

Halkopirītu režģa parametru prognozēšana no jonu rādiusiem un elektronegativitātēm

Iļja Niks Stoligvo^{1,3}, Jurijs Grečenkovs¹, Dmitrijs Bočarovs¹, Sergejs Piskunovs¹, Sergejs Vinogradovs³, Mikhail Brik²

¹*Cietvielu Fizikas Institūts, Latvijas Universitāte*

²*Tartu Universitāte, Igaunija*

³*Rīgas Valsts 1. ģimnāzija, Latvija*

Halkopirīti ir tetragonālajai telpiskai grupai I-42d piederoša materiālu saime, kuru raksturo stehiometriskā formula: I-III-VI₂ vai II-IV-V₂, kur romiešu cipars apzīmē periodiskās tabulas grupas numuru. Tie tiek plaši izmantoti saules bateriju ražošanā, un līdz ar to pelnījuši rūpīgu uzmanību un detalizētu izpēti.

Šajā darbā tiek piedāvāts empīriskais modelis, kas spēj prognozēt halkopirītu strukturālos parametrus, pamatojoties uz zināmajām ķīmiskajām īpašībām. Modelī precīzas režģa konstanšu vērtības var iegūt no to veidojošo elementu jonu rādiusiem un elektronegativitātēm.

Lai pārbaudītu savu pieeju, mēs veicām rūpīgu pieejamo kristalogrāfisko datubāžu izpēti un ieguvām ticamus rezultātus, kuri tika apstiprināti ar statistisko analīzi. Šis pētījums ir vērtīgs un interesants eksperimentētājiem, kuri projektē uz halkopirīta bāzes izgatavotas pusvadītāju ierīces.

Predicting lattice constants of chalcopyrites from ionic radii and electronegativities

Iļja Niks Stoligvo^{1,3}, Jurijs Grečenkovs¹, Dmitrijs Bočarovs¹, Sergejs Piskunovs¹, Sergejs Vinogradovs³, Mikhail Brik²

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*University of Tartu, Estonia*

³*Riga State Gymnasium No. 1, Latvia*

Chalcopyrites constitute a family of materials that belong to the tetragonal I-42d space group and are characterized by the stoichiometric formula: I-III-VI₂ or II-IV-V₂ where the Roman numeral denotes the periodic table group number. They are widely known for their applications in solar cell manufacturing, and thus deserve careful attention and detailed study of their properties.

In this work an empirical model is presented that is capable of predicting structural parameters of chalcopyrites based on the available chemical data. In particular, accurate lattice constant values can be produced from the ionic radii and electronegativities of the constituent elements.

In validating our approach, we performed a thorough search of available crystallographic databases and achieved reliable results as confirmed by statistical analysis. The product of this research is of interest to experimentalists designing and manufacturing chalcopyrite-based semiconductor devices.

This research was funded by the Latvian Scientific Council grant LZP-2021/1-0322.