

UOT 621.315.592

CuIn₅S₈ AMORF TƏBƏQƏLƏRİNDƏ YAXIN ATOM NİZAMININ ELEKTRONOQRAFİK QURULUŞ ANALİZİ

G.E.DAŞDƏMİROVA, S.S.FƏRZƏLİYEV C.İ.İSMAYILOV

*Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu
AZ 1143, Azərbaycan, Bakı şəh., H.Cavid pr., 131
Uli200909@rambler.ru, cabirismailov@gmail.com*

Daxil olub: 06.01.2023
Çapa verilib: 16.03.2023

Açar sözlər: yaxın atom nizamı, elektronografik quruluş analizi, amorf təbəqələr, radial paylanma funksiyası, interferensiya funksiyası.

REFERAT

Elektronografik quruluş analizi metodu ilə CuIn₅S₈ tərkibli üçqat birləşmənin nanoqalınlıqlı amorf təbəqələrində yaxın atom nizamı tədqiq edilmişdir. Amorf təbəqələrdə atomların radial paylanma funksiyası müəyyən edilərək atomlar arasındakı məsafələr hesablanmış və koordinasiya ədədləri təyin olunmuşdur.

GİRİŞ

[1-2]-də ilk dəfə olaraq $A^I B_{2m+1}^{III} C_{3n+2}^{VI}$ kimyəvi birləşmələr qrupunun nisbətən az tədqiq edilmiş birləşmələrinə daxil olan CuIn₅Te₈(S₈) tərkibli üçqat birləşmələrin monokristalları sintez edilmişdir. [3-4]-də bu kristalların təbii radiasiyanın müəyyənəndirilməsi üçün yüksək səmərəli genişzolaqlı çeviricilərində, günəş enerjisinin radiasiyaya davamlı fotoçeviricilər qismində, müxtəlif növ heteroquruluşların yaradılması üçün istifadə edilmələrinin mümkünlüyü göstərilmişdir. Yuxarıda göstərilən kimyəvi birləşmələr qrupuna daxil olan üçqat birləşmələrin kimyəvi formulu $Cu^{1+}[k^{3+}X_8]^-$ kimi yazılır, burada $k=In$ və $X=S(Se,Te)$. Tək valentliyi ilə xarakterizə olunan indium bu birləşmələrdə normal valentlik nümayiş etdirir və xarici konfigurasiyalı $5S^25P^1$ elektronları kovalent əlaqə ilə üçvalentli vəziyyətə (In^{3+}) keçəcək, halbuki mis ion xarakteri daşıyır və mis kationudur.

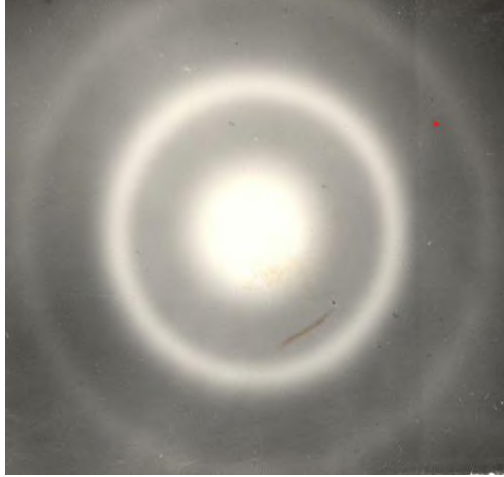
[1]-ə əsasən, CuIn₅S₈ üçqat birləşməsinin elementar özəyinin periodu $a=10,885\text{Å}$ olmaqla, kubik kristallik qəfəsdə kristallaşır və kristalların $Fd3m$ fəza qrupu ilə təsvir olunur. Bu birləşmə haqqında ədəbiyyat məlumatları, yalnız həcmli kristallik nümunələrə aiddir. Həcmli amorf nümunələrinin, yəni şüşə halında ərintilərinin alınmasına dair ədəbiyyat məlumatları, yoxdur.[5]-də Cu₂S və

In₂S₃ ikiqat birləşmələrinin 1:5 nisbətində ardıcıl və eyni vaxtda kondensasiyası ilə ilk dəfə nazik amorf təbəqələr alınmışdır. Nano qalınlıqlı amorf CuIn₅S₈ təbəqələrinin kristallaşması zamanı kristallik rüseymlərinin əmələgəlmə və onların sonrakı böyümələri üçün tələb olunan aktivləşmə enerjilərinin və kinetik parametrlərinin ədədi qiymətləri təyin olunmuşdur. Bununla belə göstərilməlidir ki, indiyə kimi göstərilən tərkiblə nazik amorf laylarda atomların yaxın nizam quruluşu tədqiq edilməmişdir. İstənilən yarımkeçirici materialların fiziki xassələri uzaq atom nizamı deyil, yalnız yaxın atom nizamı ilə şərtləndiyindən, bu sualın aydınlaşdırılması mühüm əhəmiyyətli elmi məsələ hesab edilir.

Bu iş [5]-də təsvir edilən prosedura uyğun olaraq $\sim 10^{-4}\text{Pa}$ vakuuma Cu₂S və In₂S₃-ün sublimasiyası nəticəsində əmələ gələn 300Å qalınlıqlı nazik amorf CuIn₅S₈ təbəqələrində yaxın qısa atom nizamının öyrənilməsinə həsr edilmişdir. 75-100kV sürətləndirici gərginliklərdə EMR-102 elektronografının elektron şüa dəstinin təsviri altında, eləcə də 423-433K temperaturlarda termiki işlənmə ilə kristallaşan amorf CuIn₅S₈ nazik təbəqələrindən alınan elektronogramlardan məlum olur ki, polikristallik difraksiya xətləri $Fd3m$ fəza simmetriya qrupuna malik kristallik kubik qəfəsdən alınan difraksiya əksləridir. Elektron şüa dəstinin intensivliyini və ya amorf təbəqələrin termiki

işlənmə temperaturunu azaltmaqla onların kristallaşmalarının qarşısı alınır.

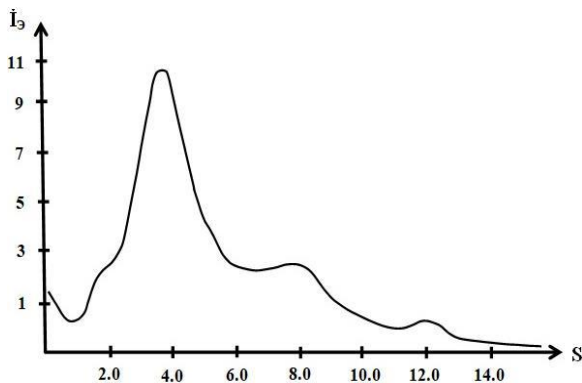
Amorf CuIn_5S_8 -in difraksiya mənzərəsi Şəkil 1-də göstərilmişdir.



Şəkil 1

CuIn_5S_8 tərkibli amorf təbəqədən alınmış elektronogram.

Amorf təbəqələrdən alınan elektronogramlarda müşahidə olunan diffuz xətlər $S=4\pi\sin\theta/\lambda$ 1,892; 3,094; 4,331 \AA^{-1} qiymətlərilə xarakterizə olunur. Otaq temperaturunda amorf təbəqələr öz quruluşunu saxlayır və yeddi və ya daha çox ay ərzində spontan kristallaşmırlar. Onlar, yalnız xarici termal təsirlə kristallaşa bilər. CuIn_5S_8 amorf fazasının atomları tərəfindən elektron səpilmə əyrisi qeyri-elastik elektron süzgecindən istifadə edilməklə 50kV sürətləndirici gərginlikdə elektron qeydiyyatı yolu ilə əldə edilmişdir (Şəkil 2).



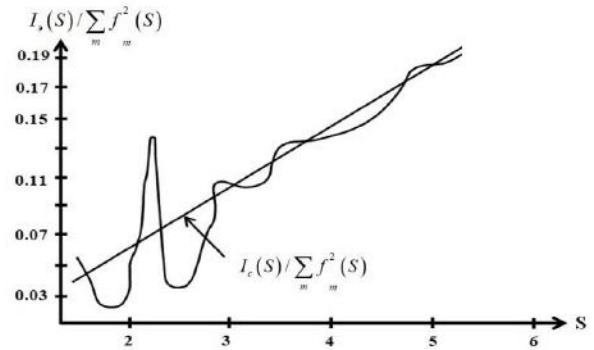
Şəkil 2

CuIn_5S_8 amorf təbəqələrindən alınmış $I_3(S)$ eksperimental əyrisi.

Difraksiya sahəsinin fonu [6]-da təsvir edilən üsulla eksperimental intensivlik normirovkalanmaqla nəzərə alınıb.

$$I_3(S)/\sum_m f_m^2(S), I_c(S)/\sum_m f_m^2(S)$$

intensivliklər əsasında (Şəkil 3), interferensiya funksiyası $i(S)$ (Şəkil 4) və atomlarının radial paylanması əyriləri (ARF) (Şəkil 5) qurulmuşdur.

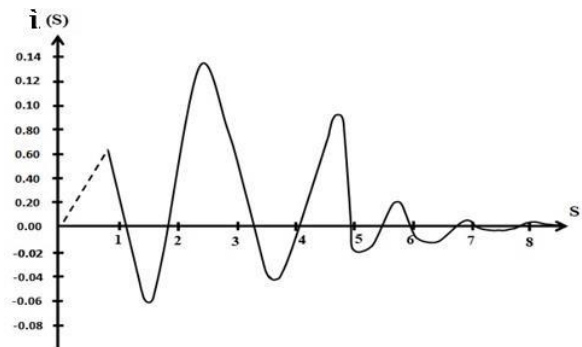


Şəkil 3

CuIn_5S_8 amorf təbəqələr üçün

$$I_3(S)/\sum_m f_m^2(S), I_c(S)/\sum_m f_m^2(S)$$

əyriləri.



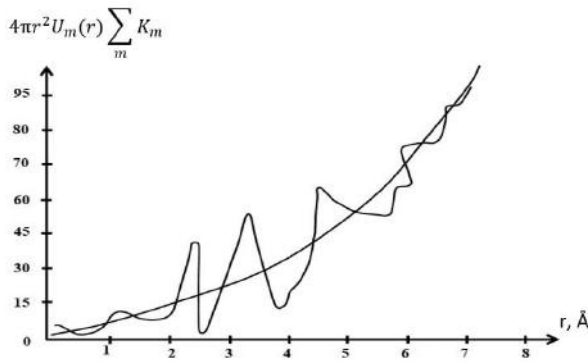
Şəkil 4

CuIn_5S_8 amorf təbəqələrində səpilmə elektronlarının interferensiya funksiyası.

Atomların radial paylanma funksiyası (ARPF) [7]-də verilmiş düsturla hesablanmışdır.

$$4\pi r^2 U_m(r) \sum_m K_m = 4\pi r^2 U_0 \sum_m K_m + \frac{2r^2}{\pi} \int_0^\infty Si(s) fin(sr) ds \quad (1)$$

ARPF düsturu (1) molekuldakı atom cütlərinin əsas qarşılıqlı təsirlərini və onların vahid bütövlüklə mövcudluğunu təsvir edir.



Şəkil 5

CuIn₅S₈ üçün atomların radial paylanma əyrisi (ARPƏ).

U_{0-1} hesablamaq üçün, amorf təbəqələrin sıxlığının $4,635 \text{ q/sm}^3$ -ə bərabər, yəni kristal CuIn₅S₈ sıxlığından $5,15 \text{ q/sm}^3$ 10% az olduğu qəbul edilir. Amorf CuIn₅S₈-in ARPƏ-si üç maksimumdan ibarətdir, onlardan ikisi ciddi şəkildə təcrid olunmuşdur. Birinci koordinasiya sferasının radiusu $r_1=2,25$; ikinci $r_2=3,18$; üçüncü $r_3=3,65 \text{ Å}$. Müvafiq zirvələrin altındakı sahələr $\Delta_1=40,3$; $\Delta_2=63,5$; $\Delta_3=120,7$. Birinci koordinasiya sferasının radiusunun qiyməti $r_2=2,25 \text{ Å}$ mis və kükürd atom-

ları arasındakı məsafəyə uyğundur. Müvafiq koordinasiya ədədi $n_1=3,97 \approx 4$ -dir ki, bu da nanoqalınlıqlı amorf CuIn₅S₈ təbəqələrində mis və kükürd atomlarının tetraedrik əhatəyə malik olduqlarını göstərir. $r_2=3,18 \text{ Å}$ məsafəni In və S atomları arasındakı məsafəyə aid etmək olar. Müvafiq koordinasiya ədədinin hesablanması $n_2=5,95 \approx 6$ verir ki, bu da indium və kükürd atomlarının oktaedrik əhatəsini göstərir. $n_1 > n_2$ koordinasiya ədədləri iki üsulla tapılmışdır: $G(r)=4\pi r^2 \sum K_m U_m(r)$ əyrisinin zirvəsi altında olan sahənin və uyğun $G(r)$ zirvəsinin sol yarısının altındakı ikiqat sahəsinin hesablanması ilə. Cu-Cu və S-S (və ya In-In) məsafələrinin üçüncü koordinasiya sferasında təmsil olduğunu fərz etsək, ən yaxın qonşuların sayının $n_3=5,58$ olduğunu alırıq ki, bu da oktaedrik əhatə üçün xarakterik olan dəyərlərdən xeyli azdır. Ola bilsin ki, bu, amorf təbəqələrdə sıxlığın azalması və quruluşun nisbətən zəiflənməsi və ya CuIn₅S₈-in amorf nazik təbəqələrində In-In və S-S atomlarının yalnız $1/4$ və ya daha kiçik bir hissəsinin oxşar əhatələrə malik olması ilə izah edilə bilər.

1. S.Kitamura, S.Endo, T.Irie. *Semiconducting properties of CuIn₅S₈ single crystals. I Electrical properties. J. Phys. Chem. Solids*, **8** (1985) 881-885.
2. Н.С.Орлова, И.В.Боднар, Е.А.Кудрицкая. *Структура и физико-химические свойства CuIn₅S₈ Нерган. Материалы*, **8** (1997) 932-934.
3. И.В.Боднар, В.Ю.Рудь, Е.И.Теруков, А.М.Ковальчук. *Фоточувствительные структуры на монокристаллах CuIn₅Te₈: создание и свойства, ФТП*, **45** (2011) 617-621.
4. И.В.Боднар, М.А.Жафар. *Поверхностно-барьерные структуры на основе монокристаллов твердого раствора (FeIn₂S₄)_{0,5}(CuIn₅S₈)_{0,5}, Доклады БГУИР*, **5** (2017) 40-45.
5. Г.Е.Дашдамирова, Э.Б.Аскеров, Д.И.Исмаилов. *Фазообразование и кинетика кристаллизации аморфных пленок CuIn₅S₈, ФТП*, **56** (2022) 297-301.
6. Д.И.Исмаилов. *Фазообразования, структура и кинетика кристаллизации в тонких пленках A³-B³-C⁶, эпитаксиальный рост сверхструктурных фаз, Докт. диссер., Баку, (2007) 345.*
7. Г.Е.Дашдамирова, Э.Б.Аскеров, Д.И.Исмаилов. *Электроннографическое исследование фазообразования в нанотолщинных слоях систем Cu₂Te-In₂Te₃, Cu-In-Te и ближний атомный порядок в аморфных пленках CuIn₅Te₈, ФТП*, **56** (2022) 447-452.

ELECTRON DIFFRACTION STRUCTURAL ANALYSIS OF SHORT-RANGE ATOMIC ORDER IN AMORPHOUS CuIn₅S₈ FILMS

G.E.DASHDAMIROVA, S.S.FARZALIYEV D.I.ISMAILOV

The atomic short-range order of nanothick amorphous layers in CuIn₅S₈ ternary compound has been studied by electron diffraction structural analysis. The function of the radial distribution of atoms in amorphous layers is determined, the interatomic distances are calculated and the coordination numbers have been determined.

**ЭЛЕКТРОНОГРАФИЧЕСКИЙ СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ БЛИЖНЕГО АТОМНОГО ПОРЯДКА В
АМОРФНЫХ ПЛЕНКАХ CuIn_5S_8**

Г.Е.ДАШДАМИРОВА, С.С.ФАРЗАЛИЕВ, Д.И.ИСМАИЛОВ

Методом электронографического структурного анализа (ЭСА) исследован ближний атомный порядок в нанотолщинных аморфных слоях тройного соединения состава CuIn_5S_8 . Определена функция радиального распределения атомов в аморфных слоях, рассчитаны межатомные расстояния и определены координационные числа.