

смещена в низкочастотную область, что свидетельствует о формировании водородно-связанных кластеров в жидком этаноле.

Проведены квантово-химические расчеты оптимальной геометрии, потенциальной энергии и колебательных спектров транс- и гош-конформеров молекулы этанола. Показано, что транс-конформер является более энергетически выгодным – его потенциальная энергия на 0,3 кДж/моль меньше, чем энергия гош-конформера.

Результаты квантово-химического моделирования использованы для интерпретации экспериментально зарегистрированных спектров ИК поглощения этанола, изолированного в низкотемпературной аргоновой матрице. На основании сравнения интенсивностей полос поглощения валентных ОН колебаний сделан вывод о том, что в исследуемых образцах преобладают транс-конформеры этанола.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery Jr, T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, and others, Inc., Pittsburgh, PA 12478 (2003).
2. I. Doroshenko, V. Pogorelov, V. Sablinskas. Infrared absorption spectra of monohydric alcohols // Dataset Papers in Chemistry. – 2013. - V. 2013. – P. 329406.
3. Б.Т. Куйлиев. Спектры спонтанного комбинационного рассеяния низкомолекулярных углеводов // Издательско-полиграфический творческий дом имени Чулпана, Ташкент – 2018.

$Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$ YUPQA QATLAMLARINING STRUKTURAVIY HOSSALARI

T. M. Razikov, Q. M. Qo'chqarov, D.Z. Isaqov, M. Mahmudov, M.P. Pirimmetov, A. Olimov
O'zR FA Fizika-texnika instituti

Annotatsiya. Vakuum termik bug'latish usuli bilan Sb_2S_3 va Sb_2Se_3 ikkilik birikmalarning kukunlaridan foydalanilgan holda yuqori sifatli kristallikka ega bo'lgan $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$ yupqa qatlamlari $300^\circ C$ taglik haroratida o'stirilgan. Rengen spektroskopiyasi natijalari tahlili, turli S/(S+Se) atomar ulushida o'stirilgan $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$ yupqa qatlamlar yuqori sifatli polikristall ortorombik strukturaga ega ekanligini ko'rsatdi.

Kalit so'zlar: Sb_2Se_3 , Sb_2S_3 , $Sb_2(S_x,Se_{1-x})_3$, qattiq qorishma, Rengen spektroskopiyasi, yupqa qatlam.

Bugungi kunda dunyo ilmiy tadqiqotchilar tomonidan halkogenidli surma binar birikmalar Sb_2Se_3 , Sb_2S_3 , va ular asosidagi qattiq qorishma $Sb_2(S_x,Se_{1-x})_3$ (kimyoviy formulasi - Sb_2X_3) yupqa qatlamlarini quyosh elementlarining yutuvchi qatlami sifatida ishlatilishiga katta e'tibor berilmoqda. Sababi shundaki, ushbu materiallarning fizik xususiyatlari; p- tip o'tkazuvchanligi, taqiqlangan sohasini $E_g=1,1$ dan $E_g=1,8eV$ gacha o'zgartirish mumkinligi, yuqori yutilish koeffitsientiga teng ekanligi $\alpha > 10^5 cm^{-1}$ (quyosh radiatsiyasining ko'zga ko'rinuvchan sohasida), erish harorati pastligi (Sb_2Se_3-823K , Sb_2S_3-885K) va yuqori bug' bosimiga egaligi) $Cu(In,Ga)(Se,S)_2$ hossalriga juda yaqin [1,2]. Bundan tashqari ushbu materialga kiruvchi elementlarning arzonligi, zararli emasligi, va tashqi muhitga barqarorligidir.

Tadqiqotlar boshlanganiga oz vaqt o'tganligiga qaramay, Sb_2Se_3 , Sb_2S_3 va $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$ yupqa qatlamlari asosida olingan quyosh elementlarining foydali ish koeffitsienti (FIK) sezilarli darajada yaxshilandi, mos ravishda 10.5%, 7.5% va 10.7%. [3-5].

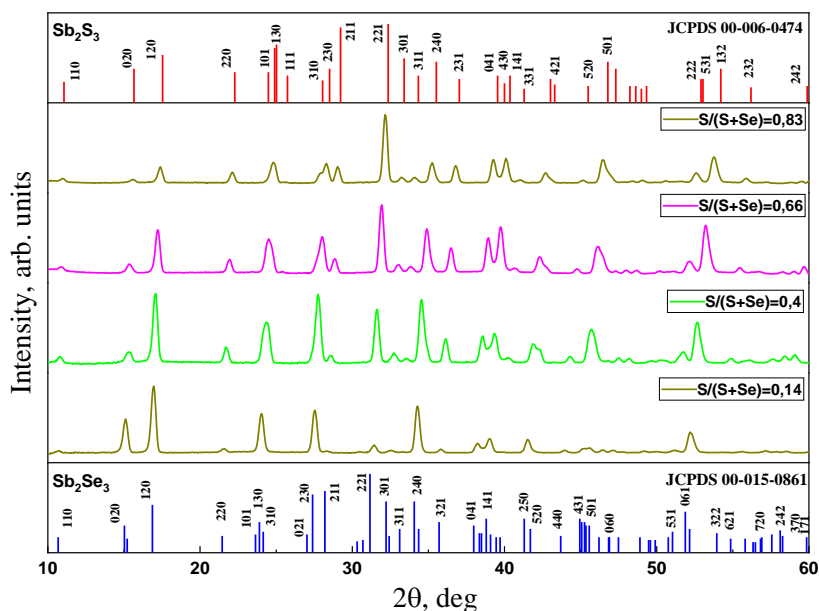
Ushbu ishda vakuum termik bug'latish usuli yordamida o'stirilgan $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$ yupqa qatlamlarining strukturaviy hossalari o'rganilgan. Manba sifatida yuqori tozalikka ega bo'lgan (99,999) Sb_2S_3 va Sb_2Se_3 ikkilik birikmalarning kukunlaridan foydalanilgan. Taglik harorat $300^\circ C$ o'zgarishsiz saqlangan va jarayon tabiiy holatda sovutilgan. Yupqa qatlamlarning kimyoviy tarkibi energiya dispersli rentgen spektroskopiyasi yordamida aniqlandi (1-jadval).

1-jadval

 $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$ yupqa qatlamlarning kimyoviy tarkibi

| Namuna, N | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | |
|-----------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| C, at. % | Sb | 40.22 | 40.38 | 40.53 | 39.9 | 39.81 | 39.76 | 39.93 | 39.45 | 38.92 | 40.76 |
| | S | - | 8.29 | 12.98 | 23.87 | 25.67 | 32.73 | 40.09 | 49.75 | 51.26 | 59.24 |
| | Se | 59.78 | 51.33 | 46.49 | 36.23 | 34.51 | 27.51 | 19.98 | 10.8 | 9.83 | - |
| Sb/(S+Se) | 0.67 | 0.68 | 0.68 | 0.66 | 0.66 | 0.66 | 0.66 | 0.66 | 0.65 | 0.64 | 0.69 |
| S/(S+Se) | 0.00 | 0.14 | 0.22 | 0.40 | 0.43 | 0.53 | 0.67 | 0.82 | 0.84 | 1.00 | |

Yupqa qatlamlarining sifatini baholaydigan parametrlardan biri taglikka (Sb_4X_6) lentalarining afzal qilingan yo'nalishlar (211), (221) bo'yicha o'stirish hisoblanadi. I-rasmda turli S/(S+Se) atomar nisbatlarda o'stirilgan $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$ yupqa qatlamlarining rangen tahlili keltirilgan. Rangen natijalarning tahlili, turli tarkibda o'stirilgan $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$ yupqa qatlamlar yuqori sifatli polikristall ortorombik strukturaga ega ekanligini ko'rsatdi.

Rasm I. $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$ yupqa qatlamlarining rangen tahlili

Rangen tahlili turli S/(S+Se) atomar nisbatlarda o'stirilgan yupqa qatlamlarida asosan (120), (020), (130), (230), (211), (221), (240) va (141) cho'qqilari mavjudligini ko'rsatdi. S/(S+Se) atomar nisbatning o'zgarishi bilan diffraksiya cho'qqilarining bosqichma-bosqich siljishi kuzatildi. Vegard qonuniga muvofiq p-XRD o'zgarishi kuzatildi; ya'ni qotishma tizimining panjara doimiysi tarkibning bosqichma-bosqich o'zgarishi bilan chiziqli ravishda o'zgaradi [6]. O'zgarish selen miqdori ortishi

bilan pastroq θ qiymatiga to'g'ri keldi, bu kichikroq oltingugurt atomlarini (1,84 Å) kattaroq selen atomlari (1,98 Å) bilan almashtirish bilan panjara parametrlarining kengayishini ko'rsatadi.

Foydalanilgan adabiyotlar ro'yxati

1. C. Jiang, J. Zhou, R. Tang, W. Lian, X. Wang, X. Lei, H. Zeng, C. Zhu, W. Tang, T. Chen, 9.7%-efficient Sb₂(S,Se)₃ solar cells with a dithieno[3,2-: B: 2',3'-d]pyrrole-cored hole transporting material, Energy Environ. Sci. 14 (2021) 359–364.
2. Y. Zhou, L. Wang, S. Chen, S. Qin, X. Liu, J. Chen, D. Xue, M. Luo, Y. Cao, Y. Cheng, E.H. Sargent, J. Tang, Thin-film Sb₂Se₃ photovoltaics with oriented one-dimensional ribbons and benign grain boundaries, Nat. Photonics 9 (2015) 409–415,
3. Zhao, Y.; Wang, S.; Li, C.; Che, B.; Chen, X.; Chen, H.; Tang, R.; Wang, X.; Chen, G.; Wang, T.; et al. Regulating Deposition Kinetics via a Novel Additive-Assisted Chemical Bath Deposition Technology Enables Fabrication of 10.57%-Efficiency Sb₂Se₃ Solar Cells. Energy Environ. Sci. 2022, 15, 5118–5128. [CrossRef]
4. Zhao, Y.; Wang, S.; Jiang, C.; Li, C.; Xiao, P.; Tang, R.; Gong, J.; Chen, G.; Chen, T.; Li, J.; et al. Regulating Energy Band Alignment via Alkaline Metal Fluoride Assisted Solution Post-Treatment Enabling Sb₂(S,Se)₃ Solar Cells with 10.7% Efficiency. Adv. Energy Mater. 2022, 12, 2103015. Energies 2023, 16, 6862 23 of 28
5. Choi, Y.C.; Lee, D.U.; Noh, J.H.; Kim, E.K.; Seok, S. II Highly Improved Sb₂S₃ Sensitized-Inorganic-Organic Heterojunction Solar Cells and Quantification of Traps by Deep-Level Transient Spectroscopy. Adv. Funct. Mater. 2014, 24, 3587–3592.
6. Denton, A. R.; Ashcroft, N. W. Vegard's law. Phys. Rev. A: At., Mol., Opt. Phys. 1991, 43 (6), 3161.

KVARS QUMIDAN YARIMO'TKAZGICHLI KREMNIY AJRATIB OLISHNING HARORATGA BOG'LIQLIGI

Jiyanova S.I., To'raev X.X., Eshmurodov X.E., Xatamova Z.X.

Termiz davlat universiteti, Termiz sh.

Annotatsiya: Ushbu tadqiqot ishida Surxondaryo viloyati hududlaridan olib kelingan kvars qumi boyitilib, laboratoriya sharoitida qaytarilishi o'rganilgan. Qaytarilish jarayoni reaktorda turli haroratlarda amalga oshirildi. Har bir haroratda olingan namina rentgen fazaviy usulda tahlil qilindi.

Tayanch so'zlar: kvars, kvarsit, harorat, mineral, kremniy, qaytaruvchi, magniy, uglerod, elektr pech, qaytarish, reaktor

Kremniy (*Si*)- uglerod oilasining metal bo'lmagan kimyoviy elementi hisoblanadi. Kremniy yer qobig'ida ikkinchi eng ko'p tarqalgan element bo'lib, uning 27,7% ni tashkil qiladi. Kremniy nomi lotinchadan kelib chiqib, “chaqmoq tosh” yoki “qattiq tosh” degan ma'noni anglatadi. Amorf elementar kremniy birinchi marta 1824 yilda shved kimyogari Yens Yakob Berzelius tomonidan ajratib olingan va element sifatida tavsiflangan [1]. Tabiatda asosan kremniy (IV) oksid (*SiO₂*) va silikat kislotaning tuzlari – silikatlar holida uchraydi. Sanoatda kremniy elektr pechlarda 2000°C-2600°C *SiO₂* ni koks bilan qaytarish orqali olinadi:



Laboratoriyada qaytaruvchilar sifatida magniydan 800°C-1300°C haroratda, alyuminiydan 1800°C-2400°C haroratda foydalanish mumkin: