

Монокристаллы $\text{Cu}_2\text{CdGeS}_4$: выращивание и структурные свойства

Хорошко В.В.¹, Мигалевич С.А.¹, Лоско Е.В.^{1,2}, Осмоловская Т.Н.^{1,3}, Кузьмар И.И.¹

¹Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,

Бровки 6, 22013, Минск, Республика Беларусь

e-mail: khoroshko@bsuir.by, elosko17@gmail.com

²ОАО «Научно-исследовательский институт электронных вычислительных машин»,

М. Богдановича, 155, 220040, Минск, Республика Беларусь

³Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению,

Бровки 19, 220072, Минск, Республика Беларусь

Синтез шихты для получения монокристаллов $\text{Cu}_2\text{CdGeS}_4$ осуществлялся в вакуумированных кварцевых ампулах сплавлением элементарных компонент. Соединение $\text{Cu}_2\text{CdGeS}_4$ плавится инконгруэнтно, что не позволяет применять расплавные методы для выращивания его монокристаллов [1, 2]. Рентгенофазовый анализ (РФА) выполнялся на порошкообразном образце кристалла (рисунок 1 сверху) и подтвердил его многофазность. Анализ интенсивности пиков рентгенограммы позволяет оценить фазы: 40-50 % $\text{Cu}_2\text{CdGeS}_4$, 20-30 % CdS , 10-20 % Cu_2S , 5-10 % GeS_2 и др.

Выращивание монокристаллов проходило из порошкообразной шихты массой ~ 3 г в вакуумированных кварцевых ампулах диаметром $20 \pm 0,1$ мм с использованием йода в концентрации ~ 5 мг/см³ в качестве газа-носителя в течении 154 ч при градиенте 1123/1063 К между зонами источника и кристаллизации соответственно. Выращенные монокристаллы были преимущественно игольчатыми с размерами до $25 \times 1 \times 1$ мм³ и, частично пластинчатыми с размерами до $25 \times 4 \times 1$ мм³, гладко огранёнными с двух сторон чёрного цвета. По результатам элементного анализа можно судить о стехиометричности образцов: Cu – 25,98 ат%; Cd – 12,66 ат%; Ge – 13,06 ат %; S – 48,3 ат%.

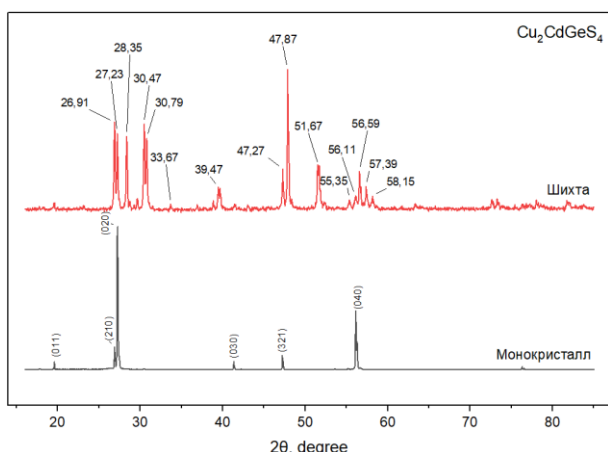


Рис.1. РФА многофазной шихты (сверху) и выращенного монокристалла $\text{Cu}_2\text{CdGeS}_4$ (снизу)

Индицирование пиков проводилось по методу Ритвельда. Обработка рентгенограмм проводилась по методу Ритвельда с использованием ПО FullProf и XPert HighScore Plus. Результаты РФА (рисунок 1 снизу) показали образование соединения $\text{Cu}_2\text{CdGeS}_4$ орторомбической структуры (пространственная группа $\text{Pmm}2_1$) [1-3] с параметрами элементарной ячейки: $a = 7,69 \pm 0,1$ Å, $b = 6,55 \pm 0,1$ Å, $c = 6,28 \pm 0,1$ Å, объем ячейки равен $V = 316,32$ Å³. Полученные величины согласуются с литературными данными, что подтверждает идентичность химического состава и структуры [3]. Для монокристалла зафиксированы характерные для орторомбической структуры рефлексы: (011), (210), (020), (030), (321), (040) – все из которых соответствуют карте базы данных ICDD № 04-074-0515 [3].

Рефлексы, которые могли бы указывать на присутствие сульфидов металлов (Cu_2S , CdS , GeS_2), оксидных или элементарных фаз, в дифрактограмме монокристалла отсутствуют, что свидетельствует об успешном получении однофазного соединения высокой степени чистоты.

Благодарности

Исследование выполнено в рамках ГПНИ 7 «Современное материаловедение, перспективные материалы и новые технологии» на 2026-2030 годы комплексное задание «Физические свойства полупроводниковых материалов на основе халькогенидов и неорганических перовскитов, в том числе в виде пленочных структур, в зависимости от их химического состава, условий получения и факторов внешнего воздействия» и по заданию 3.1.08 ГПНИ «Конвергенция-2030» подпрограмма «Междисциплинарные и синергетические исследования».

[1] O.V. Parasyuk, Y.E. Romanyuk, I.D. Olekseyuk. Journal of Crystal Growth, 2005, 275, e159-e162

[2] M. Quintero, E. Quintero, E. Moreno, P. Grima-Gallardo, J. Marquina, S. Alvarez, C. Rincón, D. Rivero, M. Morocoima, J.A. Henao, M.A. Macías, J.M. Briceño, N. Rodríguez. Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales, 2014, 34, 28-38.

[3] Jüri Krustok, Taavi Raadik, Xiaofeng Li, Marit Kauk-Kuusik, Kristi Timmo, Souhaib Oueslati and Maarja Grossberg. Journal of Physics D: Applied Physics, 2020, 53, 275102.