

Сравнительный анализ термодинамического прогнозирования условий химического осаждения пленок PbSe в системах «Pb(Ac)₂ – Na₃Cit – NH₃·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃» и «Pb(Ac)₂ – NaGluc – NH₂·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃»

© Басалаев¹ Илья Дмитриевич, Зарубин¹ Иван Владимирович, Маскаева^{1,2} Лариса Николаевна

¹ Кафедра физической и коллоидной химии. Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина. ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Свердловская область. Россия. Тел.: +7 (343) 375-93-67. E-mail: l.n.maskaeva@urfu.ru

² Уральский институт ГПС МЧС России. ул. Мира, 22. г. Екатеринбург, 620022. Свердловская область. Россия. Тел.: +7 (343) 378-38-75.

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: анализ ионных равновесий, глюконат натрия, граничные условия, химическое осаждение, тонкие пленки, селенид свинца.

Аннотация

Пленки селенида свинца PbSe являются перспективным материалом для высокочувствительных и быстродействующих фотодетекторов, лазерных и светоизлучающих диодов инфракрасного диапазона, эффективных термоэлектрических генераторов, однако существующие методы его синтеза либо сложны и энергозатратны (вакуумные методы), либо используют дорогостоящие реагенты (селеномочевина). В связи с этим актуальной задачей является разработка простых и экономичных способов получения пленок PbSe с контролируемыми свойствами. Цель настоящей работы – сравнительный анализ двух реакционных систем гидрохимического осаждения: цитратно-аммиачной и предложенной нами глюконатно-аммиачной с использованием доступного селеносульфата натрия в качестве халькогенизатора. Исследование выполнено путем анализа ионных равновесий в зависимости от pH реакционной смеси и расчета долевых концентраций образующихся комплексных форм ионов свинца. Граничные условия образования твердых фаз PbSe (основной) и Pb(OH) (примесной) в зависимости от pH и концентрации лиганда, либо халькогенизатора в системах «Pb(Ac)₂ – Na₃Cit – NH₃·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃» и «Pb(Ac)₂ – NaGluc – NH₂·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃» представлены в трехмерных координатах. Впервые глюконат-ион применен в качестве лиганда для химического осаждения PbSe, его преимущества перед цитрат-ионом в предотвращении образования гидроксида свинца обоснованы расчетным путем и экспериментальными исследованиями. Полученные результаты исследований могут быть использованы для разработки технологического процесса химического осаждения тонких пленок PbSe, не содержащего гидроксида свинца, для создания высокофункциональных ИК детекторов.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Басалаев И.Д., Зарубин И.В., Маскаева Л.Н. Сравнительный анализ термодинамического прогнозирования условий химического осаждения пленок PbSe в системах «Pb(Ac)₂ – Na₃Cit – NH₃·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃» и «Pb(Ac)₂ – NaGluc – NH₂·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃». *Бутлеровские сообщения*. 2026. Т.86. №5. С.15-26. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-86-5-15

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Басалаев И.Д., Зарубин И.В., Маскаева Л.Н. Сравнительный анализ термодинамического прогнозирования условий химического осаждения пленок PbSe в системах «Pb(Ac)₂ – Na₃Cit – NH₃·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃» и «Pb(Ac)₂ – NaGluc – NH₂·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃». *Бутлеровские сообщения А*. 2026. Т.13. №2. Id.6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-86-5-15/ROI-jbc-A/26-13-2-6 (Russian)

The output for citing the English online version of the article:

Ilya D. Basalaev, Ivan V. Zarubin, Larisa N. Maskaeva. Comparative analysis of thermodynamic prediction of chemical deposition conditions for PbSe films in the systems “Pb(Ac)₂ – Na₃Cit – NH₃·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃” and “Pb(Ac)₂ – NaGluc – NH₂·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃”. *Butlerov Communications A*. 2026. Vol.13. No.2. Id.6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-86-5-15/ROI-jbc-A/26-13-2-6

Литература

- [1] O. Madelung, U. Rossler, M. Schulz Semiconductors: Group IV Elements, IV-IV and III-IV Compounds. Berlin/Heidelberg. Germany: *Landolt-Börnstein, New Series, Group III Springer*. **2005**. Vol.41. 401p.
- [2] J.M. Skelton, S.C. Parker, A. Togo, I. Tanaka, A. Walsh Thermal physics of the lead chalcogenides PbS, PbSe, and PbTe from first principles. *Phys. Rev. B*. **2014**. Vol.89. No.20. Id.205203. DOI: 10.1103/PhysRevB.89.205203.
- [3] Yu.I. Ravich, B.A. Efimova, I.A. Smirnov Semiconducting Lead Chalcogenides. Ed. L.S. Stil'bans. Boston, MA: *Springer US*. **1970**. 377p. DOI: 10.1007/978-1-4684-8607-0
- [4] S.V. Streltsov, A.Y. Manakov, A.P. Vokhmyanin, S.V. Ovsyannikov, V.V. Shchennikov. Crystal lattice and band structure of the intermediate high-pressure phase of PbSe. *J. Phys. Condens. Matter*. **2009**. Vol.21. No.38. Id.385501. DOI: 10.1088/0953-8984/21/38/385501
- [5] R.B. Emmons, S.R. Hawkins, K.F. Cuff. Infrared detectors: An overview. *Opt. Eng. SPIEC*. **1975**. Vol.14. No.1. P.21-30. DOI: 10.1117/12.7971760
- [6] A. Rogalski Infrared detectors: status and trends. *Prog. Quantum Electron*. **2003**. Vol.27. No.2. P.59-210. DOI: 10.1016/S0079-6727(02)00024-1
- [7] F.J. Meca Meca, M. Mazo Quintas, F.J. Rodríguez Sánchez, P. Ramos Sainz. Infrared temperature measurement system using photoconductive PbSe sensors without radiation chopping. *Sens. Actuators Phys*. **2002**. Vol.100. No.2. P.206-213. DOI: 10.1016/S0924-4247(02)00069-9
- [8] S. Tsuchikawa, H. Kobori. A review of recent application of near infrared spectroscopy to wood science and technology. *J. Wood Sci*. **2015**. Vol.61. No.3. P.213-220. DOI: 10.1007/s10086-015-1467-x
- [9] JR. J.J. Workman. Review of process and non-invasive near-infrared and infrared spectroscopy: 1993-1999. *Appl. Spectrosc. Rev. Taylor & Francis*. **1999**. Vol.34. No.1-2. P.1-89. DOI: 10.1081/ASR-100100839
- [10] S. Kim, S. Choo, Y. Kim, W.S. Hwang, M. Shin Comparative study of the near-infrared detection of PbSe fabricated using a sputter deposition method. *Thin Solid Films*. **2024**. Vol.795. Id.140313. DOI: 10.1016/j.tsf.2024.140313
- [11] R.D. Schaller, V.I. Klimov. High efficiency carrier multiplication in PbSe nanocrystals: implications for solar energy conversion. *Phys. Rev. Lett*. **2004**. Vol.92. No.18. Id.186601. DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.186601
- [12] H. Dong, Y. Gao, X. Zhang, Z. Li, W. Feng. In-situ oxygen sensitizing PbSnSe films for high-performance photoelectronic detection. *Vacuum*. **2023**. Vol.207. Id.111538. DOI: 10.1016/j.vacuum.2022.111538
- [13] H.A. Saleh, H. Shaban, S.A. Gad Morphology, electrical and linear and nonlinear optical properties of Pb_{0.85}Sn_{0.15}Se thin film. *Results Opt*. **2023**. Vol.11. Id.100369. DOI: 10.1016/j.rio.2023.100369
- [14] H. Yang, X. Li, G. Wang, J. Zheng. Lead selenide polycrystalline coatings sensitized using diffusion and ion beam methods for uncooled mid-infrared photodetection. *Coatings. Multidisciplinary Digital Publishing Institute*. **2018**. Vol.8. No.12. P.444. DOI: 10.3390/coatings8120444
- [15] L. Beaunier, H. Cachet, R. Cortès, M. Froment. Electrodeposition of PbSe epitaxial films on (111) InP. *Electrochem. Commun*. **2000**. Vol.2. No.7. P.508-510. DOI: 10.1016/S1388-2481(00)00071-0
- [16] D.K. Ivanou, E.A. Streltsov, A.K. Fedotov, A.V. Mazanik, D. Fink, A. Petrov. Electrochemical deposition of PbSe and CdTe nanoparticles onto p-Si(100) wafers and into nanopores in SiO₂/Si(100) structure. *Thin Solid Films*. **2005**. Vol.490. No.2. P.154-160. DOI: 10.1016/j.tsf.2005.04.046
- [17] Мухамедзянов Х.Н., Марков В.Ф., Маскаева Л.Н. Исследование характеристик фоторезисторов на основе гидрохимически осажденных пленок твердого раствора Pb_{0.902}Sn_{0.098}Se. *Физика и техника полупроводников*. **2013**. Т.47. №4. С.551. [Kh.N. Mukhamedzyanov, V.F. Markov, L.N. Maskaeva. Investigation of characteristics of photoresistors based on hydrochemically deposited films of Pb_{0.902}Sn_{0.098}Se solid solution. *Semiconductors*. **2013**. Vol.47. No.4. P.551. (Russian)]
- [18] Третьякова Н.А., Марков В.Ф., Маскаева Л.Н., Мухамедзянов Х.Н. Кинетика гидрохимического осаждения пленок селенида свинца, их состав, структура и свойства. *Конденсированные среды и межфазные границы*. **2005**. Т.7. №2. С.189-194. [N.A. Tretyakova, V.F. Markov, L.N. Maskaeva, Kh.N. Mukhamedzyanov. Kinetics of hydrochemical deposition of lead selenide films, their composition, structure and properties. *Condensed Media and Interphase Boundaries*. **2005**. Vol.7. No.2. P.189-194. (Russian)]
- [19] Юрк В.М., Маскаева Л.Н., Марков В.Ф., Мокроусова О.А. Кинетика гидрохимического осаждения пленок PbSe в присутствии аскорбиновой кислоты. *Журнал прикладной химии*. **2016**. Т.89. №6. С.710-718. [V.M. Yurk, L.N. Maskaeva, V.F. Markov, O.A. Mokrousova. Kinetics of hydrochemical deposition of PbSe films in the presence of ascorbic acid. *Russian Journal of Applied Chemistry*. **2016**. Vol.89. No.6. P.710-718. (Russian)]
- [20] Маскаева Л.Н., Юрк В.М., Марков В.Ф., Кузнецов М.В., Воронин В.И., Липина О.А. Структура и фотоэлектрические свойства пленок PbSe, осажденных в присутствии аскорбиновой кислоты. *Физика и техника полупроводников*. **2020**. Т.54. №10. С.1004. [L.N. Maskaeva, V.M. Yurk, V.F. Markov,

- M.V. Kuznetsov, V.I. Voronin, O.A. Lipina. Structure and photoelectric properties of PbSe films deposited in the presence of ascorbic acid. *Semiconductors*. **2020**. Vol.54. No.10. P.1004. (Russian)
DOI: 10.21883/FTP.2020.10.49935.9411
- [21] V.F. Markov, N.A. Tretyakova, L.N. Maskaeva, V.M. Bakanov, H.N. Mukhamedzyanov. Hydrochemical synthesis, structure, semiconductor properties of films of substitutional $Pb_{1-x}Sn_xSe$ solid solutions. *Thin Solid Films*. **2012**. Vol.520. No.16. P.5227-5231. DOI: 10.1016/j.tsf.2012.03.100
- [22] S. Yang, S. Liu, Y. Duan, D. Yang, C. Yang, K. Zhang, J. Zhao, R. Cui, C. Deng, S. Feng. In-situ patterned growth of ultra-fast responsive PbSe infrared photodetector via chemical bath deposition. *Appl. Surf. Sci.* **2026**. Vol.722. Id.165533. DOI: 10.1016/j.apsusc.2025.165533
- [23] N.A. Tretyakova. IR sensitization of PbSnSe films by heat treatment in air. *Inorg. Mater.* **2017**. Vol.53. No.10. P.1005-1008. DOI: 10.1134/S002016851710017X
- [24] S. Roa, M. Sandoval, M. Sirena. Chemical bath deposition of high structural and morphological quality PbSe thin films with potential optoelectronic properties for infrared detection applications. *Mater. Chem. Phys.* **2021**. Vol.264. Id.124479. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2021.124479
- [25] Ts. Templeman, M. Biton, T. Safrani, M. Shandalov, E. Yahel, Y. Golan. Chemically deposited PbSe thin films: factors deterring reproducibility in the early stages of growth. *CrystEngComm. The Royal Society of Chemistry*. **2014**. Vol.16. No.46. P.10553-10559. DOI: 10.1039/C4CE01371A
- [26] V.M. Yurk, L.N. Maskaeva, V.F. Markov, O.A. Mokrousova. Kinetics of hydrochemical deposition of PbSe films in the presence of ascorbic acid. *Russ. J. Appl. Chem.* **2016**. Vol.89. No.6. P.871-879.
DOI: 10.1134/S1070427216060045
- [27] Y. Suh, S.-H. Suh, S.Y. Lee, G.-H. Kim. Morphological and microstructural evolution of PbSe films grown on thermally oxidized Si(111) substrates by chemical bath deposition. *Thin Solid Films*. **2017**. Vol.628. P.148-157. DOI: 10.1016/j.tsf.2017.03.026
- [28] M.-H. Jang, S.-S. Yoo, M.T. Kramer, N.K. Dhar, M.C. Gupta. Properties of chemical bath deposited and sensitized PbSe thin films for IR detection. *Semicond. Sci. Technol. IOP Publishing*, **2019**. Vol.34. No.11. P.115010. DOI: 10.1088/1361-6641/ab4789
- [29] V.F. Markov, L.N. Maskaeva, E.V. Mostovshchikova, V.I. Voronin, A.V. Pozdin, A.V. Beltseva, I.O. Selyanin, I.V. Baklanova. The influence of iodide addition on the composition, morphology, crystal structure, and semiconductor and photoelectric properties of PbS films. *Phys. Chem. Chem. Phys. The Royal Society of Chemistry*. **2022**. Vol.24. No.26. P.16085-16100. DOI: 10.1039/D2CP01815B
- [30] R.D. Engelken, S. Ali, L.N. Chang, C. Brinkley, K. Turner, C. Hester. Study and development of a generic electrochemical ion-exchange process to form M_xS optoelectronic materials from ZnS precursor films formed by chemical-precipitation solution deposition. *Mater. Lett.* **1990**. Vol.10. No.6. P.264-274.
DOI: 10.1016/0167-577X(90)90030-P
- [31] A. Kassim, T.W. Tee, H.S. Min, S. Monohorn, S. Nagalingam Effect of bath temperature on the chemical bath deposition of PbSe thin films. *Kathmandu Univ. J. Sci. Eng. Technol.* **2010**. Vol.6. No.2. P.126-132.
DOI: 10.3126/kuset.v6i2.4021
- [32] Юрк В.М., Маскаева Л.Н., Марков В.Ф., Бамбуров В.Г. Влияние антиоксидантов на устойчивость водных растворов селеномочевины и на свойства полученных с их использованием пленок селенида свинца. *Журнал прикладной химии*. **2019**. Т.92. №3. С.348-357. [V.M. Yurk, L.N. Maskaeva, V.F. Markov, V.G. Bamburov. Effect of antioxidants on the stability of aqueous solutions of selenourea and on the properties of lead selenide films obtained using them. *Russian Journal of Applied Chemistry*. **2019**. Vol.92. No.3. P.348-357. (Russian)] DOI: 10.1134/S0044461819030095
- [33] Селянина А.Д., Маскаева Л.Н., Воронин В.И., Селянин И.О., Анохина И.А., Марков В.Ф. Структура и свойства двухфазных слоев $Cd_xPb_{1-x}S/CdS$, полученных химическим осаждением из этилендиамин-цитратной системы. *Физика и техника полупроводников*. **2022**. Т.56. №4. С.408. [A.D. Selyanina, L.N. Maskaeva, V.I. Voronin, I.O. Selyanin, I.A. Anokhina, V.F. Markov. Structure and properties of two-phase $Cd_xPb_{1-x}S/CdS$ layers obtained by chemical deposition from ethylenediamine-citrate system. *Semiconductors*. **2022**. Vol.56. No.4. P.408. (Russian)] DOI: 10.21883/FTP.2022.04.52196.9783
- [34] L.N. Maskaeva, A.V. Pozdin, E.V. Mostovshchikova, V.F. Markov, O.S. Eltsov, V.I. Voronin, I.V. Baklanova, P.N. Mushnikov. Low-temperature one-pot synthesis of nickel and iodine-doped photosensitive thin films of lead(II) sulfide. *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* **2025**. Vol.36. No.26. P.1730.
DOI: 10.1007/s10854-025-15816-6
- [35] Марков В.Ф., Маскаева Л.Н., Иванов П.Н. Гидрохимическое осаждение пленок сульфидов металлов: моделирование и эксперимент. *Екатеринбург: УрО РАН*. **2006**. 218с. [V.F. Markov, L.N. Maskaeva, P.N. Ivanov. Hydrochemical deposition of metal sulfide films: modeling and experiment. *Ekaterinburg: Uro RAN*. **2006**. 218p. (Russian)]
- [36] V.F. Markov, L.N. Maskaeva. Nucleation and mechanism of metal sulfide film growth using deposition by thiocarbamide. *Russ. Chem. Bull.* **2014**. Vol.63. No.7. P.1523-1532. DOI: 10.1007/s11172-014-0630-7

- [37] M. Önal. A new way in chemical bath deposition of PbSe thin films. *JOM*. **2025**. Vol.77. No.9. P.6521-6529. DOI: 10.1007/s11837-025-07430-y
- [38] Юрк В.М. Гидрохимическое осаждение высокофункциональных пленок селенида свинца селеномочевинной с использованием различных антиоксидантов. *Диссертация на соискание звания кандидата наук. ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук*. **2019**. 184с. [V.M. Yurk. Hydrochemical deposition of high-functional lead selenide films by selenourea using various antioxidants. *PhD Thesis in Chemical Sciences. Ekaterinburg*. **2019**. 184p. (Russian)]
- [39] Будкина В.А., Бельцева А.В., Маскаева Л.Н., Марков В.Ф. Химическое осаждение пленок селенида свинца селеносульфатом натрия. *Бутлеровские сообщения*. **2024**. Т.78. №4. С.67-76. [Victoria A. Budkina, Anastasia V. Beltseva, Larisa N. Maskaeva, Vyacheslav F. Markov. Chemical deposition of lead selenide films with sodium selenosulfate. *Butlerov Communications B*. **2024**. Vol.7. No.2. Id.1. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-4-67/ROI-jbc-RB/24-7-2-1]
- [40] Маскаева Л.Н., Басалаев И.Д., Селянина А.Д., Марков В.Ф. Химическое осаждение пленок PbS, легированных иттрием Y³⁺. *Бутлеровские сообщения*. **2023**. Т.73. №3. С.1-11. [L.N. Maskaeva, I.D. Basalaev, A.D. Selyanina, V.P. Markov. Chemical deposition of PbS, films doped with yttrium Y³⁺. *Butlerov Communications A*. **2023**. Vol.5. No.1. Id.13. DOI: 10.37952/ROI-jbc-A/23-5-1-13]
- [41] Фатхетдинова Т.А., Марков В.Ф., Зорина Е.А., Маскаева Л.Н., Басалаев И.Д. Сенсорные свойства химически осажденных пленок сульфида свинца к ионам тяжелых цветных металлов. *Бутлеровские сообщения*. **2025**. Т.81. №2. С.84-93. [T.A. Fatkhetdinova, V.F. Markov, E.A. Zorina, L.N. Maskaeva, I.D. Basalaev. Sensory properties of chemically deposited lead sulphide films to heavy non-ferrous metal ions. *Butlerov Communications B*. **2025**. Vol.10. No.1. Id.9. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-2-84/ROI-jbc-B/25-10-1-9]
- [42] M.P. Campos, M.P. Hendricks, A.N. Beecher, W. Walravens, R.A. Swain, G.T. Cleveland, Z. Hens, M.Y. Sfeir, J.S. Owen. A Library of Selenourea Precursors to PbSe Nanocrystals with Size Distributions near the Homogeneous Limit. *J. Am. Chem. Soc. American Chemical Society*. **2017**. Vol.139. No.6. P.2296-2305. DOI: 10.1021/jacs.6b11021
- [43] G. Schorsch, N. Ingri. Determination of hydroxide ion concentration by measurements with a lead amalgam electrode. Plumbate and borate equilibria in alkaline 3.0 M NaCl-medium: absence of monoborate (-2) and (-3) ions. *Acta Chem Scand*. **1967**. Vol.21. No.10. P.10.
- [44] Лурье Ю.Ю. Справочник по аналитической химии. 6-е изд. *Москва: Химия*. **1989**. 448с. [Yu.Yu. Lurie. Handbook on analytical chemistry. 6th ed. *Moscow: Chemistry*. **1989**. 448p. (Russian)]
- [45] F. Coccioi, M. Vicedomini. On the protonation of gluconate ions and the complex formation with lead(II) in acid solution. *J. Inorg. Nucl. Chem*. **1978**. Vol.40. No.12. P.2103-2105. DOI: 10.1016/0022-1902(78)80215-2
- [46] R.L. Pecsok, R.S.Jr. Juvet. The Gluconate Complexes. III. The Lead Gluconate System. *J. Am. Chem. Soc*. **1956**. Vol.78. No.16. P.3967-3972. DOI: 10.1021/ja01597a028
- [47] E. Bottari, M. Vicedomini. On the complex formation between lead(II) and citrate ions in acid solution. *J. Inorg. Nucl. Chem*. **1973**. Vol.35. No.4. P.1269-1278. DOI: 10.1016/0022-1902(73)80199-X
- [48] G.T. Hefter. Stability constants for the lead(II)-halide systems. *Polyhedron*. **1990**. Vol.9. No.19. P.2429-2432. DOI: 10.1016/S0277-5387(00)86823-0
- [49] T.H. Giordano. Anglesite (PbSO₄) solubility in acetate solutions: The determination of stability constants for lead acetate complexes to 85 °C. *Geochim. Cosmochim. Acta*. **1989**. Vol.53. No.2. P.359-366. DOI: 10.1016/0016-7037(89)90387-6
- [50] F. Mulla, F. Marsicano, B.S. Nakani, R.D. Hancock. Stability of ammonia complexes that are unstable to hydrolysis in water. *Inorg. Chem. American Chemical Society*. **1985**. Vol.24. No.19. P.3076-3080. DOI: 10.1021/ic00213a042
- [51] I.D. Basalaev, I.V. Zarubin, L.N. Maskaeva. Comparative analysis of thermodynamic prediction of chemical deposition conditions for PbSe films in the systems "Pb(Ac)₂ – Na₃Cit – NH₃·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃" and "Pb(Ac)₂ – NaGluc – NH₂·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃". *Butlerov Communications A*. **2026**. Vol.13. No.2. Id.6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-86-5-15/ROI-jbc-A/26-13-2-6
- [52] Басалаев И.Д., Зарубин И.В., Маскаева Л.Н. Сравнительный анализ термодинамического прогнозирования условий химического осаждения пленок PbSe в системах «Pb(Ac)₂ – Na₃Cit – NH₃·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃» и «Pb(Ac)₂ – NaGluc – NH₂·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃». *Бутлеровские сообщения А*. **2026**. Т.13. №2. Id.6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-86-5-15/ROI-jbc-A/26-13-2-6 (Russian)

The English version of the article has been published in the international edition of the journal

Butlerov Communications A
Advances in Organic Chemistry & Technologies

The Reference Object Identifier – ROI-jbc-A/26-13-2-6

The Digital Object Identifier – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-86-5-15/ROI-jbc-A/26-13-2-6

**Comparative analysis of thermodynamic prediction of chemical deposition conditions for PbSe films in the systems
«Pb(Ac)₂ – Na₃Cit – NH₃·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃»
and «Pb(Ac)₂ – NaGluc – NH₃·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃»**

Илья Д. Басалаев,¹ Иван В. Зарубин,¹ Лариса Н. Мaskaева^{1,2}

¹ *Department Physical and Colloidal Chemistry. Ural Federal University of the First President of Russia B.N. Yeltsin, Mira St., 19. Ekaterinburg, 620002. Sverdlovsk Region. Russia.*

Phone: +7 (343) 375-93-18. E-mail: mln@ural.ru

² *Ural Institute GPS of the Ministry of Emergency Measures of Russia. Mira St., 22. Ekaterinburg, 620022. Russia. Phone: +7 (343) 360-81-68.*

*Supervising author; †Corresponding author

Keywords: ionic equilibria analysis, sodium gluconate, deposition conditions, chemical bath deposition, thin films, lead selenide.

Abstract

PbSe thin films are a promising material for high-sensitivity and fast-response photodetectors, infrared laser and light-emitting diodes, and efficient thermoelectric generators; however, existing synthesis methods are either complex and energy-intensive (vacuum-based techniques) or rely on expensive reagents (e.g., selenourea). Therefore, the development of simple and cost-effective methods for producing PbSe films with controllable properties remains a relevant challenge. The aim of this work is a comparative analysis of two hydrochemical deposition systems: the conventional citrate-ammonia system and a novel gluconate-ammonia system proposed for the first time, using readily available sodium selenosulfate as the chalcogen source. The study was carried out by thermodynamic modeling of ionic equilibria employing instability constants of lead complex compounds. Mole fractions of lead complex ionic species were calculated, and the deposition domains of the target solid phase PbSe and the impurity phase Pb(OH)₂ were visualized in three-dimensional coordinates as functions of pH and ligand or chalcogen source concentration for the systems Pb(Ac)₂ – Na₃Cit – NH₃·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃ and Pb(Ac)₂ – NaGluc – NH₃·H₂O – NH₄I – Na₂SeSO₃. For the first time, the gluconate ion has been applied as a ligand for PbSe synthesis, and its advantages over the citrate ion in preventing lead hydroxide formation have been substantiated through combined experimental and theoretical analysis. The results obtained can be utilized for developing technological protocols for the controlled chemical bath deposition of PbSe thin films, which does not contain lead hydroxide, for the creation of highly functional IR detectors.