Z. Xəlilov 23, Bakı, Azərbaycan

amamedova@inbox.ru

Cu, In, Se elementləri 1:1:2 nisbətində sintez olunaraq $\text{Cu}_{0,25}\text{In}_{0,25}\text{Se}_{0,5}$ tərkibli bərk məhlul alınmışdır. Sintez olunan birləşmənin mikro tərkib analizi, morfoloqiyası və rentgenoqrafik quruluş analizi tədqiq edilmişdir. Analizdən məlum olmuşdur ki, birləşmə yüksək təmizlikli polikristal halında alınmışdır. Rentgenoqrafik quruluş analizi ilə müəyyən edilmişdir ki, $\text{Cu}_{0,25}\text{In}_{0,25}\text{Se}_{0,5}$ polikristal qəfəs sabitləri $a \approx 5,7805 \text{ \AA}$; $c \approx 11,6177 \text{ \AA}$ olan və kristalların $I41/amd:1(141)$ fəza simetriya qrupuna uyğun tetraqonal sinqoniyada kristallaşır.

Açar sözlər: xalkopirit, polikristal, bərk məhlul, rentgen difraksiya səpilmə spektri, SEM analysis

DOI: 10.70784/azip.2.2025303

GİRİŞ

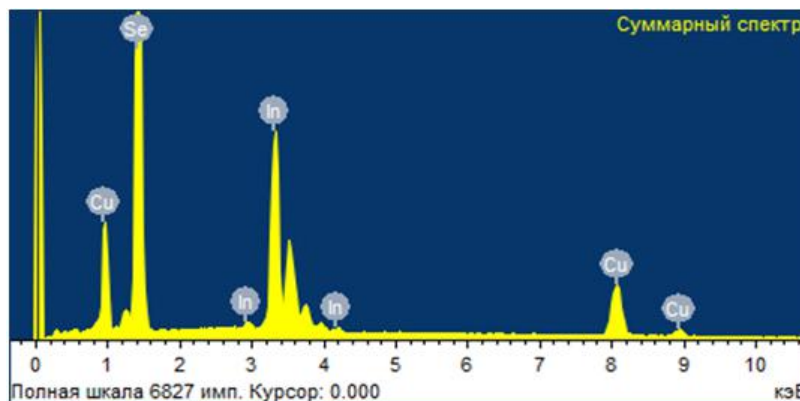
Müasir dövrdə yarımkeçirici fotoelementlərə tələbat digər bərpa olunan enerji mənbələri ilə müqayisədə əhəmiyyətli dərəcədə artmışdır [1,2]. Bu baxımdan tetraqonal xalkopirit quruluşu malik yarımkeçirici materiallardan biri olan $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ -nin bərk məhlulları öz unikal xassələrinə görə xüsusilə maraq kəsb edir. Qeyd olunan maddələrin bərk məhlullarından vakuumda termik buxarlandırma üsulu ilə alınan nazik təbəqələr yüksək məxsusi optik udulma əmsalına ($\alpha = 10^5 \text{ sm}^{-1}$), düz qadağan zonaya, geniş udulma diapazonuna və radiasiyaya qarşı yüksək stabilliyə malik olub, fotoelektrik qurğularda tətbiqi böyük əhəmiyyətə malikdir [1,4]. $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ -nin bərk məhlullarının energetik zona quruluşu və yüksək udma əmsalı, qalınlığı 1–3 mkm olan nazik təbəqələr əsasında günəş elementlərinin hazırlanmasına imkan verir [2, 5, 8, 9]. Bu maddələr düz qadağan zonaya malik olduğundan, tərkibin modifikasiyası hesabına qadağan zonanın enini məqsədyönlü və dəqiq sərhədlər çərçivəsində dəyişərək tələb olunan yüksək optoelektron xüsusiyyətlərə malik materialların alınması aktuallıq kəsb edir.

TƏCRÜBÜ NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN İZAHİ

Bu məqsədlə xüsusi təmiz (təmizlik dərəcəsi 99,9999%) Cu, In, Se elementləri 1:1:2 nisbətində sin-

tez olunaraq $\text{Cu}_{0,25}\text{In}_{0,25}\text{Se}_{0,5}$ tərkibli bərk məhlul alınmışdır. Tərkibin sintezi ortasından tilinə perpendikulyar istiqamətdə yerləşən ox ətrafında fırlanan silindrik soba üsulu ilə yerinə yetirilmişdir. Fırlanan soba üsulunun seçilməsi, alınmış məhlulun homogenliyini artırmaq məqsədilə nəzərdə tutulmuşdur. Sintez olunan tərkibə daxil olan elementlərdən müvafiq miqdarda elektron tərzidə çəkərək, daxili diametri 14÷16 mm və havası 10^{-3} Pa təzyiq qədər sorulmuş kvars ampullara doldurulmuşdur[3]. Tərkibə daxil olan bütün elementlərin mümkün qədər az özüllüklə bir-birinə qarışmasını təmin etmək üçün sintez prosesi 950° C -dən yuxarı temperaturda 18 saat ərzində aparılmışdır. Sintez prosesinin sonunda xəlitənin soyudulması söndürülmüş soba rejimində yerinə yetirilmişdir. Alınan külçə toz halına salınaraq 200 at. təzyiq altında presslənib tablet halına gətirilmişdir. Bundan sonra nümunə daxili diametri 18÷20 mm və havası 10^{-3} Pa təzyiq qədər sorulmuş kvars ampullalara doldurularaq $750\text{--}850^\circ \text{ C}$ temperaturda 72 saat saxlanmışdır. Prosesin sonunda xəlitənin soyudulması soba söndürüldükdən sonra otaq temperaturunda yerinə yetirilmişdir.

Verilmiş stabil xüsusiyyətlərə malik materialların alınması üçün fazaəmələgəlmə, faza çevrilmələri prosesləri və onların kinetikası, maddənin quruluşunun bu proseslərə təsiri haqda məlumatın alınması zəruridir [5].



Şəkil 1. $\text{Cu}_{0,25}\text{In}_{0,25}\text{Se}_{0,5}$ tərkibi üçün enerji dispersiv Rentgen spektri.

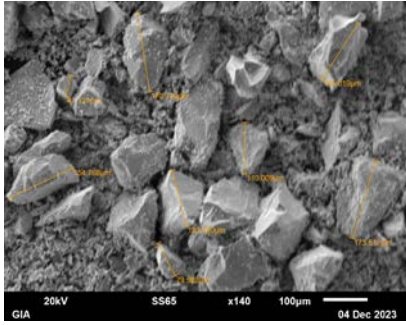
Buna görə də təqdim olunan işdə sintez olunan maddənin kristal və səth morfoloji quruluşunun öyrənilməsi nəzərdə tutulmuşdur. Qeyd olunan tədqiqatlar da tərkib analizi otaq temperaturunda enerji dispersiv Rentgen spektroskopiyası metodu ilə həyata keçirilmişdir. Təcrübələr Skanedici Elektron Mikroskopunda aparılmışdır. Bu mikroskop kondensə olunmuş mühitlərin morfolojiyasını və mikro-tərkib analizlərini aparmağa imkan verir [6,7]. Nümunənin səth quruluşu tədqiq edilmiş, kristallitlərin ölçüləri müəyyənləşdirilmişdir. Şəkil 1-də enerji dispersiv Rentgen spektrindən alınan tərkib analizi göstərir ki, sintez olunan maddədə kimyəvi elementlərin faiz nisbətləri ilkin çəkiddə nəzərdə tutulana tərkibə ~ 0,02 faiz dəqiqliklə yaxındır (Cədvəl 1).

Cədvəl 1.

$Cu_{0,25}In_{0,25}Se_{0,5}$ tərkibli birləşmədə kimyəvi elementlərin kütlə və atom faiz miqdarı:

$Cu_{0,25}In_{0,25}Se_{0,5}$		
Element	Kütlə %	Atom%
Cu	17.63	23.62
Se	45.44	49.00
In	36.93	27.39
Cəmi	100	100

Element analizindən alınan nəticələr səth morfolojiyasından alınmış nəticələrə uyğun gəlmişdir (şəkil 2).



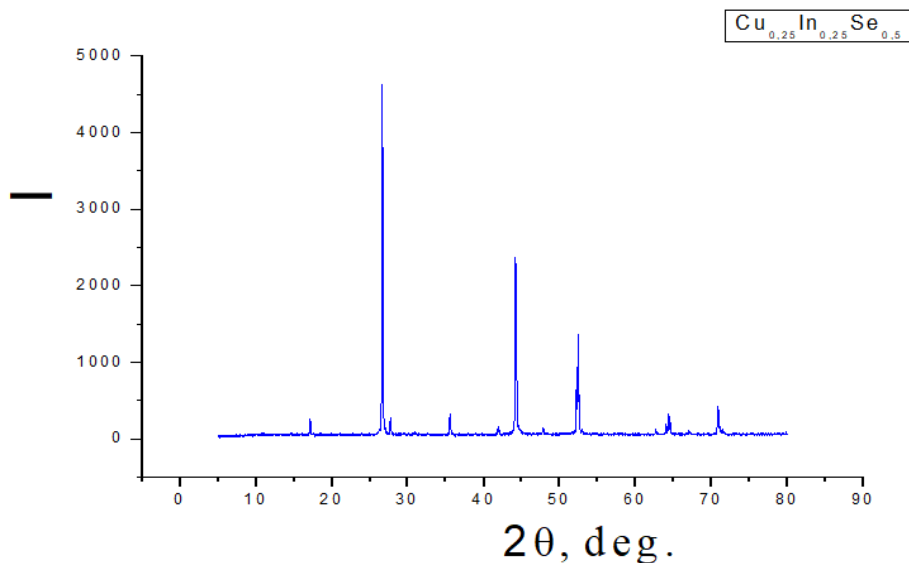
Şəkil 2. Otaq temperaturunda $Cu_{0,25}In_{0,25}Se_{0,5}$ tərkibli polikristalın morfolojiyası.

Cədvəl 2.

$Cu_{0,25}In_{0,25}Se_{0,5}$ -ə məxsus kristal quruluş parametrləri

№	d	2θ	I	hkl
1	5,17528	17,120	45	101
2	3,34280	26,645	999	112
3	3,21731	27,705	36	103
4	2,52340	35,548	68	211
5	2,15589	41,869	23	105
6	2,15007	41,987	34	213
7	2,04871	44,171	418	204
8	2,04372	44,285	413	220
9	1,90087	47,812	22	301
10	1,74987	52,234	99	116
11	1,74366	52,434	293	312
12	1,45221	64,069	12	008
13	1,44512	64,421	66	400
14	1,32921	70,833	62	316
15	1,32648	71,001	88	332
16	1,31959	71,428	15	325
17	1,31825	71,512	22	413

Sintez olunan maddənin kristal quruluşunun analizi üçün otaq temperaturunda Rentgen difraksiya səpilmə spektri ölçülmüş (şəkil 3) və quruluş parametrləri təyin edilmişdir (cədvəl 2). Rentgonoqrafik təcrübələr Bruker firmasının ADVANCE D8 difraktometrində aparılmışdır. Rentgen difraktometrində tədqiqatlar CuK_{α} ($\lambda=1.54051\text{Å}$) şüalanmada 40 kV, 40 mA rejimdə otaq temperaturunda $10^{\circ}\leq 2\theta\leq 90^{\circ}$ bucaq intervalında aparılmışdır. Difraksiya əks olunmalarının indekslənməsi və işlənməsi zamanı TOPAS VƏ EVA proqramlarından istifadə olunmuşdur.



Şəkil 3. $Cu_{0,25}In_{0,25}Se_{0,5}$ maddəsinin otaq temperaturunda Rentgen difraksiya səpilmə əyrisi.

NƏTİCƏ

Rentgen difraksiya səpilmə əyrisinin analizi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, sintez olunan $\text{Cu}_{0,25}\text{In}_{0,25}\text{Se}_{0,5}$ polikristal qəfəs sabitləri

$a \approx 5,7805 \text{ \AA}$; $c \approx 11,6177 \text{ \AA}$ olan və kristalların **I41/amd: 1(141)** fəza simmetriya qrupuna uyğun olub, tetraqonal sinqoniyada kristallaşır.

- [1] O.M. Бордавченко, В.Д. Живулько, А.В. Мудрый, М.В. Якушев. Излучательная рекомбинация на ионно – индуцированных дефектах в тонких пленках твердых растворов $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$. ФТП, 2021, т.55, вып.2, с.127-133
- [2] И.Е. Свитенков, В.Н. Павловский, В.Д. Живулько. Спонтанное и стимулированное излучение в тонких пленках твердых растворов $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}, \text{Ga}_x)(\text{S}_y \text{Se}_{1-y})_2$ солнечных элементов. ФТП, 2020, т.54, вып. 10, с.1058-1064
- [3] A.I. Isayev, S.I. Mekhtiyeva, H.I. Mammadova, R.I. Alekberov, Q.M. Ahmadov, N.N. Eminova, A.Ch. Mammadova, L.A. Aliyeva, L.V. Afandiyeva, R.F. Sadikhli. Features of the optical properties of chalcogenide glassy semiconductor Ge-As-Se(Te) systems. UNEC Journal of Engineering and Applied Sciences SECTION: Vol. 4, № 1, 2024, pp. 55-60
- [4] Yu –Tai Shih, Yu-Ching Tsai, Der-Yu Lin. Synthesis and Characterization of $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ Semiconductor nanocrystals. Nanomaterials 2020, 10, 2066.
- [5] A.Ch. Mamedova, S.I. Mekhtiyeva, H.J. Huseynov, Y.I. liyev, H.I. Bagirova. Solid solutions in $\text{Cu}_2\text{Se} - \text{Ga}_2\text{Se} - \text{In}_2\text{Se}_3$ nanothick films. Advanced Physical Research Vol.7, № 2, 2025, pp.196-203.
- [6] Y.I. Aliyev, Y.G. Asadov, A.O. Dashdemirov, R.D. Aliyeva, T.G. Naghiyev, S.H. Jabbarov. Polymorphic transformations and thermal expansion of some modifications in $\text{Ag}_{1,5}\text{Cu}_{0,5}\text{Se}$ and $\text{Ag}_{0,4}\text{Cu}_{1,5}\text{Se}$ /International Journal of Modern Physics B, 33, 23, p.1950271, 2019
- [7] Y.G. Asadov, Y.I. Aliyev, A.O. Dashdemirov, S.H. Jabbarov, G. Naghiyev. High – temperature X- ray diffraction study of $\text{Ag}_2\text{S}-\text{Cu}_2\text{S}$ system, Modern Physics Letters B, 34 supp 01 p.2150018, 2020.
- [8] M. Rohini, PReyes, S. Velumani, M. Latha, R Asomoza. Parametric optimization of mechanochemical process for synthesis of $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})_{0,5}\text{Se}_2$ nanoparticles. Mater.Sci. Semicond. Process. 2015,37, 151-158
- [9] C. Persson. Anisotropic hole – mass tensor of $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x(\text{S}, \text{Se}_2)$: Presence of free carriers narrows the energy gap. Appl. Phys.Lett. 2008, 93, 072106.

A.Ch. Mamedova, S.I. Mekhtiyeva, R.I. Alekberov, L.A. Aliyeva

PREPARATION, MORPHOLOGY AND X-RAY DIFFRACTION STUDY OF THE COMPOUND $\text{Cu}_{0,25}\text{In}_{0,25}\text{Se}_{0,5}$ WITH CHALCOPRITE STRUCTURE SUBSTANCE

Solid solutions $\text{Cu}_{0,25}\text{In}_{0,25}\text{Se}_{0,5}$ were synthesized from the elements Cu, In and Se in a ratio of 1:1:2. The microstructure, morphology and X-ray structural analysis of the synthesized compound were studied. As a result, polycrystalline tetragonal syngonium of high purity with lattice parameters $a \approx 5.7805 \text{ \AA}$ were obtained; $c \approx 11.6177 \text{ \AA}$ and spatial group symmetry **I41/amd: 1(141)**.

Qəbul olunma tarixi: 01.07.2025