

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
«Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники»

УДК 548.55

На правах рукописи

МАКУЦА
Максим Олегович

**ИССЛЕДОВАНИЕ АНИЗОТРОПИИ ТЕПЛОВОГО РАСШИРЕНИЯ
МОНОКРИСТАЛЛОВ $CuIn_7Se_{11}$**

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание степени
магистра техники и технологий

по специальности 1-39 81 01 – Компьютерные технологии
проектирования электронных систем

Минск 2019

Работа выполнена на кафедре проектирования информационно-компьютерных систем учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»

Научный руководитель: **БОДНАРЬ Иван Васильевич**
доктор технических наук, профессор, профессор кафедры защиты информации учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»

Рецензент: **НАПРАСНИКОВ Владимир Владимирович**
кандидат технических наук, доцент кафедры программного обеспечения информационных систем и технологий учреждения образования «Белорусского национального технического университета»

Защита диссертации состоится «27» июня 2019 г. года в 13³⁰ часов на заседании Государственной экзаменационной комиссии по защите магистерских диссертаций в учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» по адресу: 220013, Минск, ул. П.Бровки, 6, копр. 1, ауд. 408, тел. 293-20-80, e-mail: kafpiks@bsuir.by

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

ВВЕДЕНИЕ

Исследования в области тройных полупроводниковых соединений и их твёрдых растворов для создания высокоэффективных традиционно – стойких солнечных элементов в тонкопленочном исполнении проводятся уже давно. Это привело к разработке тонкопленочных солнечных элементов с рекордной для этого класса тонкопленочных фотопреобразователей квантовой эффективностью 19%. До настоящего времени фундаментальные свойства тройных соединений I – III – VI₂ контролируются, в основном, за счет создания твердых растворов. Вместе с тем изучение фазового взаимодействия в системах I – III – VI позволило установить, что в них могут образовываться наряду с известными фазами I – III – VI₂ еще множество позиционно – упорядоченных фаз типа I – III_n – VI_m (где $n = 3,5$; $m = 5,8$), включающих упорядоченные вакансии. В работе из первых принципов были рассчитаны области стабильности таких соединений и высказано предположение, что указанные фазы образуются за счет пространственной трансляции одиночной ячейки дефектных пар для различного числа ячеек I – III – VI₂. Такие фазы начинают широко изучаться, как один из главных подходов в управлении фундаментальными свойствами тройных халькогенидов.

Соединение $CuIn_7Se_{11}$ обладает физическими свойствами, которые дают возможность использовать указанный материал в качестве поглощающего слоя в тонкопленочных преобразователях солнечной энергии. Эти кристаллы являются перспективным материалом для создания на их основе широкополосных фотопреобразователей, приемников для ближней ИК-области спектра и других устройств, опто- и микроэлектроники. В последние годы набирают популярность тонкопленочные батареи. Обусловлено это увеличением эффективности таких батарей и необходимостью развития технологий преобразования солнечной энергии в электрическую.

В данной работе описан метод выращивания кристаллов $CuIn_7Se_{11}$ (вертикальный метод Бриджмена). Также произведен анализ полученных кристаллов. Так состав монокристаллов $CuIn_7Se_{11}$ определялся с помощью микронного рентгеноспектрального анализа, структуру монокристаллов устанавливали рентгеновским методом.

Все вышесказанное определило направление данной работы, задачей которой являлось выращивание монокристаллов $CuIn_7Se_{11}$, определение состава и структуры полученных кристаллов, изучение теплового расширения.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

Интенсивное развитие в области оптоэлектроники ставит задачу разработки и исследования новых эффективных полупроводниковых материалов с новыми физическими свойствами, на основе которых могут быть созданы полупроводниковые приборы с новыми функциональными возможностями.

В последние годы набирают популярность тонкопленочные солнечные батареи. Обусловлено это увеличением эффективности таких батарей и необходимостью развития технологий преобразования солнечной энергии в электрическую.

Кристаллы $CuIn_7Se_{11}$ относятся к тройным полупроводниковым фазам типа $A^I B_{2n+1}^{III} C_{3n+2}^{VI}$, которые образуются на квазибинарном разрезе $Cu_2Se-In_2Se_3$ при $n=3$. Такие вещества являются перспективными материалами для создания высокоэффективных тонкопленочных солнечных элементов с высокой радиационной стойкостью, для изготовления излучателей видимого ИК диапазонов света и других приборов полупроводниковой и квантовой электроники.

Степень разработанности проблемы

Исследованию оптических, термоэлектрических, электрофизических и других свойств посвящены работы Д.М. Чижикова и В.П. Счастливого.

Фотоэлектрические свойства структур подробно описаны в работе Г.А. Ильчука, В.В. Кусьенэжа, Р.Ю. Петруся, В.Ю. Рудя, Ю.В. Рудя и В.О. Украинца. Описан метод выращивания кристаллов гексагональной модификации. Сделан вывод о возможностях применения выращенных кристаллов в широкополосных фотопреобразователях оптического излучения.

Электрическим свойствам монокристаллов посвящены работы И.В. Боднаря, Г.А. Ильчука, Р.Ю. Петруся, В.Ю. Рудя, Ю.В. Рудя, М. Сергинова. Приведен метод выращивания монокристалла, определен их состав и кристаллическая структура. Сделан вывод о возможностях применения новых структур.

Цель и задачи исследования

Цель диссертационной работы состоит в разработке температурных режимов выращивания монокристаллов $CuIn_7Se_{11}$, определить их состав, структуру, исследовать анизотропию теплового расширения.

Для выполнения поставленной цели в работе были сформулированы следующие основные задачи:

- методом Бриджмена вырастить монокристаллы соединения $CuIn_7Se_{11}$;

– произвести литературный обзор по структуре тройных соединений и диаграмме состояния $Cu_2Se - In_2Se_3$;

– методом микрорентгеноспектрального анализа определить состав выращенного кристалла, рентгеновским методом определить структуру полученного кристалла;

– исследование теплового расширения монокристалла $CuIn_7Se_{11}$.

Область исследования

Содержание диссертационной работы соответствует образовательному стандарту высшего образования второй ступени (магистратуры) специальности 1-39 81 01 «Компьютерные технологии проектирования электронных систем».

Теоретическая и методологическая основа исследования

В основу работы легли результаты исследований отечественных и зарубежных ученых в области синтеза и исследование свойств полупроводниковых соединений.

Для получения практических результатов применялись различные методы синтеза и анализа. Так, монокристаллы соединения $CuIn_7Se_{11}$ выращивали направленной кристаллизацией расплава (вертикальный метод Бриджмена); состав монокристаллов определяется с помощью микронного рентгеноспектрального анализа; структура монокристаллов устанавливается рентгеновским методом.

Также в исследовании был задействован ряд приборов. Так, элементный состав монокристалла производился на установке «Stereoscan-36; дифрактограммы записывали на автоматически управляемом с помощью ЭВМ рентгеновском дифрактометре ДРОН-3; тепловое расширение измеряли на кварцевом dilatометре.

Расчеты и построение графиков осуществлены в пакете MathLab.

Обработка данных проводилась с использованием Excel.

Информационная база исследования сформирована из сведений из научных изданий, ресурсов Интернет, научно-исследовательских работ, описания результатов НИР, а также материалов научных изданий, конференций и семинаров.

Научная новизна

Научная новизна диссертационной работы заключается в изучении свойств монокристалла $CuIn_7Se_{11}$, изучение теплового расширения, выращивание однородных по составу и свойствам кристаллов.

Теоретическая значимость: рассмотрены вопросы, связанные с выращиванием монокристалла методом Бриджмена (вертикальный метод), получены сведения о составе монокристалла методом микрорентгеноспектрального анализа, определение структуры рентгеновским методом. Установлено, что для указанных монокристаллов характерна значительная анизотропия теплового расширения.

Практическая значимость диссертации заключается в том, что произведенные исследования могут быть использованы в качестве данных для дальнейшего развития материалов для создания на их основе материалов в качестве поглощающего слоя тонкопленочных преобразователей солнечной энергии. Эти кристаллы также перспективны для создания на их основе широкополосных преобразователей, приемников для ближней ИК-области спектра и других устройств опто – и микроэлектроники.

Основные положения, выносимые на защиту

1 Разработан температурный режим выращивания монокристаллов соединения $CuIn_7Se_{11}$ методом Бриджмена (вертикальный вариант), что позволяет выращивать в таких условиях гомогенные и однородные монокристаллы соединения $CuIn_7Se_{11}$.

2 Методом микрорентгеноспектрального анализа определен состав выращенных кристаллов, рентгеновским методом - структура полученных кристаллов, что позволяет утверждать о гомогенности и однородности кристаллов соединения $CuIn_7Se_{11}$

3 Исследована анизотропия теплового расширения монокристалла $CuIn_7Se_{11}$.

Публикации

Изложенные в диссертации основные положения и выводы опубликованы в 8 печатных работах В их числе 1 тезис, 1 статья для научно-технической конференции и 6 докладов.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, общей характеристики работы, трех глав с краткими выводами по каждой главе, заключения, библиографического списка и приложений.

В первой главе проведен анализ литературы в области синтеза, выращивания и исследования свойств тройного соединения $CuIn_7Se_{11}$. Показано, что это соединение, как и другие соединения группы $A^I B^{III}_3 C^{VI}_5$ кристаллизуются

ется в структуре дефектного халькопирита (пространственная группа $D^{12}_{2d} - I42m$).

Анализ литературных данных показал также, что исследования физико-химических, оптических, электрических и других свойств тройного соединения $CuIn_7Se_{11}$, проведенные различными авторами, значительно отличаются друг от друга, что можно связать с тем, что эти исследования проводились на образцах, разной степени гомогенности. Отсутствие данных об анизотропии основных физико-химических и физических свойств ставит задачу определения оптимальных режимов выращивания однородных монокристаллов, исследование их основных фундаментальных характеристик на основании чего можно дать рекомендации их практического использования.

Во второй главе методом Бриджмена выращены оптически однородные крупноблочные кристаллы с размерами диаметр $\sim 14-20$ мм и длину ~ 40 мм. Методом микрозондового рентгеноспектрального анализа определен состав кристаллов $CuIn_7Se_{11}$. Результаты микрозондового рентгеноспектрального анализа показали, что содержание элементов в выращенных монокристаллах ($Cu : In : Se = 5.71 : 38.77 : 55.52$ ат.%) хорошо согласуется с заданным составом в исходной шихте ($Cu : In : Se = 5.26 : 36.85 : 57.89$ ат.%) и не наблюдается значительных отклонений в составе в различных точках кристалла, что свидетельствует об их однородности.

На представленной дифрактограмме индексы отражений, которые дают основание отнести структуру полученных кристаллов к гексагональной. Параметры элементарной ячейки, рассчитанные методом наименьших квадратов по рефлексам для которых $2\theta > 60^\circ$ равны: $a = 4.036 \pm 0.002 \text{ \AA}$, $c = 32.702 \pm 0.005 \text{ \AA}$. Данные настоящей работы отличаются от результатов, полученных в работе, что можно объяснить различными методами выращивания кристаллов $CuIn_7Se_{11}$. рентгеновским методом - структура и параметры кристаллической решетки указанного соединения. Запись дифрактограмм проводили с изменением значений двойных углов отражения 2θ со скоростью $0,5$ град/мин. Рентгеновские исследования проводили на образцах, полученных растиранием кристаллов. Для снятия механических напряжений, возникающих при растирании кристаллов, проводили их отжиг в вакууме при температуре 650 K в течении 2 ч. Полученные дифрактограммы индцировали, определяя значения двойных углов скольжения для всех дифракционных максимумов с точностью до сотых долей градуса.

По определенным параметрам a и c рассчитаны величины тетрагонального искажения, позиционный параметр и длины связей между атомами $A - C$ и $B - C$.

В третьей главе дилатометрическим методом исследовано тепловое расширение кристаллов $CuIn_7Se_{11}$ в интервале $80 - 400 \text{ K}$. Установлено, что для выращенных кристаллов $CuIn_7Se_{11}$ характерна значительная анизотропия теплового расширения. КТР вдоль оси c ($\alpha_{||}$) меньше КТР вдоль направления, a (α_{\perp}). По экспериментальным данным теплового расширения и температуры плавления рассчитаны характеристические температуры Дебая (Θ) и средне-

квадратичные динамические смещения атомов ($\sqrt{U^2}$). С ростом температуры значения температуры Дебая уменьшаются, а среднеквадратичные динамические смещения атомов в соединении $CuIn_7Se_{11}$ увеличиваются, что свидетельствует об ослаблении химической связи в соединении $CuIn_7Se_{11}$ с ростом температуры.

В приложении представлены публикации автора и акт внедрения.

Объем основного текста диссертации – 69 страницы. Работа содержит 7 таблиц, 13 рисунков. Библиографический список включает 45 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** рассмотрены исследования в области тройных полупроводниковых соединений и их твердых растворов для создания высокоэффективных традиционно–стойких солнечных элементов.

В **общей характеристике работы** показана актуальность проводимых исследований, степень разработанности проблемы, сформулированы цель и задачи диссертации, обозначена область исследований, научная (теоретическая и практическая) значимость исследований, а также апробация работы.

В **первой главе** проведен анализ литературы в области синтеза, выращивания и исследования свойств тройного соединения $CuIn_7Se_{11}$. Показано, что это соединение, как и другие соединения группы $A^I B^{III}_3 C^{VI}_5$ кристаллизуется в структуре дефектного халькопирита (пространственная группа $D^{12}_{2d} - I42m$).

Была исследована диаграмма системы $Cu_2Se - In_2Se_3$. Видно, что при стехиометрическом составе $CuInSe_2$ на кривых ликвидуса и солидуса наблюдается пологий максимум. В сплавах, содержащих 50-75 мол.% In_2Se_3 , плавление осуществляется в интервале температур. Ниже 1288 К в области составов 40-80 мол.% In_2Se_3 из жидкости кристаллизуется δ – твердый раствор. С понижением температуры происходит упорядочение δ – твердого раствора с образованием двух твердых растворов: γ -твердый раствор на основе соединения $CuInSe_2$ при 1103К и σ -твердый раствор на основе соединения $CuIn_7Se_{11}$ при 1173К. δ -твердый раствор образует две эвтектики с содержанием ~21 мол.% In_2Se_3 и 90 мол.% In_2Se_3 с температурами 1188 и 1166К соответственно.

Анализ литературных данных показал также, что исследования физико-химических, оптических, электрических и других свойств тройного соединения $CuIn_7Se_{11}$, проведенные различными авторами, значительно отличаются друг от друга, что можно связать с тем, что эти исследования проводились на

образцах, разной степени гомогенности. Отсутствие данных об анизотропии основных физико-химических и физических свойств ставит задачу определения оптимальных режимов выращивания однородных монокристаллов, исследование их основных фундаментальных характеристик на основании чего можно дать рекомендации их практического использования.

Во второй главе методом Бриджмена выращены оптически однородные крупноблочные кристаллы с размерами диаметр $\sim 14-20$ мм и длину ~ 40 мм.

В начальный период температуру в печи повышали со скоростью ~ 50 К/ч до $\sim 1000 - 1020$ К. При указанных температурах проводилась изотермическая выдержка в течение ~ 2 ч с включением вибрации. Это необходимо для того, чтобы наиболее летучее вещество – селен при этой температуре, когда давление пара его не превышает 1 атм., успело прореагировать частично или полностью с медью и индием.

Дальнейшее нагревание после такой выдержки становится практически безопасным. Затем с той же скоростью температуру повышали до ~ 1250 К (без выключения вибрационного перемешивания) и снова выдерживали 2 ч. При больших скоростях нагрева происходило неконтролируемое повышение давление паров селена в ампуле, что проводило к ее взрыву и потере шихты. После этого вибрацию отключали и проводили направленную кристаллизацию расплава, понижая температуру печи со скоростью ~ 2 К/ч до ~ 1020 К и при этой температуре проводили гомогенизирующий отжиг полученных слитков в течение 300 ч.

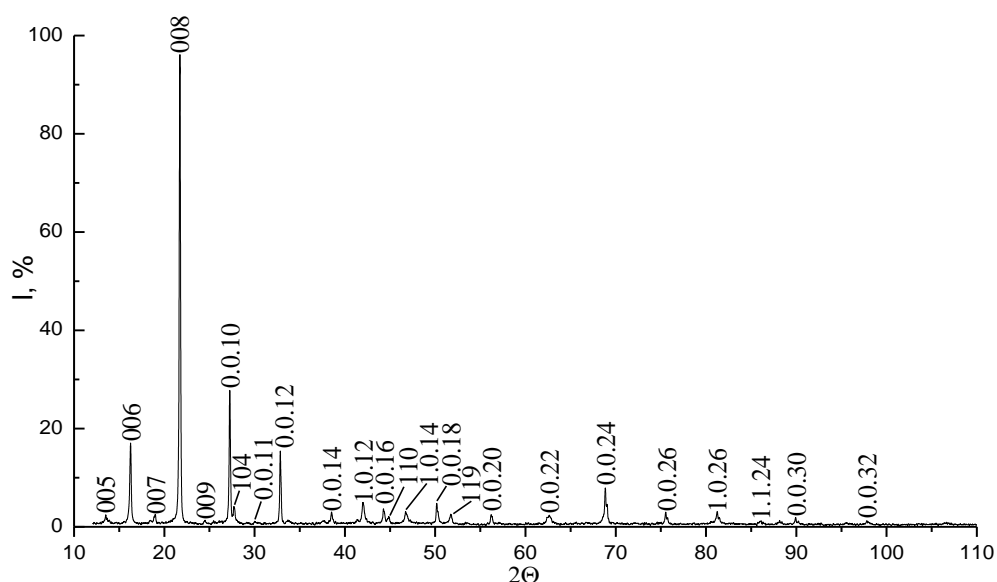


Рисунок 2 – Дифрактограмма кристаллов соединения $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$

Выращенные в таких условиях монокристаллы соединений $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$ и имели диаметр $\sim 14-20$ мм и длину ~ 40 мм, были гомогенными и однородными, что было установлено с помощью микрондового рентгеноспектрального и рентгеновского анализов.

Методом микронного рентгеноспектрального анализа определен состав кристаллов $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$, рентгеновским методом - структура и параметры кристаллической решетки указанного соединения. Данные рентгеновских исследований представлены на рисунке 2

Установлено, что тройное соединение $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$ кристаллизуются в структуре дефектного халькопирита с параметрами элементарной ячейки – $a = 4.036 \pm 0.002 \text{ \AA}$, $c = 32.702 \pm 0.005 \text{ \AA}$. По определенным параметрам a и c рассчитаны величины тетрагонального искажения, позиционный параметр и длины связей между атомами $A - C$ и $B - C$.

В третьей главе дилатометрическим методом исследовано тепловое расширение кристаллов $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$ в интервале 80 – 400 К. Установлено, что для выращенных кристаллов $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$ характерна значительная анизотропия теплового расширения. КТР вдоль оси c (α_{\parallel}) см. рисунок 3, меньше КТР вдоль направления, a (α_{\perp}) см. рисунок 4.

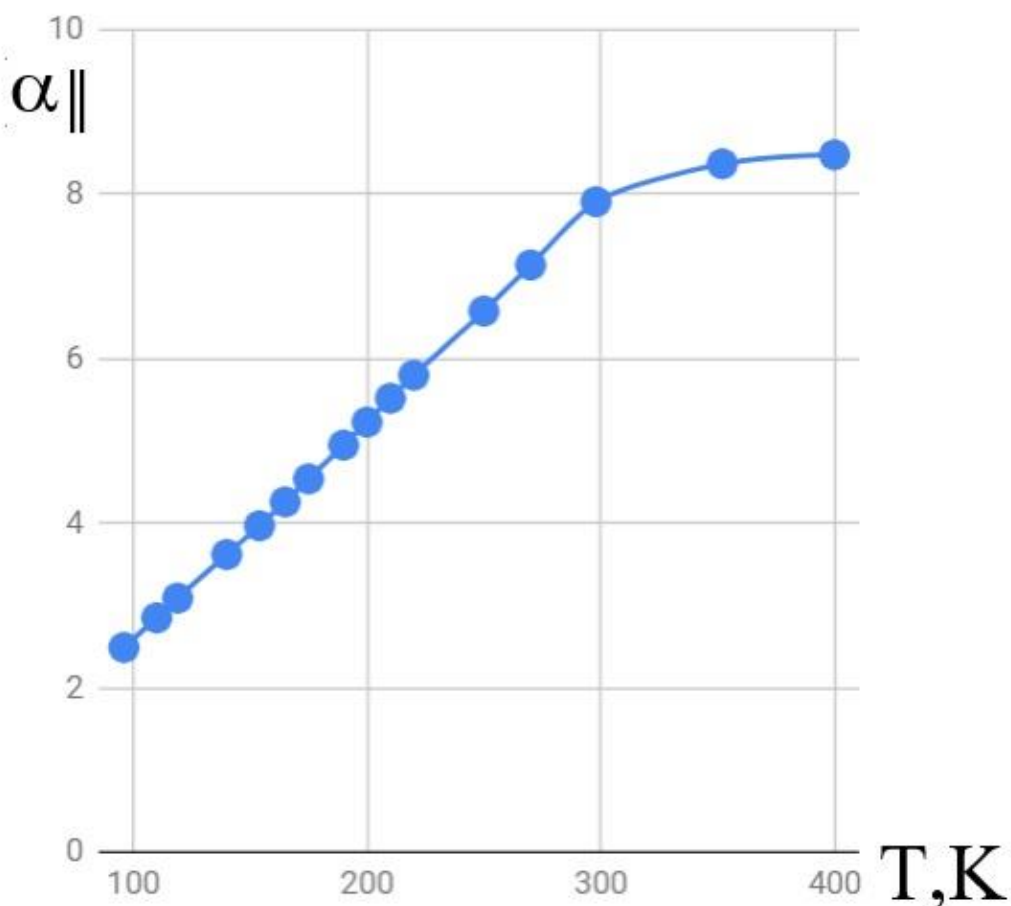


Рисунок 3.2 – Температурная зависимость коэффициента теплового расширения вдоль параллельной оси c (α_{\parallel}) для монокристалла $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$

По экспериментальным данным теплового расширения и температуры плавления рассчитаны характеристические температуры Дебая (Θ) и средне-

квадратичные динамические смещения атомов ($\sqrt{U^2}$). С ростом температуры значения температуры Дебая уменьшаются, а среднеквадратичные динамические смещения атомов в соединении $CuIn_7Se_{11}$ увеличиваются, что свидетельствует об ослаблении химической связи в соединении $CuIn_7Se_{11}$ с ростом температуры.

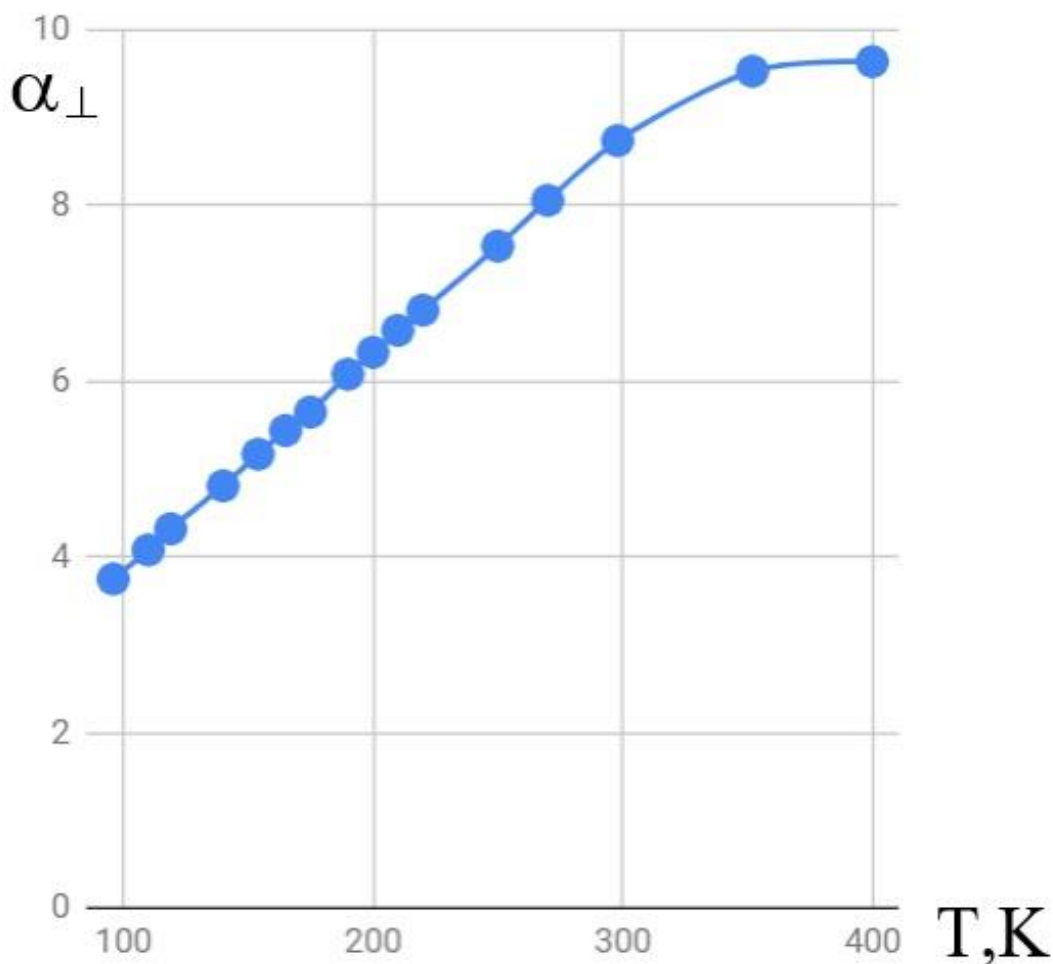


Рисунок 3.3 – Температурная зависимость коэффициента теплового расширения вдоль перпендикулярной оси с (α_{\perp}) для монокристалла $CuIn_7Se_{11}$

Заключение

Проведен анализ литературы по кристаллической структуре тройных соединений $A^I B^{III} C_2^{VI}$ диаграмме состояния $Cu_2Se - In_2Se_3$.

Методом Бриджмена выращены оптически однородные крупноблочные кристаллы с размерами диаметр $\sim 14-20$ мм и длину ~ 40 мм. Методом микронного рентгеноспектрального анализа определен состав кристаллов $CuIn_7Se_{11}$, рентгеновским методом - структура и параметры кристаллической

решетки указанного соединения. Установлено, что тройное соединение $CuIn_7Se_{11}$ кристаллизуются в структуре дефектного халькопирита с параметрами элементарной ячейки $a = 4.036 \pm 0.002 \text{ \AA}$, $c = 32.702 \pm 0.005 \text{ \AA}$. По определенным параметрам a и c рассчитаны величины тетрагонального искажения, позиционный параметр и длины связей между атомами $A - C$ и $B - C$.

Экспериментальные данные показали, что содержание элементов в выращенных монокристаллах ($Cu : In : Se = 5.71 : 38.77 : 55.52 \text{ ат.}\%$) хорошо согласуется с заданным составом в исходной шихте ($Cu : In : Se = 5.26 : 36.85 : 57.89 \text{ ат.}\%$) и не наблюдается значительных отклонений в составе в различных точках кристалла, что свидетельствует об их однородности.

Рентгеновскими исследованиями установлено, что полученное соединение $CuIn_7Se_{11}$ кристаллизуется в структуре дефектного халькопирита с параметрами $a = 4.036 \pm 0.002 \text{ \AA}$, $c = 32.702 \pm 0.005 \text{ \AA}$. По параметрам a и c рассчитаны осевое отношение c/a , величины тетрагонального искажения (δ), позиционный параметр (σ), характеризующий в соединениях $A^I B^{III} C_2^{VI}$ положение атома C по отношению к атомам A и B , и длины связей между атомами $A - C (l_{AC})$ и $B - C (l_{BC})$ по следующим.

Дилатометрическим методом исследовано тепловое расширение кристаллов $CuIn_7Se_{11}$ в интервале $80 - 400 \text{ К}$. Установлено, что для выращенных кристаллов $CuIn_7Se_{11}$ характерна значительная анизотропия теплового расширения. КТР вдоль оси c (α_{\parallel}) меньше КТР вдоль направления, a (α_{\perp}). По экспериментальным данным теплового расширения и температуры плавления рассчитаны характеристические температуры Дебая (Θ) и среднеквадратичные динамические смещения атомов ($\sqrt{U^2}$). С ростом температуры значения температуры Дебая уменьшаются, а среднеквадратичные динамические смещения атомов в соединении $CuIn_7Se_{11}$ увеличиваются, что свидетельствует об ослаблении химической связи в соединении $CuIn_7Se_{11}$ с ростом температуры.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ

1–А. Макуца, М. О Тепловое расширение монокристалла $CuIn_7Se_{11}$ / М.О. Макуца, И.В. Боднар // материалы 55-ой научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов БГУИР, Минск, Республика Беларусь/ УО «БГУИР». – Минск, 2019. – С. 25.

2–А. Макуца, М. О Рост и кристаллическая структура монокристаллов $CuIn_7Se_{11}$ / М.О. Макуца, И.В. Боднар // Материалы 14-ой международной молодежно-технической конференции «Современные проблемы радиоэлектроники и телекоммуникации РТ – 2018» Севастопольский государственный университет, Севастополь, Российская федерация/ УО «Севастопольский государственный университет». – Севастополь, 2018. – С. 243.

3–А. Макуца, М.О. Выращивание монокристаллов методом Бриджмена / Макуца, М.О, Трофимович А.В // Студенческий: электронный научный журнал 2019. № 24(68).

4–А. Макуца, М.О. Определение структуры $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$ рентгеновским методом / Макуца, М.О, Трофимович А.В // Студенческий: электронный научный журнал 2019. № 24(68).

5–А. Макуца, М.О. Измерение теплового расширения $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$ / Макуца, М.О, Трофимович А.В // Студенческий: электронный научный журнал 2019. № 24(68).

6–А. Трофимович А.В. Перспективы солнечной энергетики как альтернативного источника энергии на территории Республики Беларусь / Макуца, М.О, Трофимович А.В // Студенческий: электронный научный журнал 2019. № 24(68).

7–А. Трофимович А.В. Оценка воздействия температурных режимов на производительность солнечных элементов / Макуца, М.О, Трофимович А.В // Студенческий: электронный научный журнал 2019. № 24(68).

8–А. Макуца М.О. Деградация инкапсулянта под воздействием ультрафиолетового излучения / Макуца М.О., Трофимович А.В. // Молодежный научный форум: электронный сборник статей по математике LII международной студенческой научной-практической конференции № 22(52).

РЭЗІЮМЭ

Макуца Максім Алегавіч

Даследаванне анізатрапіі цеплавога пашырэння монакрышталяў $CuIn_7Se_{11}$

Ключавыя словы: монакрысталі, патройныя злучэння, цеплавое пашырэнне.

Мэта работы: распрацаваць тэмпературныя рэжымы вырошчвання монакрышталяў $CuIn_7Se_{11}$, вызначэння іх складу, крышталічнай структуры і цеплавога пашырэння.

Атрыманыя вынікі і іх навізна: праведзены аналіз літаратуры па крышталічнай структуры патройных злучэнняў $A^I B^{III} C^{VI}_2$ дыяграме са-стаяння $Cu_2Se - In_2Se_3$.

Метадам Брыджмена вырашчаны аптычна аднастайныя крупноблочные крысталі з памерамі дыяметр $\sim 14-20$ мм і даўжыню ~ 40 мм. Метадам Мікрондоваго рентгенаспектральнаго аналізу вызначаны склад крышталяў $CuIn_7Se_{11}$, рэнтгенаўскім метадам - структура і параметры крышталічнай рашоткі названага злучэння. Устаноўлена, што патройнае злучэнне $CuIn_7Se_{11}$ крышталізуецца ў структуры дэфектнага халькопирита з параметры элементарнай ячэйкі $a = 4.036 \pm 0.002 \text{ \AA}$, $c = 32.702 \pm 0.005 \text{ \AA}$.

Эксперыментальныя дадзеныя паказалі, што ўтрыманне элементаў у вы-рашчэнных монакрышталяў (Cu: In: Se = 5.71 : 38.77: 55.52 ат.%) добра ўзгадняецца з зададзеным складам у зыходнай шыхце (Cu: In: Se = 5.26 : 36.85: 57.89 ат.%) і не назіраецца значных адхіленняў у складзе ў розных кропках крышталя, што сведчыць аб іх аднастайнасці.

Устаноўлена, што для вырашчаных крышталяў $CuIn_7Se_{11}$ характэрная значная анізатрапіі цеплавога пашырэння.

Ступень выкарыстання: вынікі ўкаранёны ў навучальны працэс на кафедры абароны інфармацыі, спецыяльнасці 1-98 01 02 ўстанова адукацыі «Беларускі дзяржаўны ўніверсітэт інфарматыкі і радыёэлектронікі» пры выкладанні дысцыпліны «Прыкладная хімія»

Вобласць ўжывання: стварэнне на іх аснове шырокапаалосных фотапераўтваральнікаў, прымачоў для блізкай інфрачырвонай вобласці спектру і іншых прылад, опта - і мікраэлектронікі.

РЕЗЮМЕ

Макуца Максим Олегович

Исследование анизотропии теплового расширения монокристаллов $CuIn_7Se_{11}$

Ключевые слова: монокристаллы, тройные соединения, тепловое расширение.

Цель работы: разработать температурные режимы выращивания монокристаллов $CuIn_7Se_{11}$, определения их состава, кристаллической структуры и теплового расширения.

Полученные результаты и их новизна: проведен анализ литературы по кристаллической структуре тройных соединений $A^I B^{III} C_2^{VI}$ диаграмме состояния $Cu_2Se - In_2Se_3$.

Методом Бриджмена выращены оптически однородные крупноблочные кристаллы с размерами диаметр $\sim 14-20$ мм и длину ~ 40 мм. Методом микронного рентгеноспектрального анализа определен состав кристаллов $CuIn_7Se_{11}$, рентгеновским методом - структура и параметры кристаллической решетки указанного соединения. Установлено, что тройное соединение $CuIn_7Se_{11}$ кристаллизуются в структуре дефектного халькопирита с параметрами элементарной ячейки – $a = 4.036 \pm 0.002 \text{ \AA}$, $c = 32.702 \pm 0.005 \text{ \AA}$.

Экспериментальные данные показали, что содержание элементов в выращенных монокристаллах ($Cu : In : Se = 5.71 : 38.77 : 55.52$ ат.%) хорошо согласуется с заданным составом в исходной шихте ($Cu : In : Se = 5.26 : 36.85 : 57.89$ ат.%) и не наблюдается значительных отклонений в составе в различных точках кристалла, что свидетельствует об их однородности.

Установлено, что для выращенных кристаллов $CuIn_7Se_{11}$ характерна значительная анизотропия теплового расширения.

Степень использования: результаты внедрены в учебный процесс на кафедре защиты информации, специальности 1-98 01 02 учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» при преподавании дисциплины «Прикладная химия».

Область применения: создание на их основе широкополосных фотопреобразователей, приемников для ближней ИК-области спектра и других устройств, опто- и микроэлектроники.

SUMMARY

Makutsa Maxim Olegovich

The study of the anisotropy of the thermal expansion of single crystals *CuIn₇Se₁₁*

Keywords: single crystals, triple compounds, thermal expansion.

The object of study: develop the temperature regimes of growing mono-crystals *CuIn₇Se₁₁*, determine their composition, crystal structure and thermal expansion.

The results and novelty: the literature on the crystal structure of triple compounds $A^I B^{III} C_2^{VI}$ in the *Cu₂Se – In₂Se₃* state diagram was analyzed.

The method of Bridgman grown optically homogeneous large-block crystals with a diameter of ~ 14-20 mm and a length of ~ 40 mm. Method of MICROSOND x-ray spectral analysis determined the composition of crystals *CuIn₇Se₁₁*, x-ray method - the structure and parameters of the crystal lattice of the compound. It was found that the triple compound *CuIn₇Se₁₁* crystallized in the structure of the defective chalcopyrite with the unit cell parameters – $a = 4.036 \pm 0.002 \text{ \AA}$, $c = 32.702 \pm 0.005 \text{ \AA}$.

Experimental data showed that the content of elements in the grown single crystals (Cu : In : Se = 5.71 : 38.77 : 55.52 at.%) agrees well with the given composition in the initial charge (Cu : In : Se = 5.26 : 36.85 : 57.89 at.%) and there are no significant deviations in the composition at different points of the crystal, which indicates their homogeneity.

It was found that the grown *CuIn₇Se₁₁* crystals are characterized by a significant anisotropy of thermal expansion.

Degree of use: the results are implemented in the educational process at the Department of information security, specialty 1-98 01 02 educational institutions "Belarusian state University of Informatics and Radioelectronics" in the teaching of the discipline "Applied chemistry»

Sphere of application: creation on their basis of broadband photoconverters, receivers for near IR spectrum and other devices, opto- and microelectronics.