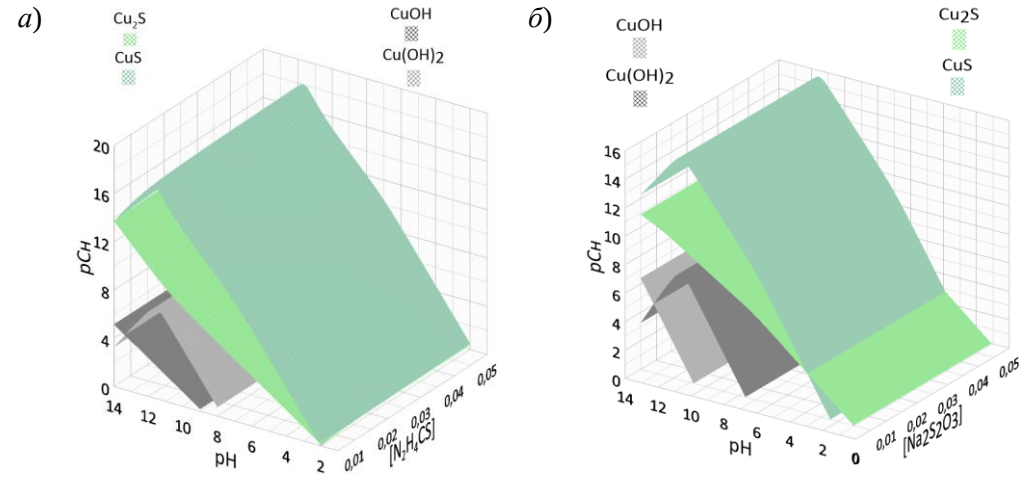
ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ОБРАЗОВАНИЯ ТВЕРДОЙ ФАЗЫ Cu_xS

Богатова П.С.[(1)], Кожевникова Н.С.[(1,2)], Маскаева Л.Н.[(1,3)]
[(1)] Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19
[(2)] Институт химии твердого тела УрО РАН
620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91
[(3)] Уральский институт Государственной противопожарной службы МЧС России
620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 22

Сульфид меди Cu_xS является полупроводником p-типа и обладает пятью стабильными при комнатной температуре кристаллическими модификациями: халькоцита Cu_2S, джарлеита $Cu_{1.96}S$, дигенита $Cu_{1.85}S$, анилита $Cu_{1.75}S$ и ковелита CuS. В зависимости от стехиометрического состава ширина запрещенной зоны Cu_xS варьируется в пределах от 1.2 до 2.53 эВ, благодаря чему Cu_xS широко используется в качестве фотокатализаторов, газовых сенсоров, элементов солнечных и Na-ионных батарей. Один из методов получения Cu_xS является метод химического осаждения из водных растворов, основанный на взаимодействии соли металла с халькогенизатором. Для осаждения Cu_xS в качестве халькогенизатора используют тиомочевину N_2H_4CN или тиосульфат натрия $Na_2S_2O_3$.

На рисунке представлены результаты расчета граничных условий образования сульфидов и гидроксидов меди (I), (II) для осаждения из следующих систем: «$CuCl_2$ – $C_4H_6O_6$ – $NH_2OH{\cdot}HCl$ − $Na_2S_2O_3$» и «$CuCl_2$ – $C_4H_6O_6$ – $NH_2OH{\cdot}HCl$ – N_2H_4CN». Области концентраций, заключенные между плоскостями, характеризующими условия образования CuS и Cu_2S (зеленые) и плоскостями, характеризующими условия образования CuOH и $Cu(OH)_2$ (серые), соответствуют прогнозируемому формированию твердой фазы Cu_xS без включения примесной фазы.



Граничные условия образования твердых фаз Cu_xS и $Cu(OH)_x$ от pH среды и концентраций N_2H_4CS (*а*), $Na_2S_2O_3$ (*б*)