



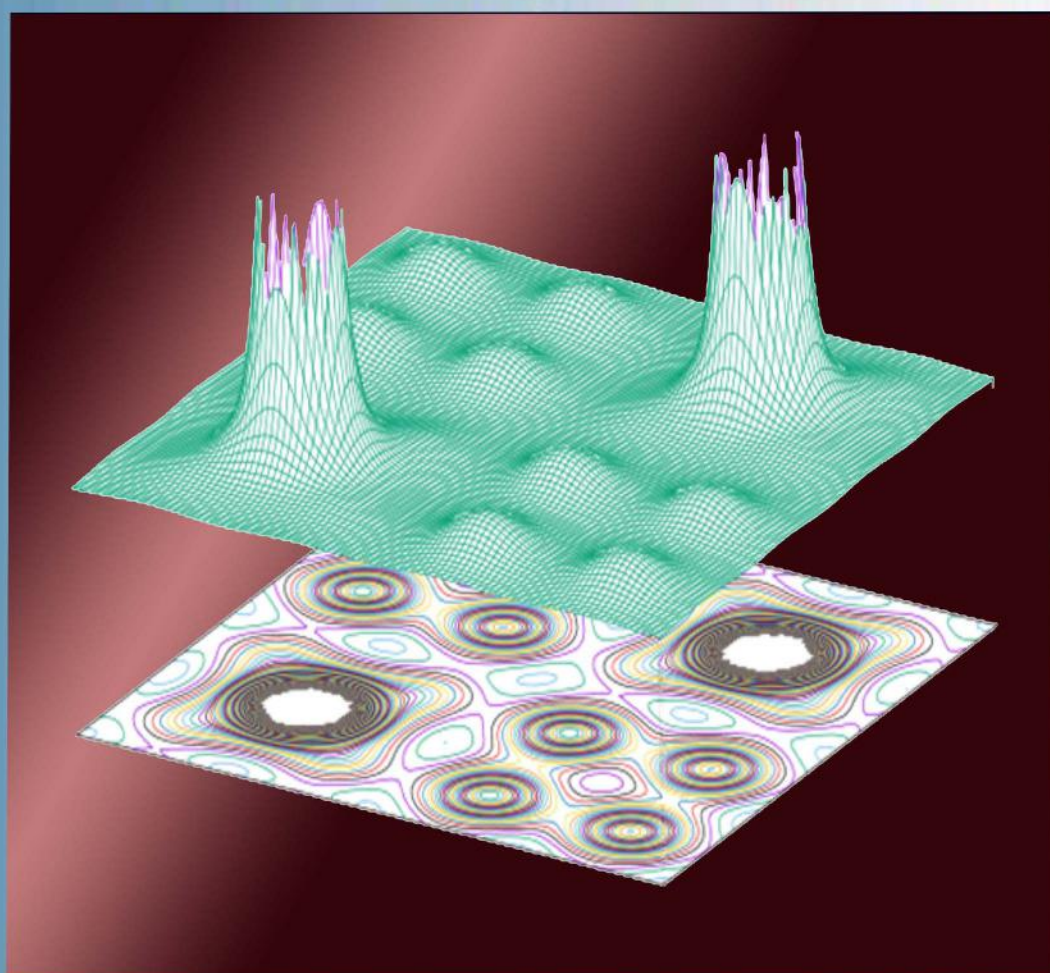
ISSN 1028-8546

Volume XXVII Number 4

Section: Az December, 2021

# Azerbaijan Journal of Physics

# Fizika



[www.physics.gov.az](http://www.physics.gov.az)

[www.physics.gov.az/ajpfizika.html](http://www.physics.gov.az/ajpfizika.html)

Institute of Physics

Azerbaijan National Academy of Sciences

Department of Physical, Mathematical and Technical Sciences

Published from 1995  
Ministry of Press and Information  
of Azerbaijan Republic,  
Registration number 514, 20.02.1995

ISSN 1028-8546  
vol. XXVII, Number 04, 2021  
Section: Az

## *Azerbaijan Journal of Physics*

# *FIZIKA*

*Institute of Physics  
Azerbaijan National Academy of Sciences  
Department of Physical, Mathematical and Technical Sciences*

### HONORARY EDITORS

Arif PASHAYEV

### EDITORS-IN-CHIEF

Arif HASHIMOV

### SENIOR EDITOR

Talat MEHDIYEV

### INTERNATIONAL REVIEW BOARD

Arif Hashimov, Azerbaijan  
Boris Denker, Russia  
Vyacheslav Tuzlukov, Belarus  
Gennadii Jablonskii, Belarus  
Vladimir Man'ko, Russia  
Mirhasan Seyidov, Turkey  
Dieter Hochheimer, USA  
Victor L'vov, Israel  
Huseyn Ibragimov, Azerbaijan

Nazim Mamedov, Azerbaijan  
Majid Ebrahim-Zadeh, Spain  
Anatoly Boreysho, Russia  
Mikhail Khalin, Russia  
Javad Abdinov, Azerbaijan  
Faik Mikailzade, Turkey  
Tayar Djafarov, Azerbaijan  
Kerim Allahverdiyev, Azerbaijan  
Talat Mehdiyev, Azerbaijan

Zakir Jahangirli, Azerbaijan  
Salima Mehdiyeva, Azerbaijan  
Nadir Abdullayev, Azerbaijan  
Oktay Tagiyev, Azerbaijan  
Ayaz Bayramov, Azerbaijan  
Tofiq Mammadov, Azerbaijan  
Shakir Nagiyev, Azerbaijan  
Rauf Guseynov, Azerbaijan

### TECHNICAL EDITORIAL BOARD

Senior secretary: Elmira Akhundova; Nazli Huseynova, Elshana Aleskerova,  
Rena Nayimbayeva, Nigar Aliyeva, Zuleykha Abdullayeva

### PUBLISHING OFFICE

131, H. Javid ave., AZ-1143, Baku  
ANAS, Institute of Physics

Tel.: (99412) 539-51-63, 539-32-23  
Fax: (99412) 537-22-92  
E-mail: [jophphysics@gmail.com](mailto:jophphysics@gmail.com)  
Internet: [www.physics.gov.az](http://www.physics.gov.az)

Published at " \_\_\_\_\_ "  
\_\_\_\_\_ str., Baku

Sent for printing on: \_\_\_\_\_. 201\_  
Printing approved on: \_\_\_\_\_. 201\_  
Physical binding: \_\_\_\_\_  
Number of copies: \_\_\_\_\_ 200  
Order: \_\_\_\_\_

It is authorized for printing:

## ZnSnAs<sub>2</sub> KRİSTALININ STRUKTUR VƏ ELEKTRON XASSƏLƏRİNİN TƏMƏL PRİNSİPLƏRDƏN TƏDQIQI

V.N. CƏFƏROVA

Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,

Az 1143, Bakı, H.Cavid pr., 131

[vcafarova@beu.edu.az](mailto:vcafarova@beu.edu.az)

Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi əsasında meta-Ümumiləşmiş Qradient Yaxınlaşması istifadə olunmaqla Quantum Atomistic ToolKit proqram paketi ilə ZnSnAs<sub>2</sub> tetraqonal birləşməsinin primitiv özəyini təşkil edən atomların tarazlıq vəziyyəti hesablanmış, qəfəs parametrləri təyin edilmişdir. Hesablamalarda elektron-ion qarşılıqlı təsiri normanı qoruyan Fritz-Haber-Institute və Hartwigsen-Goedecker-Hutter ion psevdopotensialları ilə nəzərə alınmışdır. Birləşmə üçün təməl prinsiplərdən Brillüen zonasının simmetrik nöqtələri üzrə zona quruluşu və hal sıxlığı mənzərələri təyin edilmiş, qadagan zolağın eni (0.66 və 0.67 eV) qiymətləndirilmişdir. Təməl prinsiplərdən hesablanmış zona quruluşu və hal sıxlığı mənzərəsinə əsasən müəyyən olunmuşdur ki, valent zonasının tavanı və keçirici zonanın minimumu Brillüen zonasının mərkəzi  $\Gamma$  simmetrik nöqtəsində yerləşir və beləliklə, ZnSnAs<sub>2</sub> kristalının fundamental udma kənarı düz keçidlərlə formalaşır.

**Açar sözlər:** ZnSnAs<sub>2</sub>, zona quruluşu, hal sıxlığı (DOS), Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi (DFT), meta-Ümumiləşmiş Qradient Yaxınlaşması (MGGA).

**UOT:** 538.915

### GİRİŞ

Son zamanlar xalkopirit tip yarımqeçiricilər bir sıra maraqlı xassələrinə görə tədqiqatçıların diqqətini cəlb edir. Belə ki, bu kristallar spintronikada [1] və qeyri-xətti optikada [2] tətbiq olunmaq üçün əlverişli materiallar hesab olunur. Bundan əlavə, xalkopiritlərin həm yarımqeçirici, həm də otaq temperaturunda ferromagnit xassələrə malik olması onların geniş texniki tətbiqlərinə yol açır.

II-IV-V<sub>2</sub> yarımqeçirici qrupundan olan ZnSnAs<sub>2</sub> üçqat birləşməsinin otaq temperaturunda qadağan zolağının eni 0.66 eV [3] olub, düzkeçidli birləşmədir. ZnSnAs<sub>2</sub> günəş batareyalarının, fotovoltaiq qurğuların, optik paramagnit ossilyatorların, yüksək tezlikli çeviricilərin, infraqırmızı işıqsaçan diodların və detektorların istehsalında geniş istifadə olunur [4].

### HESABLAMA METODU

Nəzəri tədqiqat işində Atomistic ToolKit (ATK) proqram paketi istifadə olunmaqla, Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi (DFT) [5] əsasında meta-Ümumiləşmiş Qradient Yaxınlaşması (MGGA) [6] ilə ZnSnAs<sub>2</sub> heksaqonal kristalın struktur və elektron xassələri tədqiq edilmişdir. Hesablamalarda elektron-ion qarşılıqlı təsiri normanı qoruyan Fritz-Haber-Institute (FHI) [7] və Hartwigsen-Goedecker-Hutter (HG) [8] ion psevdopotensialları ilə nəzərə alınmış, uyğun olaraq Double Zeta Polarized və Tier3 bazis setlərindən istifadə edilmişdir. Korrelyasiya effektləri Ceperley-Alder-Perdew-Zunger [9] sxemi üzrə nəzərə alınmaqla, TB09LDA mübadilə korrelyasiya funksionalı tətbiq olunmuşdur. Birləşmənin primitiv özəyini təşkil edən atomların tarazlıq vəziyyəti təməl prinsiplərdən hesablanmış, buradan kristal quruluşu və qəfəs parametrləri təyin edilmişdir. Bundan sonra Brillüen zonası (BZ) üzrə zona quruluşu və hal sıxlığı hesablanmış, qadagan zolağın eni təyin edilmişdir. BZ üzrə integrallama Monkhorst-Pack sxemi [10] üzrə  $7 \times 7 \times 7$   $k$ -nöqtə istifadə olunmaqla xüsusi nöqtələr üzrə cəmləmə ilə əvəz olunmuşdur. Baxılan halda

kristalın strukturunun geometrik optimallaşdırılması zamanı atomlararası qarşılıqlı təsir qüvvəsinin maksimal qiyməti  $0.001 \text{ eV}/\text{\AA}$ , mexaniki gərginlik tenzorunun maksimal qiyməti isə  $0.001 \text{ eV}/\text{\AA}^3$ -dan kiçik olana qədər, yəni tarazlıq quruluş parametrlərinə gətirilənə qədər optimallaşdırma proseduru davam etdirilmişdir. Dalğa funksiyalarının ayrılışında kinetik enerjinin maksimal qiyməti 75 Ha olmuşdur.

Tədqiq edilən birləşmənin qadağan zolağının qiymətinin məlum eksperimental nəticəyə uyğun alınması üçün zona quruluşu hesablamalarında Becke-Roussel mübadilə potensialı [11] tətbiq olunmuşdur.

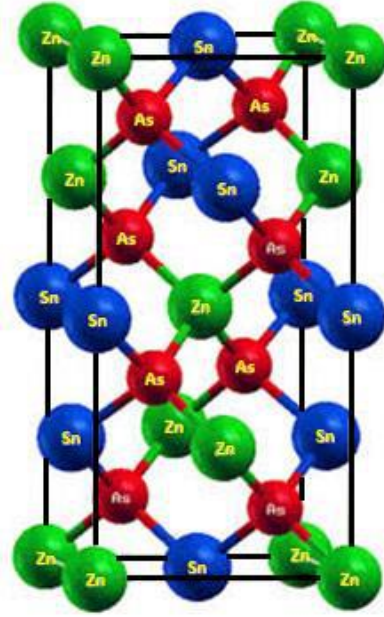
### NƏTİCƏ VƏ MÜZAKİRƏ ZnSnAs<sub>2</sub>-NİN QURULUŞU

Kimyəvi formulu II-IV-V<sub>2</sub> olan üçqat birləşmələri binar III-V qrup birləşmələrindən III qrup elementini II və IV qrup elementləri ilə əvəz etməklə almaq mümkündür. Bu strukturun elementar özəyi sfalerit ilə müqayisədə iki dəfə çoxdur. Tədqiq edilən ZnSnAs<sub>2</sub> birləşməsi  $\bar{1}\bar{4}2d$  (No.122) fəza qrupuna malik olub, normal şəraitdə xalkopirit strukturda kristallaşır. Belə ki, ZnSnAs<sub>2</sub> kristalında Zn və Sn atomlarının hər biri ətrafında dörd ədəd As atomu olmaqla tetraqonal Bravis qəfəsinə malikdir. Strukturda Zn<sup>+2</sup> və Sn<sup>+4</sup> kationları uyğun olaraq koordinatları (0, 0, 0), (0, 1/2, 1/4) və (0, 0, 1/2), (0, 1/2, 3/4) olan yerləri tuturlar. Hər bir As atomu isə, şəkil 1-dən görüldüyü kimi, iki Zn və iki Sn atomu ilə əhatə olunmuşdur. ZnSnAs<sub>2</sub> laylı quruluşa malikdir və strukturda bir lay digərinə paraleldir. [12] işində tetraqonal elementar özəyin dəqiq qəfəs parametrləri verilmişdir:  $a=5.852 \pm 0.001 \text{ \AA}$ ;  $c=11.705 \pm 0.001 \text{ \AA}$  və quruluşda arsen atomunun vəziyyətini təyin edən parameterin qiyməti  $u=0.239$ .

ZnSnAs<sub>2</sub>-nin kristal quruluşu [13]-də rentgen şüalarının difraksiya analizi ilə eksperimental tədqiq edilmiş, bu təcrübi işdə struktur parametrləri üçün  $a=b=5.8360(1) \text{ \AA}$ ,  $c=11.686(2) \text{ \AA}$  və atomlararası rabitə uzunluqları üçün  $d(\text{Zn-As})=2.499(2)$ ,  $d(\text{As-Sn})=2.558(2) \text{ \AA}$  təyin edilmişdir. [14]-də

$a=5.82\text{Å}$ ,  $c=11.70\text{ Å}$  və daxili parameter üçün  $u=0.23$  alınmışdır. Məciov və başqalarının işində [3] ilkin elementləri şaquli sobada əritməklə və sonra həmin sobada Bridcmen üsulu istifadə olunmaqla  $0.08\text{ mm/dəq.}$  sürəti ilə göyərdilərək  $\text{ZnSnAs}_2$  birləşmələri alınmışdır. Alınmış  $\text{ZnSnAs}_2$  birləşməsinin ayrı-ayrı hissələrindən götürülmüş nümunələrin otaq temperaturunda çəkilmiş rentgenoqramlarından aydın olur ki, bu kristallar qəfəs sabitlərinin qiymətləri  $a=5.853\pm 0.02\text{ Å}$  və  $c=11.712\pm 0.005\text{Å}$  olan tetraqonal xalkopirit quruluşa malikdirlər.

İşdə  $\text{ZnSnAs}_2$ -nin struktur parametrləri Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi (DFT) və meta-Ümumiləşmiş Qradient Yaxınlaşması (MGGA) ilə hesablanmışdır. Təməl prinsiplərdən hesablamalardan kristal təşkil edən atomlararası məsafələr üçün  $d(\text{Zn-As})=2.336$  (FHI),  $2.341\text{ Å}$  (HGH);  $d(\text{As-Sn})=2.750$  (FHI),  $2.625\text{ Å}$  (HGH) və  $d(\text{Zn-Sn}) = 4.081$  (FHI),  $4.025\text{ Å}$  (HGH) qiymətləri təyin edilmişdir. Qəfəs parametrləri üçün isə FHI psevdopotensialı ilə  $a=5.771$ ,  $c=11.909\text{Å}$ ,  $u=0.250$  və HGH ilə  $a=5.693$ ,  $c=11.52\text{Å}$ ,  $u=0.250$  alınmış nəticələr aşağıdakı cədvəl 1-də verilmişdir. Cədvəldə müqayisə üçün qəfəs parametrlərinin ədəbiyyatdan məlum nəticələri də gətirilmişdir.



Şəkil 1. Xalkopirit  $\text{ZnSnAs}_2$  -nin kristal quruluşu.

Cədvəl 1.

Təyin edilmiş quruluş parametrləri ilə məlum nəticələrin müqayisəsi.

Tədqiqat metodu	Parametr				Ədəbiyyat
	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$c/2a$	$u$	
MGGA-FHI	5.771	11.909	1.03	0.250	
MGGA-HGH	5.693	11.52	1.01	0.250	
LDA-GGA	5.606	11.212	1.00	0.250	[15]
GGA	5.920	12.043	1.017	0.227	[16]
Ekspirement	5.853	11.712	1.00	-	[3]

Cədvəl 1-dən görüldüyü kimi, qəfəs parametrlərinin hesablamalardan alınmış qiymətləri məlum nəzəri [15, 16] və eksperimental [3] işlərin nəticələri ilə yaxşı uzlaşır.

### $\text{ZnSnAs}_2$ -nin ELEKTRON XASSƏLƏRİ

Ədəbiyyatda  $\text{ZnSnAs}_2$  birləşməsinin elektron xassələrinin öyrənilməsinə aid bir çox nəzəri tədqiqat işlərinə [17, 18] rast gəlinir. Bu işlərin əksəriyyətində  $\text{ZnSnAs}_2$  üçün qadağan zolağın eni ( $E_g$ ) məlum eksperimental nəticəyə nisbətən kiçik alınmışdır. [17] işində DFT-GGA-LAPW metodu ilə  $\text{ZnSnAs}_2$  birləşməsinin struktur, elektron və optik xassələri tədqiq edilmişdir. Həmin işdə  $\text{ZnSnAs}_2$  xalkopirit kristalının qadağan zolağının eni  $0.42\text{ eV}$  olub, məlum eksperimental nəticədən ( $0.66\text{ eV}$ ) kiçik alınmışdır. Digər nəzəri işdə [18] təməl prinsiplərdən FP-LAPW+lo və MGGA metodu ilə birləşmə üçün elektron və optik xassələr hesablanmış, qadağan zolağın eni  $0.32\text{ eV}$  qiymətləndirilmişdir.

$\text{ZnSnAs}_2$ -nin elektron xassələrinin öyrənilməsinə aid işlərin tədqiqi göstərir ki, yalnız Məciov və başqalarının işində [3] birləşmənin qadağan zolağının eni eksperimental olaraq təyin edilmişdir. Həmin işdə [3]  $\text{ZnSnAs}_2$  xalkopirit birləşməsində İQ şüaların udulması və buraxılmasının temperaturdan asılılığı öyrənilmiş, otaq temperaturunda qadağan olunmuş zolağın eni  $E_g=0.66\text{ eV}$  müəyyən edilmişdir.

İşdə normanı qoruyan FHI və HGH ion psevdopotensialları istifadə olunmaqla  $\text{ZnSnAs}_2$  xalkopirit struktur üçün zona quruluşları və hal sıxlıqları hesablanmışdır. Qeyd edək ki, qadağan zolağın eninin məlum eksperimental nəticəyə uyğun alınması məqsədilə Becke-Roussel potensialı tətbiq edilmişdir.

Cədvəl 2.

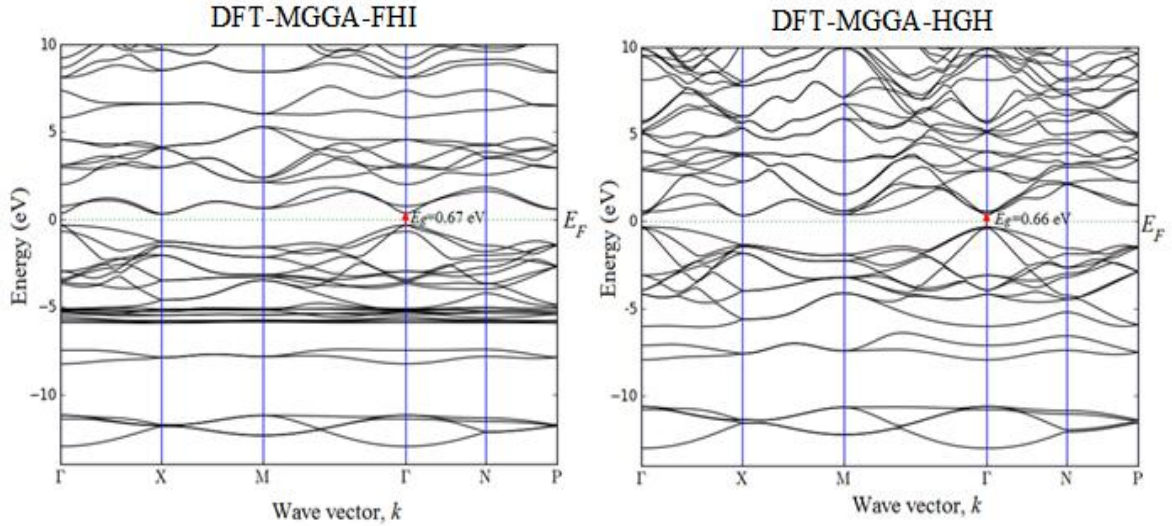
$\text{ZnSnAs}_2$  üçün təməl prinsiplərdən hesablanmış və məlum işlərin nəticələrinin müqayisəsi.

Tədqiqat metodu	$E_g, \text{eV}$	Ədəbiyyat
ATK, MGGA-FHI	0.67	
ATK, MGGA-HGH	0.66	
Wien2k, GGA-PBE	0.42	[17]
Wien2k, GGA	0.32	[18]
Experiment	0.66	[3]

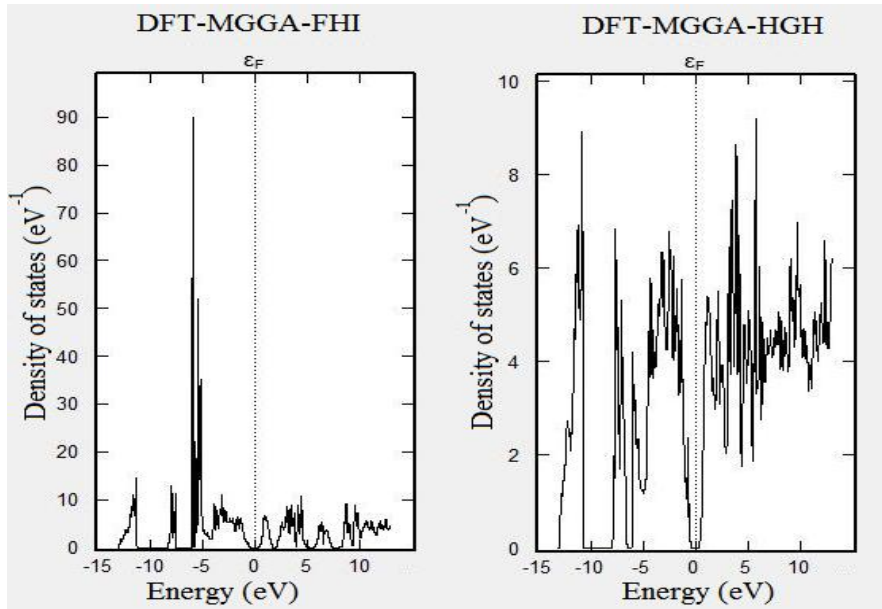
DFT-MGGA metodu ilə yerinə yetirilmiş nəzəri tədqiqat işində  $\text{ZnSnAs}_2$ -nin hesablanmış zona quruluşuna əsasən qadağan zolağın eni  $0.67\text{ eV}$  (FHI) və  $0.66\text{ eV}$  (HGH) qiymətləndirilmişdir və alınmış nəticələr əldə edilmiş eksperimental işin nəticəsi ( $0.66\text{ eV}$  [3]) ilə çox yaxşı uyğunluq təşkil edir.

DFT-MGGA-FHI və HGH metodları ilə hesablanmış zona quruluşları şəkil 2-də verilmişdir. Şəkillərdə Fermi enerji ( $E_F$ ) üfqi və şaquli qırıq xətlərlə göstərilmişdir.





Şəkil 2. ZnSnAs<sub>2</sub> üçün DFT-MGGA-FHI (0.67 eV) və HGH (0.66 eV) metodları ilə hesablanmış zona quruluşları.



Şəkil 3. ZnSnAs<sub>2</sub> üçün DFT-MGGA-FHI və HGH metodları ilə hesablanmış tam hal sıxlığı (TDOS) mənzərələri.

Hesablanmış zona quruluşu (şəkil 2) və tam hal sıxlığı (şəkil 3) mənzərələrinə əsasən ZnSnAs<sub>2</sub> xalkopirit kristalının valent zonasını üç qrupa bölmək olar. FHI psevdopotensialı ilə: I valent zona qrupu (-13÷-11.2)eV; II qrup (-8.3÷-7.5) eV və yuxarı valent zona qrupu isə (-5.9÷-0.34) eV enerji oblastını əhatə edir. HGH ilə bu enerji aralqları (-13÷-10.6), (-7.9÷-7.13) və (-6÷-0.4) eV enerji oblastlarına uyğundur. Təməl prinsiplərdən hesablanmış parsial hal sıxlıqları mənzərələrinə görə müəyyən edilmişdir ki, Fermi enerji səviyyəsindən aşağıda yerləşən valent zonalar qrupu əsasən As-nin 4p və Sn-un 5p hallarından, orta valent zonalar qrupu isə sinkin d hallarından törəyir. Ən aşağı valent zonalar qrupu As-nin s-halları ilə təyin olunur. Qeyd edək ki, sinkin d halları ZnSnAs<sub>2</sub> kristalının tam hal sıxlığı mənzərəsinə əhəmiyyətli pay verir. Fermi enerji səviyyəsindən yuxarıda yerləşən keçirici zonalar mənzəyini Sn-un 5s və As-nin 4p hallarından götürür.

Valent zonasının maksimumu və keçirici zonanın minimumu As-nin 4p hallarından törəyir.

## NƏTİCƏ

İşdə Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi ilə meta-Ümumi-ləşmiş Qradient Yaxınlaşması metodundan istifadə etməklə ZnSnAs<sub>2</sub> xalkopirit birləşməsinin struktur və elektron xassələri tədqiq edilmişdir. ZnSnAs<sub>2</sub>-nin hesablanmış zona quruluşlarına əsasən təyin edilmiş qadağan zolaqlarının eni ( $E_g=0.67$  eV (FHI) və 0.66 eV (HGH)) ədəbiyyatdan məlum eksperimental işin nəticələri ilə ( $E_g=0.66$  eV) çox yaxşı uyğunluq təşkil edir. Təməl prinsiplərdən hesablamalardan müəyyən olunmuşdur ki, tədqiq edilən ZnSnAs<sub>2</sub> heksaqonal kristalın qadağan zolağı Brillüen zonasının mərkəzində yüksək simmetriyalı  $\Gamma(0,0,0,0,0)$  nöqtəsində yerləşir və birləşmə düzkeçidli yarımkəçiricilər qrupuna aiddir.

**V.N. CƏFƏROVA**

- [1] *S.J. Pearton et al.*, Mater. Sci. and Eng. R, 2003, v. 40, p.137.
- [2] *L. Bai, Z. Lin, Z. Wang and C. Chen*, J. Chem. Phys., 2004, v.120, p.8772.
- [3] *A.B. Mejidov, R.M. Muradov, H.Kh. Xalilova, T.R.Mekhtiyev*, Transactions, Series of Phys.-Math. And Techn. Sciences, Physics and Astronomy, 2004, v. XXIV, №2, p.110.
- [4] *B. Delley*, J. Chem. Phys., 2000, v.113, p.7756.
- [5] *P. Hohenberg, W. Kohn*. Phys. Rev., 1964, v.136, p. B864.
- [6] *J.P. Perdew, J. Tao, V.N. Staroverov, G.E. Scuseria*, J. Chem. Phys., 2004, v.120, p.6898.
- [7] *F. Martin, S. Matthias*. Comput. Phys. Commun., 1999, v.119, p.67.
- [8] *C. Hartwigsen, S. Goedecker, J. Hutter*, Phys. Rev. B, 1998, v.58, p.3641.
- [9] *J. Perdew and A. Zunger*. Phys. Rev. B, 1981, v.23, p.5048.
- [10] *H.J. Monkhorst and J.D. Pack*, Phys. Rev. B, 1976, v.13, p.5188.
- [11] *A.D. Becke, and M.R. Rousnel*, Phys. Rev. A., 1989, v.39, p.3761.
- [12] *D.B. Gasson et al.*, Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1962, v.23, p.1291.
- [13] *S.F. Marenkin et al.*, Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2006, v.51, p.790.
- [14] *K. Hayashi et al.*, J. Appl. Phys., 2016, v.119, p.125703.
- [15] *A. Habanyama et al.*, The African Review of Physics, 2015, v.10, p.291.
- [16] *V.L. Shaposhnikov, A.V. Krivosheeva, V.E. Borisenko*, Phys. Rev. B, 2012, v.85, p.205201.
- [17] *A. Soni, A. Gaur, K. Khan, J. Sahariya*, Materials Today: Proceedings, 2019, v.19, p.564.
- [18] *G. Murtaza et al.*, J. of Optoelectronics and Advanced Materials, 2014, v.16, p.110.

**V.N. Jafarova**

**AB INITIO STUDY OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF ZnSnAs<sub>2</sub>**

The structural and electronic properties of ZnSnAs<sub>2</sub> crystal were studied by DFT-MGGA method within meta-General Gradient Approximation using Atomistix ToolKit program software. The electron-ion interactions were treated by the Fritz-Haber-Institute and Hartwigsen-Goedecker-Hutterion norm-conserving ionic pseudopotentials. The TB09LDA exchange-correlation functional, Double Zeta Polarized and Tier3 basis sets were used in resent calculations. First-principle studied reveal that the valence band maximum and conduction band minimum located at the  $\Gamma(0, 0, 0)$  symmetric point.

**В.Н. Джафарова**

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ZnSnAs<sub>2</sub> AB INITIO**

Представлены результаты теоретических исследований структурных и электронных свойств ZnSnAs<sub>2</sub>. Основные расчеты выполнены с использованием программного пакета Atomistix ToolKit. Для описания структурных и электронных свойств использовался метод Функционала Электронной Плотности с использованием норм-сохраняющих ионных псевдопотенциалов в рамках мета-Обобщённого Градиентного Приближения и использовались обменно-корреляционный функционал TB09LDA и базисные наборы Double Zeta Polarized и Tier. Исследования ab initio показывают, что максимум валентной зоны и минимум зоны проводимости расположены в точке симметрии  $\Gamma(0, 0, 0)$ .

*Qəbul olunma tarixi: 13.09.2021*

## Ge-As-Se-S XALKOGENİD ŞÜŞƏVARI SİSTEMİNDƏ RENTGEN DİFRAKSIYA SƏPİLMƏSİ

S.İ. MEHDİYEV<sup>1</sup>, R.İ. ƏLƏKBƏROV<sup>1,2</sup>, S.M. MƏMMƏDOV<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,  
Bakı, Az 1143, H.Cavid, 131, E-mail: Rahim-14@mail.ru

<sup>2</sup>Azərbaycan Dövlət İqtisad Universiteti (UNEC), Bakı, Az 1001, İstiqlaliyyət 6

$\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$ ,  $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$ ,  $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$ ,  $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$ ,  $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$ ,  $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$ ,  $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$ ,  $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ ,  $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$  xalkogenid şüşəvari yarımkeçirici (XŞY) tərkibləri fırlanan soba üsulu ilə sintez olunmuş və onların toz halında hazırlanmış nümunələrinin amorfluğu Rentgen difraksiya metodu ilə təsdiq edilmişdir. Topoloji məhdudiyətlər nəzəriyyəsinə (TMN) əsasən müəyyən olunmuşdur ki,  $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$  tərkibinə məxsus orta koordinasiya ədədi  $Z=2,4$  şərtini ödədiyindən "sıfırıncı" tezlikli rəqs modlarının xalkogenid şüşəvari şəbəkədəki payı  $f=0$ -a bərabər olur. Bu isə nəzəriyyəyə görə "izostatik şüşə" halına uyğun gəlir. Göstərilmişdir ki, "sərt gərginlikli" şüşə halına ( $Z > 2,4$ ,  $N_{co} > 3$ ) uyğun tərkiblərdə ( $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$ ,  $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$ ,  $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$ ,  $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ ,  $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ ) orta nizamın ölçüsü nisbətən artaraq  $L=25,37 \div 33,74 \text{ \AA}$  intervalında dəyişir.

**Açar sözlər:** Xalkogenid, şüşə, amorf, orta nizam.

**PACS:** 81.05.Gc, 61.80.

### GİRİŞ

Müasir dövrdə xalkogenid şüşəvari yarımkeçiricilər (XŞY) spektrin infraqırmızı oblastında yüksək şəffaflığa malik olub optik linzalarda, Breqq qəfəslərində, optik qeydedici və yaddaş çeviricilərində geniş tətbiq olunaraq kimyəvi, bioloji spektroskopiyanın, optika və fotonikanın perspektivli materialları hesab olunur [1-4]. Optik qadağan zonasının eni ( $E_g$ )  $1 \div 3 \text{ eV}$  intervalında dəyişən bu maddələr optik spektrin infraqırmızı oblastında ( $3 \div 12 \text{ mkm}$ ) daha yüksək şəffaflıq və yüksək qeyri-xətti sındırmaya malik olması ilə diqqəti cəlb edir [4-7]. Bu maddələrin nazik təbəqələrinin mürəkkəb işığı monoxromatik işığa çevirən difraksiya qəfəsləri kimi spektroskopiyada, işıq modulyasiyası detektorlarında, qeydedicilərdə və optik rabitə qurğularında tətbiqi əvəzlənməzdir [8-11]. Qeyd olunan tədqiqatlar göstərir ki, xalkogenid şüşələrin uğurlu tətbiqinə nail olmaq üçün stabil şüşə halına uyğun tərkiblərin alınması zəruridir.

Təqdim olunan məqalənin əsas elmi ideyası mürəkkəb komponentli Ge-As-Se-S XŞY-sistemində müxtəlif koordinasiya ədədlərinə malik (Ge ( $Z=4$ ), As ( $Z=3$ ), Se və S ( $Z=2$ )) tərkib elementi atomlarının nisbi atom faiz miqdarını məqsədyönlü dəyişərək stabil parametrlərə malik şüşəvari şəbəkənin alınmasına nail olunması və onun lokal quruluşla əlaqələrinin topoloji məhdudiyətlər nəzəriyyəsi (TMN) əsasında izah olunmasıdır.

### TƏCRÜBƏNİN METODİKASI VƏ NÜMUNƏLƏRİN ALINMASI

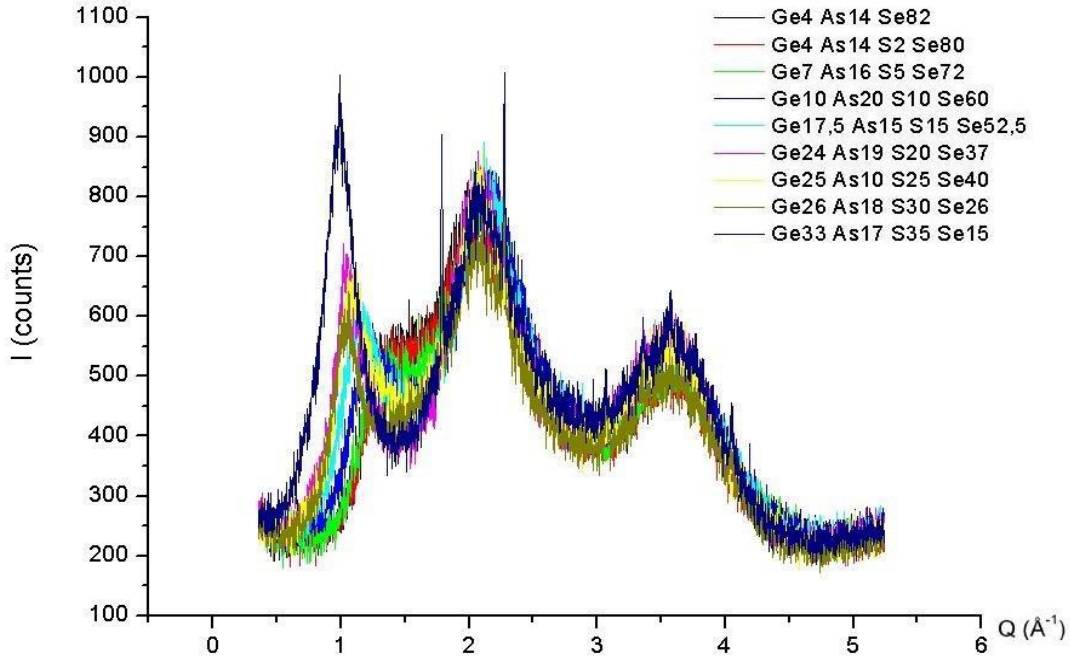
$\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$ ,  $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$ ,  $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$ ,  $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$ ,  $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$ ,  $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$ ,  $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$ ,  $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ ,  $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$  xalkogenid şüşəvari yarımkeçirici (XŞY) tərkiblərinin sintezi fırlanan silindrik soba üsulu ilə yerinə yetirilmişdir. Bunun üçün göstərilən mürəkkəb komponentli şüşəvari tərkiblərə məxsus xüsusi təmizlikli (təmizlik dərəcəsi 99,9999%) elementlərdən seçilmiş stexiometrik və qeyri-stexiometrik tərkib nisbətlərinə uyğun elekton tərəzidə çəkərək, daxili diametri  $12 \div 17 \text{ mm}$  və

havası  $10^{-4}$  tor təzyiqə qədər sorulmuş kvarts ampulalara doldurulmuşdur. Tədqiqat üçün seçilmiş mürəkkəb komponentli maddələrin sintezi  $950^\circ\text{C}$  temperaturda yerinə yetirilmişdir. Sintezin yüksək temperaturda aparılması nəticəsində tərkibə daxil olan bütün komponentlərin mümkün qədər az özlülüklə bir-birinə qarışmasına nail olunmuşdur. Sobanın qızdırılması nixrom spirali ilə, temperaturun ölçülməsi isə xromel-alumel termocütü vasitəsilə edilmişdir. Sintez olunacaq mürəkkəb komponentli tərkiblərin bircinsliyini təmin etmək üçün  $950^\circ\text{C}$  temperaturda 11 saat ərzində saxlanılmış, sintez prosesinin sonu söndürülmüş fırlanan soba rejimində həyata keçirilmişdir. Tədqiqat zamanı alınmış təbəqələrin rentgen quruluş analizi D2 PHASER toz difraktometri vasitəsilə edilmişdir. Şüalanmanın mənbəyi  $40\text{kV}$  gərginlik və  $40\text{mA}$  cərəyan şiddəti rejimində işləyən CuK $\alpha$  anodudur. Onun dalğa uzunluğu  $\lambda=1,5406 \text{ \AA}$ . Difraksiya mənzərəsinin analizi difraksiya maksimumunun vəziyyətinin ( $2\theta$ ) amplitudunun, sahəsinin və maksimumun yarısına uyğun olan enin ( $\Delta Q$ ) təyini (full with at half maximum-FWHM) Evaluation programına əsasən yerinə yetirilmişdir.

### NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil 1-də mürəkkəb komponentli  $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$ ,  $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$ ,  $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$ ,  $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$ ,  $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$ ,  $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$ ,  $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$ ,  $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ ,  $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$  XŞY tərkiblərinin Rentgen difraksiya səpilməsi spektrləri təsvir olunmuşdur.

Göründüyü kimi, tədqiq olunan bütün tərkiblərə məxsus difraksiya səpilmə spektrləri üçün səpilmə vektorunun  $Q=0,99 \div 1,41 \text{ \AA}^{-1}$  intervalında birinci kəskin difraksiya piki (BKDP) müşahidə olunur. Bu nəticə müxtəlif binar  $\text{As}_2\text{Se}_3$  ( $\text{As}_2\text{S}_3$ ),  $\text{GeSe}_2$  və mürəkkəb komponentli  $\text{As}_x\text{Se}_y\text{S}_{1-x-y}$ ,  $\text{As}_x\text{Se}_y\text{Te}_{1-x-y}$  ( $x=40$ ,  $y=30$  at%),  $\text{As}_x\text{Se}_y\text{S}_{1-x-y}$ ,  $\text{As}_x\text{Se}_y\text{Te}_{1-x-y}$  ( $x=33,3$ ,  $y=33,3$  at%) xalkogenid şüşələr üzərində aparılan Rentgen və neytron difraksiya səpilməsi təcrübələrinin nəticələrində alınan BKDP-nin vəziyyəti ilə uyğunluq təşkil edir [12,13].



Şəkil 1. Ge-As-Se və Ge-As-Se-S XŞY-tərkiblərinin Rentgen difraksiya səpilmə əyriləri.

Tədqiq olunan maddələrin Rentgen difraksiya səpilməsi spektrlərində müşahidə olunan birinci kəskin difraksiya pikləri kovalent rabitəli amorf maddələrdə orta nizam quruluşunun varlığı ilə əlaqələndirilir [14]. Şəkil 1-də göstərilən bütün tərkiblər üçün BKDP-ni xarakterizə edən bütün parametrlər (pikin vəziyyəti ( $Q_1$ ), pikin yarımni ( $\Delta Q$ )) qrafiklərə əsasən orta nizamın ölçüsü ( $L$ ) aşağıdakı düsturla [15] hesablanmış nəticələr cədvəl.1-də təsvir olunmuşdur.

$$L = 2\pi/\Delta Q \quad (1)$$

Tədqiq olunan maddələrin tərkibindən asılı olaraq BKDP-ni xarakterizə edən parametrlərin mürəkkəb komponentli xalkogenid şüşələrin halını müəyyən edən orta koordinasiya ədədi ( $Z$ ) və kovalent rabitəli xalkogen atomlarının sayının xalkogen olmayan atomlarının sayına nisbəti ( $R$ ) [16] (2) və (3) düsturları ilə hesablanmışdır (cədvəl 1).

$$Z = x_i r_i + x_j r_j + x_k r_k + x_n r_n \quad (2)$$

$$R = \frac{x_i r_i + x_j r_j}{x_k r_k + x_n r_n} \quad (3)$$

Burada  $r_i, x_i, r_j, x_j$ —maddədə xalkogen,  $r_k, x_k, r_n, x_n$ —isə xalkogen olmayan atomlarının kovalent koordinasiyası və molyar payıdır.

Cədvəl 1-də göstərilən nəticələrə topoloji məhdudiyətlər nəzəriyyəsinə [17] tətbiq etdikdə tədqiq olunan  $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$  tərkibi üçün orta koordinasiya ədədi  $Z=2,4$  şərtini ödəyir və “sıfırıncı” tezlikli rəqs modlarının xalkogenid şüşəvari şəbəkədəki payı  $f=0$ -a bərabər olur. Bu isə nəzəriyyəyə görə “izostatik şüşə” halına uyğun gəlir.  $Z<2,4$  - olduqda germaniumun

(Ge), arseniumun (As), kükürdün (S) konsentrasiyasının azalması, selenin (Se) isə konsentrasiyasının artması nəticəsində  $f$ -in qiyməti  $f=0$ -dan  $0,15$ -ə kimi artaraq  $f>0$  şərtini ödəyir. Bunun nəticəsində (cədvəl 1) şüşəvari şəbəkədə rabitə və bucaq məhdudiyətlərinin ( $N^a$  və  $N^b$ ) miqdarı azalır ki, bu da məhdudiyətlərin ümumi miqdarının  $N_{co}<3$  olması, yəni “elastik şüşə” halının yaranması ilə nəticələnir (burada sərbəstlik dərəcələrinin sayı 3-ə bərabərdir). Sonuncu nəticə göstərir ki, cədvəldə təsvir olunan  $N_{co}<3$  şərtini ödəyən təkilblər ( $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$ ,  $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$ ,  $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$ ), mövcud nəzəriyyəyə görə, asanlıqla kristallaşma qabiliyyətinə malik olmalı idi. Doğrudan da, cədvəl 1-də təsvir olunan Rentgen difraksiya səpilməsinin nəticələri göstərir ki, məhdudiyətlərin miqdarı  $N_{co}<3$  olduqda, orta nizamın ölçüsü  $L=24,2631$  Å -dən  $L=22,2887$  Å-ə qədər qismən azalır. Yəni, alınan təcrübə nəticə topoloji məhdudiyətlər nəzəriyyəsinin şərtlərini ödəyir. Topoloji məhdudiyətlər nəzəriyyəsinin tələblərinə görə, orta koordinasiya ədədi ( $Z$ ) və məhdudiyətlərin miqdarı ( $N_{co}$ )  $Z>2,4$ ,  $N_{co}>3$  şərtlərini ödəyirsə maddə “sərt gərginlikli” şüşə halına keçir. Bu halda qarşılıqlı əlaqəli olan məhdudiyətlərin sayəsində tədqiq olunan maddələrə məxsus lokal şüşəvari şəbəkə qeyri stabil olur. Bu halda zəif bucaq və rabitə məhdudiyətləri nisbətən güclü daxili sıxılma və gərilmələrlə müşahidə olunan məhdudiyətlərin yaranmasına səbəb olur. Nəzəriyyə göstərir ki, maddədə daxili gərginliklərin artması daha aşağı energetik hallara doğru relaksasiya proseslərini stimullaşdırmalı və nəticədə termodinamik baxımdan kristallaşmaya doğru meyillilik artmalıdır. Müəyyən olunmuşdur ki, “sərt gərginlikli” şüşə halına ( $Z>2,4$ ;  $N_{co}>3$ ) uyğun tərkiblərdə ( $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$ ,  $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$ ,  $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$ ,  $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ ,  $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ ) orta nizamın ölçüsü nisbətən artaraq  $L=25,37\div 33,74$  Å intervalında dəyişir.



	Z	R	Q1	$L=2*\eta/\Delta Q1$	$N_{co}=Z/2+2Z-3$	$N\alpha =Z/2$	$N\beta=2Z-3$	$f=(12-5Z)/6$	$\Delta Q1$
$Ge_4As_{14}Se_{82}$	2,22	2,83	1,41	22,2887	2,55	1,11	1,44	0,15	0,28191
$Ge_4As_{14}S_2Se_{80}$	2,22	2,83	1,40	23,4098	2,55	1,11	1,44	0,15	0,26848
$Ge_7As_{16}S_5Se_{72}$	2,30	2,03	1,37	22,9649	2,75	1,15	1,60	0,08	0,27359
$Ge_{10}As_{20}S_{10}Se_{60}$	2,40	1,40	1,25	24,2631	3,00	1,20	1,80	0,00	0,25896
$Ge_{17,5}As_{15}S_{15}Se_{52,5}$	2,50	1,17	1,12	25,3764	3,25	1,25	2,00	-0,08	0,24762
$Ge_{24}As_{19}S_{20}Se_{37}$	2,67	0,75	1,02	31,3845	3,68	1,34	2,34	-0,23	0,20020
$Ge_{25}As_{10}S_{25}Se_{40}$	2,60	1,00	1,10	26,5966	3,50	1,30	2,20	-0,17	0,23624
$Ge_{26}As_{18}S_{30}Se_{26}$	2,70	0,71	1,06	27,8473	3,75	1,35	2,40	-0,25	0,22563
$Ge_{33}As_{17}S_{35}Se_{15}$	2,83	0,55	0,99	33,7461	4,08	1,42	2,66	-0,36	0,18619

## XÜLASƏ

Topoloji məhdudiyətlər nəzəriyyəsinə (TMN) əsasən müəyyən olunmuşdur ki,  $Ge_{10}As_{20}S_{10}Se_{60}$  tərkibinə məxsus orta koordinasiya ədədi  $Z=2,4$  şərtini ödədiyindən “sıfırıncı” tezlikli rəqs modlarının xalkogenid şüşəvari şəbəkədəki payı  $f=0$ -a bərabər olur. Bu

isə nəzəriyyəyə görə “izostatik şüşə” halına uyğun gəlir. Göstərilmişdir ki, “sərt gərginlikli” şüşə halına ( $Z>2,4 N_{co}>3$ ) uyğun tərkiblərdə ( $Ge_{17,5}As_{15}S_{15}Se_{52,5}$ ,  $Ge_{24}As_{19}S_{20}Se_{37}$ ,  $Ge_{25}As_{10}S_{25}Se_{40}$ ,  $Ge_{26}As_{18}S_{30}Se_{26}$ ,  $Ge_{33}As_{17}S_{35}Se_{15}$ ) orta nizamin ölçüsü nisbətən artaraq  $L=25,37\div 33,74$  Å intervalında dəyişir.

- [1] Q. Liu, X. Zhao, F. Gan, et al.. Solid State Commun, , 2005, 134, 513.
- [2] J. Keirsse, C. Boussard-Pledel, O. Loreal, et al.. Vib, Spectrosc, 2003, 32, 23.
- [3] K. Michel, B. Bureau, C. Pouvreau, et al.. J. Non-Cryst. Solids 326&327, 2003, 434.
- [4] M. Frumar, B. Frumarova, T. Wagner. Amorphous and glassy semiconducting chalcogenides, Comprehensive Semiconductor Science and Technology 4. 2011, 206-210.
- [5] M. Ghayebloo, M. Tavoosi, M. Rezvani. Compositional Modification of Se-Ge-Sb Chalcogenide Glasses by addition of Arsenic Element, Journal of Infrared Physics and Technology 83, 2017, 62-67.
- [6] B. Ye, Sh. Dai, R. Wang, G. Tao, P. Zhang, Xu. Wang, X. Shen. Influence of the selenium content on thermo-mechanical and optical properties of Ge-Ga-Sb-S chalcogenide glasses, Journal of Infrared Physics and Technology 77, 2016, 21-26.
- [7] Y. Zhang, J.B. Chou, J. Li, H. Li, Q. Du, A. Yadav, S. Zhou, M.Y. Shalaginov, Z. Fang, H. Zhong, C. Roberts, P. Robinson, B. Bohlin, C. Rios, H. Lin, M. Kang, T. Gu, J. Warner, V. Liberman, K. Richardson, J. Hu. Broadband transparent optical phase change materials for high-performance nonvolatile photonics, Nat Commun, 10, 2019, 4279.
- [8] D. Maystre. Diffraction gratings: An amazing phenomenon, Comptes Rendus Physique, 14, 2013, 381-392.
- [9] X. Wang, X. Liu, X. Wang. Hydrogel diffraction grating as sensor: A tool for studying volume phase transition of thermo-responsive hydrogel, Sensors and Actuators B: Chemical, 204, 2014, 611-616.
- [10] H. Ferhati, F. Djeflal. New high performance ultraviolet (MSM) TiO2/glass photodetector based on diffraction grating for optoelectronic applications, Optic, 127, 2016, 7202-7209.
- [11] K. K. Das, M.S. Alam. Fiber- optic micro displacement sensor based on diffraction grating, Microw Opt Techn Lett, 32, 2002, 446-449.
- [12] K. Tanaka. Amorphous Chalcogenide Semiconductors and Related Materials/ K. Tanaka, K. Shimakawa. New York: Springer Science+Business Media LLC, 2011, 259 p.
- [13] R.I. Alekberov, S.I. Mekhtiyeva, A.I. Isayev, M.Fabian. The local structure of As-Se-S chalcogenide glasses studied by neutron diffraction and Raman scattering. J. Non - Crystalline Solids, 2017, 470(15), p.152-159.
- [14] S.R. Elliott. Medium-range structural order in covalent amorphous solids. Nature, -1991, 354,-p.445-452.
- [15] S.R. Elliott. Second sharp diffraction peak in the structure factor of binary covalent network glasses, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., 1995, vol. 51, p. 8599.
- [16] L. Tichy and H. Ticha. Mater. Lett. 21, 313, 1994.
- [17] J.C. Phillips, M.F. Thorpe. Constraint Theory, Vector Percolation and Glass Formation. Solid State Communications, 1985, 53(8), p.699-702.

**X-RAY DIFFRACTION SCATTERING IN Ge-As-Se-S CHALCOGENIDE GLASS SYSTEM**

Ge<sub>4</sub>As<sub>14</sub>Se<sub>82</sub>, Ge<sub>4</sub>As<sub>14</sub>S<sub>2</sub>Se<sub>80</sub>, Ge<sub>7</sub>As<sub>16</sub>S<sub>5</sub>Se<sub>72</sub>, Ge<sub>10</sub>As<sub>20</sub>S<sub>10</sub>Se<sub>60</sub>, Ge<sub>17,5</sub>As<sub>15</sub>S<sub>15</sub>Se<sub>52,5</sub>, Ge<sub>24</sub>As<sub>19</sub>S<sub>20</sub>Se<sub>37</sub>, Ge<sub>25</sub>As<sub>10</sub>S<sub>25</sub>Se<sub>40</sub>, Ge<sub>26</sub>As<sub>18</sub>S<sub>30</sub>Se<sub>26</sub>, Ge<sub>33</sub>As<sub>17</sub>S<sub>35</sub>Se<sub>15</sub> chalcogenide glass semiconductor (CGS) compositions are synthesized by the method rotary furnace and amorphousness their powder samples was approved by X-ray diffraction method. Based on the theory of topological constraints (TCT), it was determined that, since the average coordination number for Ge<sub>10</sub>As<sub>20</sub>S<sub>10</sub>Se<sub>60</sub> satisfies the condition  $Z = 2.4$ , the fraction of vibration modes with zero frequency in the chalcogenide glass is equal  $f = 0$ . According to theory this corresponds to "isostatic glass". It is shown that in the compositions (Ge<sub>17,5</sub>As<sub>15</sub>S<sub>15</sub>Se<sub>52,5</sub>, Ge<sub>24</sub>As<sub>19</sub>S<sub>20</sub>Se<sub>37</sub>, Ge<sub>25</sub>As<sub>10</sub>S<sub>25</sub>Se<sub>40</sub>, Ge<sub>26</sub>As<sub>18</sub>S<sub>30</sub>Se<sub>26</sub>, Ge<sub>33</sub>As<sub>17</sub>S<sub>35</sub>Se<sub>15</sub>) corresponding to the "rigid stress" glass ( $Z > 2,4$ ,  $N_{co} > 3$ ), the size of the average order increases relatively and varies in the range of  $L = 25.37 \div 33.74 \text{ \AA}$ .

**С.И. Мехтиева, Р.И. Алекберов, С.М. Маммадов**

**РЕНТГЕНОВСКОЕ ДИФРАКЦИОННОЕ РАССЕЯНИЕ В СИСТЕМЕ ХАЛЬКОГЕНИДНОГО СТЕКЛА Ge-As-Se-S**

Ge<sub>4</sub>As<sub>14</sub>Se<sub>82</sub>, Ge<sub>4</sub>As<sub>14</sub>S<sub>2</sub>Se<sub>80</sub>, Ge<sub>7</sub>As<sub>16</sub>S<sub>5</sub>Se<sub>72</sub>, Ge<sub>10</sub>As<sub>20</sub>S<sub>10</sub>Se<sub>60</sub>, Ge<sub>17,5</sub>As<sub>15</sub>S<sub>15</sub>Se<sub>52,5</sub>, Ge<sub>24</sub>As<sub>19</sub>S<sub>20</sub>Se<sub>37</sub>, Ge<sub>25</sub>As<sub>10</sub>S<sub>25</sub>Se<sub>40</sub>, Ge<sub>26</sub>As<sub>18</sub>S<sub>30</sub>Se<sub>26</sub>, Ge<sub>33</sub>As<sub>17</sub>S<sub>35</sub>Se<sub>15</sub> порошковые образцы халькогенидных полупроводниковых стекол синтезированы методом вращающейся печи. Аморфность образцов была подтверждена рентгеновским дифракционным методом. На основе теории топологических ограничений (ТТО) было определено, что, поскольку среднее координационное число Ge<sub>10</sub>As<sub>20</sub>S<sub>10</sub>Se<sub>60</sub> удовлетворяет условию  $Z=2,4$ , то доля колебательных мод с нулевой частотой равна нулю ( $f = 0$ ) в сетке халькогенидного стекла. Теоретически это соответствует «изостатическому стеклу». Показано, что в составах, соответствующих «жестко напряженному» стеклу ( $Z > 2,4$ ;  $N_{co} > 3$ ) (Ge<sub>17,5</sub>As<sub>15</sub>S<sub>15</sub>Se<sub>52,5</sub>, Ge<sub>24</sub>As<sub>19</sub>S<sub>20</sub>Se<sub>37</sub>, Ge<sub>25</sub>As<sub>10</sub>S<sub>25</sub>Se<sub>40</sub>, Ge<sub>26</sub>As<sub>18</sub>S<sub>30</sub>Se<sub>26</sub>, Ge<sub>33</sub>As<sub>17</sub>S<sub>35</sub>Se<sub>15</sub>), средний порядок относительно увеличивается и изменяется в диапазоне  $L=25,37 \div 33,74 \text{ \AA}$ .

*Qəbul olunma tarixi: 23.09.2021*

CuInZnSe<sub>3</sub> BİRLƏŞMƏSİNİN DIELEKTRİK XASSƏLƏRİ

S.İ. İBRAHİMOVA

Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,

Az 1143, Bakı, H.Cavid pr., 131

[sevinc.ibr.amea@gmail.com](mailto:sevinc.ibr.amea@gmail.com)

Təqdim olunan işdə CuInZnSe<sub>3</sub> birləşməsinin dielektik xassələri tədqiq edilmişdir. Tədqiqatlar  $T = 30-200^{\circ}\text{C}$  temperatur və  $f = 25 \text{ Hs}^{-1}$  MHzs tezlik intervallarında aparılmışdır. Göstərilən temperatur və tezlik intervallarında dielektrik sabitinin həqiqi və xəyali hissələri, dielektrik itgi bucağı, dielektrik nüfuzluğu kimi müxtəlif fiziki parametrlər təyin edilmişdir. İşdə dielektrik itgi bucağı, elektrik keçiriciliyi və dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələri elektrik sahəsinin tezliyinin və zamanın funksiyası kimi öyrənilmişdir.

**Açar sözlər:** CuInZnSe<sub>3</sub>, dielektrik nüfuzluğu, dielektrik itkisi.

**PACS:** 538.91

## 1. GİRİŞ

Məlumdur ki, yarımkeçirici xassələrə malik olan halkogenidlər müxtəlif sahələrdə geniş tətbiq imkanları olan funksional materiallardır [1,2]. Ona görə də, onların həm quruluş xüsusiyyətlərinin həm də müxtəlif fiziki xassələrinin tədqiq edilməsi, onların tətbiq imkanlarını daha da artırır [3]. Belə tərkiblərdən biri də CuInZnSe<sub>3</sub> birləşməsidir.

Rentgen difraksiyası metodu ilə aparılmış quruluş tədqiqatları nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, CuInZnSe<sub>3</sub> birləşməsinin kristal quruluşu F-43m (216) fəza qruplu kubik sinqoniyalı kristal quruluşa uyğun gəlir.  $T = 30-900^{\circ}\text{C}$  temperatur intervalında aparılmış termik analizlər nəticəsində sistemin termodinamik parametrləri tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, 492, 596 və 753°C temperaturalarda termik keçidlər baş vermişdir. Yüksək temperaturlar oblastında quruluş fəza keçidi baş verməmiş, kubik simmetriyalı kristal quruluş saxlanılmışdır [4].

Mürəkkəb quruluşlu birləşmələrlə müqayisədə bu tip birləşmələrdə həm elektron, həm də ion tip keçiriciliyin öyrənilməsi son dərəcə aktualdır. Məlum olduğu kimi ion tip keçiricilik adətən qeyri-nizamlı materiallara aiddirlər. Bu tip materiallarda isə adətən elektron və ya dəşik keçiricilik üstünlük təşkil edir. Ümumi yarımadada bu tip materialların elektronikada tətbiqi zamanı bunların elektrik və dielektrik xüsusiyyətlərini öncədən qiymətləndirmək çox aktual bir məsələdir. Bunun üçün isə ən unikal metodlardan biri də dielektrik spektroskopiyaya üsuldür. Bu üsulla materialın dielektrik nüfuzluğu, elektrik keçiriciliyi və dielektrik itkilərini asanlıqla qiymətləndirmək olur.

CuInZnSe<sub>3</sub> birləşməsinin quruluş və termik xassələrinin geniş tədqiq olunmasına baxmayaraq, dielektrik xassələri tədqiq edilməmişdir. Bu işdə otaq temperaturundan yuxarı temperaturalarda ( $30^{\circ}\text{C} \leq T \leq 200^{\circ}\text{C}$ ) dielektrik xassələri öyrənilmişdir.

## 2. TƏCRÜBƏ

Tədqiqat obyektini Cu, Zn, In, Se elementlərindən sintez edilmişdir. Stexiometrik miqdarında götürülmüş elementlər  $10^{-4}$  vakuum alınmış kvarts ampulada yerləşdirilmişdir. İlk mərhələdə  $T=327^{\circ}\text{C}$  temperaturda 1 saat qızdırılmışdır. Sonra saatda  $50^{\circ}\text{C}$  sürəti ilə

$T=1000^{\circ}\text{C}$ -ə temperatura qədər qızdırılmışdır. Bu temperaturda 1 saat saxlanıldıqdan sonra temperatur  $T=477^{\circ}\text{C}$ -ə salınmışdır. Nümunənin homogenləşdirilməsi məqsədi ilə 15 sutka bu temperaturda saxlanılmışdır.

Təcrübələrdə istifadə olunan CuInZnSe<sub>3</sub> birləşməsinin tədqiqat nümunəsinin geometrik parametrləri  $5 \times 5 \times 6 \text{ mm}^3$  ölçülərində olmuşdur. Bu materialın dielektrik xassələrinin tədqiqi zamanı, elektrik kontaktı olaraq gümüş elektrodlarından istifadə olunmuşdur. Dielektrik xassələrinin kompleks şəkildə tədqiqi MNIPI E7-21 impedance analyzer cihazında aparılmışdır. Təcrübələr  $20-10^6 \text{ Hz}$  tezlik və  $30-200^{\circ}\text{C}$  temperatur intervallarında aparılmışdır.

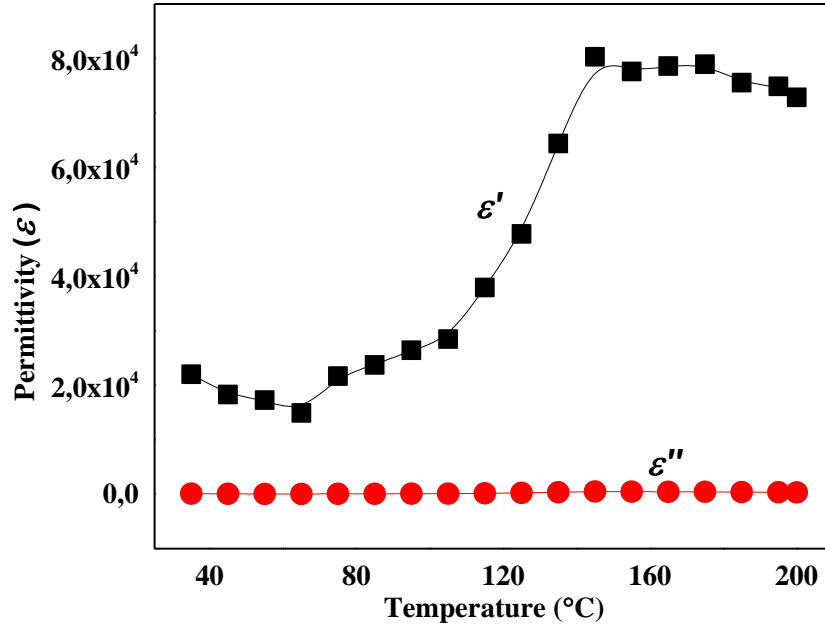
## 3. NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

CuInZnSe<sub>3</sub> birləşməsinin dielektrik nüfuzluğu  $f=25 \text{ Hs}^{-1}$  MHzs tezlik və  $T=30-200^{\circ}\text{C}$  temperatur intervalında müqayisəli nəzərdən keçirilmişdir. Alınmış asılılıqlar şəkil 1 və şəkil 2-də göstərilmişdir.

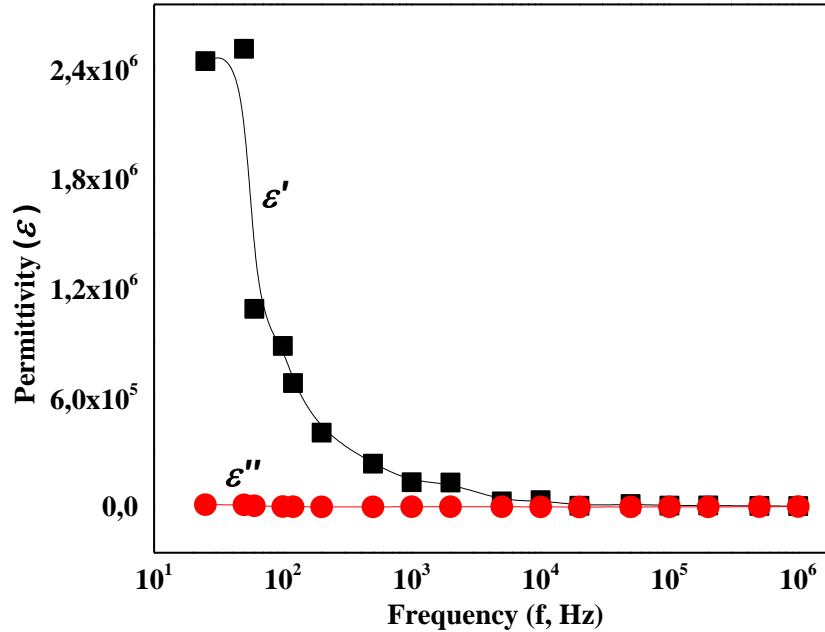
İlkin yarımadada temperaturun  $T < 60^{\circ}\text{C}$  intervalında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsində müşahidə olunan azalma nümunə daxilində olan əlavə qarışıqlar və ya radikalqlarla əlaqədar ola bilər (şəkil 1). Belə ki, temperaturun qiyməti yüksəldikcə sözügedən radikalqlar və ya OH qrupları nümunəni tərk edir və bunun nəticəsində  $T < 60^{\circ}\text{C}$  temperatur intervalında dielektrik nüfuzluğunda azalma müşahidə olunur. Digər tərəfdən, temperaturun  $T=60^{\circ}\text{C}$  qiymətindən başlayaraq dielektrik nüfuzluğunun ədədi qiymətində artma müşahidə olunur. Eyni zamanda, temperaturun  $T=100^{\circ}\text{C}$  qiymətindən sonra dielektrik nüfuzluğunun ədədi qiymətində kəskin artım müşahidə olunur. Kəskin artımı material daxilində olan adsorbsiya olunan kənar qatışıqların nümunəni tam tərk etməsi ilə əlaqələndirmək olar. Lakin temperaturun  $T=150^{\circ}\text{C}$  qiymətindən başlayaraq yavaş sürətlə azalma müşahidə olunur. Digər tərəfdən, CuInZnSe<sub>3</sub> birləşməsinin dielektrik nüfuzluğunun tezlik asılılığında tezliyin təsiri ilə həqiqi hissədə azalma müşahidə olunur (şəkil 2). Tezliyin təqribən  $f = 10^4 \text{ Hz}$  qiymətindən sonra dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsində stabiləşmə müşahidə edilmişdir. Məlumdur ki, elektrik sahəsinin tezliyinin artması ilə material daxilində daha dərin səviyyələrdə olan yükdaşıyıcılar fəallaşmağa başlayır. Məhz bunun nəticəsidir ki, tezliyin

$f < 10^4$  Hz intervalında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsi tezliklə mütənasib olaraq azalır. Lakin  $f > 10^4$  Hz

tezlik intervalında  $\text{CuInZnSe}_3$  birləşməsində doyma halı müşahidə olunmuşdur.



Şəkil 1.  $\text{CuInZnSe}_3$  birləşməsinin dielektrik nüfuzluğunun temperatur asılılığı.



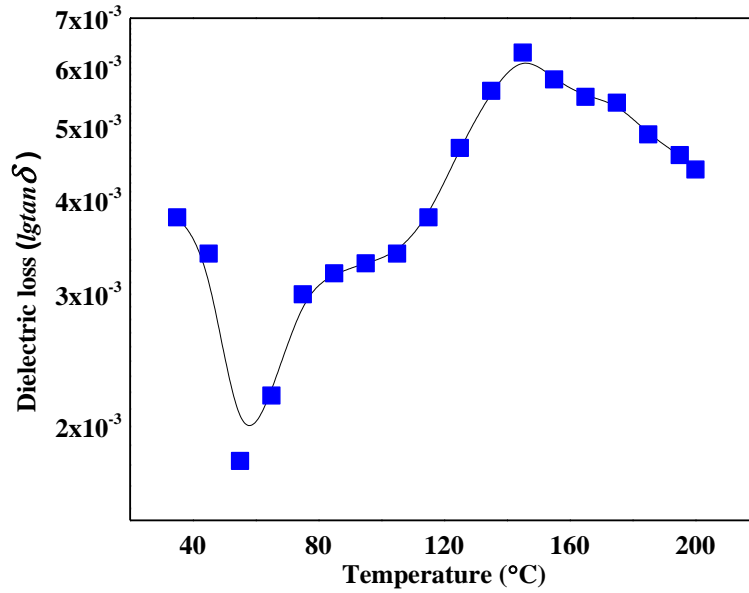
Şəkil 2.  $\text{CuInZnSe}_3$  birləşməsinin dielektrik nüfuzluğunun tezlik asılılığı.

Dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsində temperatur və tezliyin təsiri ilə hər hansı dəyişiklik müşahidə olunmamışdır. Məlumdur ki, adətən dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsi material daxilində olan itkiləri xarakterizə edir. Belə olan halda, dielektrik itkilərini nəzərdən keçirmək daha əlverişlidir. Şəkil 3 və şəkil 4-də  $\text{CuInZnSe}_3$  birləşməsinin dielektrik itkilərinin temperatur və tezlik asılılıqları verilmişdir.

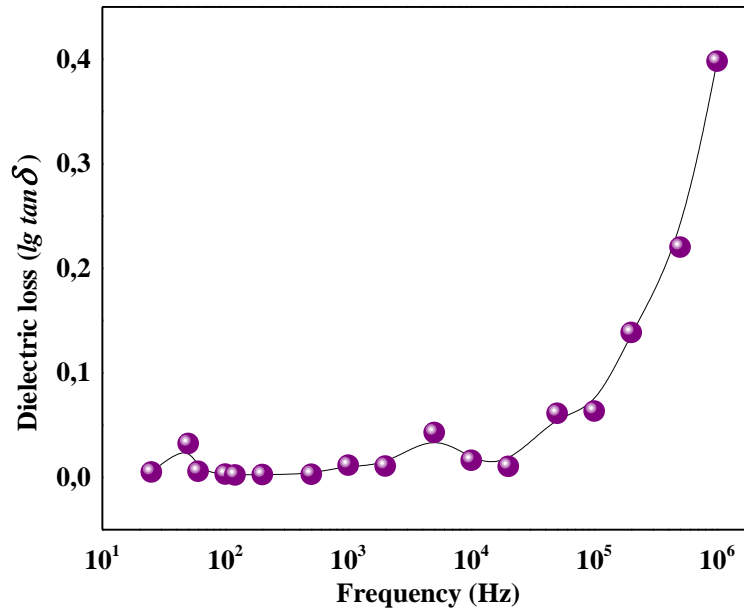
$\text{CuInZnSe}_3$  birləşməsində dielektrik itkilərinin tezlik asılılıqlarından görüldüyü kimi, tezliyin  $f < 10^4$  Hz intervalında, demək olar ki, itki sabitdir və çox kiçik qiymətə malikdir (şəkil 4). Lakin  $f > 10^4$  Hz tezlik intervalında dielektrik itkiləri kəskin artmağa başlayır.

Elektrik sahəsinin tezliyinin təsiri ilə daha dərin səviyələrdə olan yükdaşıyıcıların fəallaşması, itkilərin də artmasına səbəb olur [5, 6]. Digər tərəfdən, dielektrik itkilərinin temperatur asılılığında dielektrik nüfuzluğuna analogi hal müşahidə olunur (şəkil 3). Temperaturun  $T = 150^\circ\text{C}$  qiymətinə qədər baş verən proseslər əlavə radikallar və ya OH qrupları ilə analogi qaydada izah oluna bilər. Lakin temperaturun  $T > 150^\circ\text{C}$  intervalında prosesi analogi qaydalarla izah etmək düzgün deyil. Bu interval stabilləşmə oblası hesab edilir və xaricdən daxil olan enerji əlavə yükdaşıyıcıları fəallaşdırma bilmir.





Şəkil 3. CuInZnSe<sub>3</sub> birləşməsinin dielektrik itkilərinin tezlik asılılığı.



Şəkil 4. CuInZnSe<sub>3</sub> birləşməsinin dielektrik itkilərinin tezlik asılılığı.

#### 4. NƏTİCƏ

Aparılan tədqiqatlardan məlum olmuşdur ki, elektrik sahəsinin tezliyinin artması ilə material daxilində daha dərin səviyyələrdə olan yükdaşıyıcılar fəallaşmağa başlayır. Belə ki, tezliyin  $f < 10^4$  Hz intervalında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsi tezliklə mütənasib olaraq azalır. Eyni zamanda  $f > 10^4$  Hz tezlik intervalında CuInZnSe<sub>3</sub> birləşməsində doyma halı müşahidə olunmuşdur. Digər tərəfdən,  $f < 10^4$  Hz intervalında demək olar ki, itki sabitdir və çox kiçik qiymətə malikdir. Lakin  $f > 10^4$  Hz tezlik intervalında dielektrik itkiləri kəskin artmağa başlayır ki, bu da elektrik sahəsinin tez-

liyinin təsiri ilə daha dərin səviyyələrdə olan yükdaşıyıcıların fəallaşması ilə izah edilmişdir. CuInZnSe<sub>3</sub> birləşməsində temperaturun 150°C qiymətinə qədər baş verən proseslər əlavə radikal və ya OH qrupları ilə izah edilmişdir. Temperaturun  $T > 150^\circ\text{C}$  intervalında CuInZnSe<sub>3</sub> birləşməsində doyma halı müşahidə olunmuşdur. Məlum olmuşdur ki,  $60^\circ\text{C} < T < 150^\circ\text{C}$  temperatur intervalında material daxilində olan passiv yükdaşıyıcılar xaricdən daxil olan enerji hesabına fəallaşır. Temperaturun  $220^\circ\text{C} > T > 150^\circ\text{C}$  intervalında artıq doyma halı müşahidə olunmuşdur və xaricdən daxil olan enerji hesabına əlavə yükdaşıyıcıların fəallaşması baş verməmişdir.

[1] I.R. Amiraslanov, N.A. Alieva, G.G. Guseinov. Crystallography Reports, 2016, 61, 7, p.1047-1050.

[2] Y.G. Asadov, Y.I. Aliyev, A.O. Dashdemirov, S.H. Jabarov, T.G. Naghiyev. Modern Physics Letters B, 2020, 34, p.2150018.

**S.I. İBRANİMOVA**

- [3] *Y.I. Aliyev, Y.G. Asadov, L.B. Rustamova, A.O. Dashdemirov, N.A. Ismayilova, A.A. Ayubov, S.H. Jabarov.* International Journal of Modern Physics B, 2020, 34, 19, P.2050180.
- [4] *С.И. Ибрагимова, С.Г. Джабаров, Г.Г. Гусейнов, Х.М. Гулиева, М.Н. Мирзаев, Ю.И. Алыев.* Физика и техника полупроводников, 2021, 55, 11, С.1011-1014.
- [5] *S.F. Samadov, O.A. Samedov, O.Z. Alekperov, M. Kulik, A.I. Najafov, N.M. Mehdiyev, E.M. Huseynov,* International Journal of Modern Physics B, 2019, 33, 27, p.1950320.
- [6] *E.M. Huseynov.* Solid State Sciences, 2018, 84, p.44-50.

**S.I. Ibragimova**

**DIELECTRIC PROPERTIES OF CuInZnSe<sub>3</sub> COMPOUND**

The dielectric properties of the CuInZnSe<sub>3</sub> compound were studied in the presented work. The studies were performed at temperatures  $T = 30-200^{\circ}\text{C}$  and frequency  $f = 25 \text{ Hz} - 1 \text{ MHz}$ . Various physical parameters such as real and imaginary parts of the dielectric constant, dielectric loss angle, dielectric constant have been determined in the specified temperature and frequency ranges. In this work, the dielectric loss angle, the electrical conductivity, and the real and imaginary parts of the dielectric constant are studied as a function of the frequency and time of the electric field.

**С.И. Ибрагимова**

**ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЯ CuInZnSe<sub>3</sub>**

В представленной работе исследованы диэлектрические свойства соединения CuInZnSe<sub>3</sub>. Исследования проводились при температуре  $T = 30-200^{\circ}\text{C}$  в частотном интервале  $f = 25 \text{ Гц} - 1 \text{ МГц}$ . В указанных диапазонах температур и частот были определены угол диэлектрических потерь, электропроводность, а также действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости функции частоты и времени электрического поля.

*Qəbul olunma tarixi: 13.09.2021*

## $A^{II}B_2^{III}C_4^{VI}$ (f.qr. $S_4^2$ ) TİP BİRLƏŞMƏLƏRDƏ ATOMLARARASI RABİTƏNİN GÜC SABİTLƏRİ

**İ.Ə. MƏMMƏDOVA**

*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu, Bakı 1143,*

*H.Cavid pr. 131, Azərbaycan*

*e-mail: irada\_mamedova@yahoo.com*

$CdGa_2Te_4$  və  $ZnGa_2Se_4$  birləşmələrində güc sabitləri modeli əsasında atomlararası rabitənin güc sabitləri hesablanmışdır. Dinamik matrisə ən yaxın qonşuların qarşılıqlı təsirini, eləcə də anion altqəfəsinin atomlarının qarşılıqlı təsirini nəzərə alan yeddi güc sabiti daxil edilmişdir. Alınmış nəticələr  $CdGa_2S_4$ ,  $CdGa_2Se_4$ -nin nəticələrilə müqayisəli şəkildə təhlil edilmişdir.

**Acar sözlər:** güc sabitləri, rəqsi hərəkət tezlikləri,  $CdGa_2Te_4$ ,  $ZnGa_2Se_4$

**PACS:** 539.24/27

### GİRİŞ

$S_4^2$  fəza qrupunda kristallaşan  $A^{II}B_2^{III}C_4^{VI}$  (A-Zn, Cd; B-Al, In, Ga; C-S, Se, Te) tipli yarımkəcirici birləşmələr halkopirit və sfalerit quruluşlu birləşmələrin kristalkimyəvi və izoelektron analoglarıdır. Halkopirit quruluşundan fərqli olaraq tioqallat quruluşu (f.qr.  $S_4^2$ ) nizamlı kation vakansiyasına malikdir. Bu birləşmələr yarımkəciricilər cihazqayırmasında böyük maraq kəsb edən bir sıra xüsusiyyətlərə (ikili şüasinmə, parlaq fotoluminensensiya, fotohəssaslıq və s.) malik olduğuna görə, onların fiziki xassələrinin hərtərəfli tədqiqi böyük maraq kəsb edir. Bu baxımdan fundamental xarakteristikaların (zona quruluşu, rəqsi spektrlər, qəfəs dinamikası və s.) tədqiqi xüsusi yer tutur. Belə ki, istilik tutumu, istilikkeçiriciliyi, optik xassələrin izahında, zona quruluşunun, termodinamik parametrlərin hesablanmasında və s. bu xarakteristikalar çox əhəmiyyətlidir. Yuxarıda göstərilənlərə əsaslanaraq, hazırkı işdə  $CdGa_2Te_4$  və  $ZnGa_2Se_4$ -nin qəfəs dinamikası hesablamalarının nəticələri təqdim olunmuşdur. Alınmış nəticələr  $CdGa_2Se_4$ ,  $CdGa_2S_4$  birləşmələri ilə müqayisə olunaraq müzakirə edilmişdir.

$A^{II}B_2^{III}C_4^{VI}$  ( $CdGa_2S_4$  və  $CdGa_2Se_4$ ) birləşmələrinin qəfəs dinamikası ilk dəfə olaraq [1]-də hesablanmışdır. Hesablamalar üçün Kitting modelini seçilmişdir [2]. Halkopirit ( $A^{II}B_2^{III}C_4^{VI}$  -  $AgGaS_2$ ,  $AgGaSe_2$ ) və tioqallat ( $A^{II}B_2^{III}C_4^{VI}$  -  $CdGa_2S_4$  və  $CdGa_2Se_4$ ) quruluşlu birləşmələrin kristalkimyəvi oxşarlığını nəzərə alaraq hesablamalarda  $B^{III}$  -  $C^{VI}$  atomlararası rabitənin güc sabitləri  $AgGaS_2$ ,  $AgGaSe_2$ -də olduğu kimi,  $A^{II}$ - $C^{VI}$ ,  $V$ - $C^{VI}$  atomlararası rabitələrin güc sabitləri isə təcrübi tezliklərə uyğun olaraq ən kiçik kvadratlar metodu ilə təyin olunmuşdur. Uzlaşdırma (fitting) üçün az sayda tezlikdən (bir A simmetriyalı mod, iki B və iki E simmetriyalı mod) istifadə olunmuşdur, bu isə atomlararası rabitənin güc sabitlərinin dəqiq hesablanması üçün kifayət deyildir. Bunu vurğulayaraq [1]-in müəllifləri qeyd edirlər ki, təcrübə ilə uzlaşmanın alınması üçün daha təkmil modellərə ehtiyac duyulur.

Yuxarıdakıları nəzərə alaraq  $CdGa_2Te_4$  və  $ZnGa_2Se_4$ -nin qəfəs dinamikasının hesablanması üçün [3]-dəki güc sabitləri modeli tətbiq edilmişdir. Bu modeldən  $CdGa_2S_4$  və  $CdGa_2Se_4$ -nin qəfəs dinamikasının hesablanmasında istifadə edilmişdir.

### MÜZAKİRƏ

Şəkil 1-də  $S_4^2$  fəza qrupunda kristallaşan birləşmələrin kristal qəfəsi (a) və Brillüen zonası (b) təsvir edilmişdir.  $CdGa_2Te_4$ ,  $ZnGa_2Se_4$ -nin elementar özlərində 7 atom vardır. Atomların koordinatları belədir:  $A(000)$ ,  $B_1(a/2, a/2, 0)$ ,  $B_2(0, a/2, c/2)$ ,  $C_1(xyz)$ ,  $C_2(x\bar{y}z)$ ,  $C_3(xyz)$ ,  $C_4(x\bar{y}z)$ .

Kombinasion səpilmə spektri 21 budaqdan ibarətdir və aşağıdakı şəkildə ifadə olunur.

$$\Gamma(\text{rəqs}) = 3A(KS) + 6B(\dot{I}Q, KS) + 6E(\dot{I}Q, KS)$$

B simmetriyalı modlar infraqırmızı udulma spektrlərində  $\vec{E}$ -nin C tetraqonal oxla paralel polyarizasiyasında, E simmetriyalı modlar isə  $\vec{E}$ -nin C oxuna perpendikulyar polyarizasiyasında müşahidə olunur. Bütün A, B və E modlar işıqın kombinasiyalı səpilmə spektrində icazə veriləndir. Bir B simmetriyalı mod və bir ikiqat cırlaşmış E simmetriyalı mod akustik modlara aiddir.

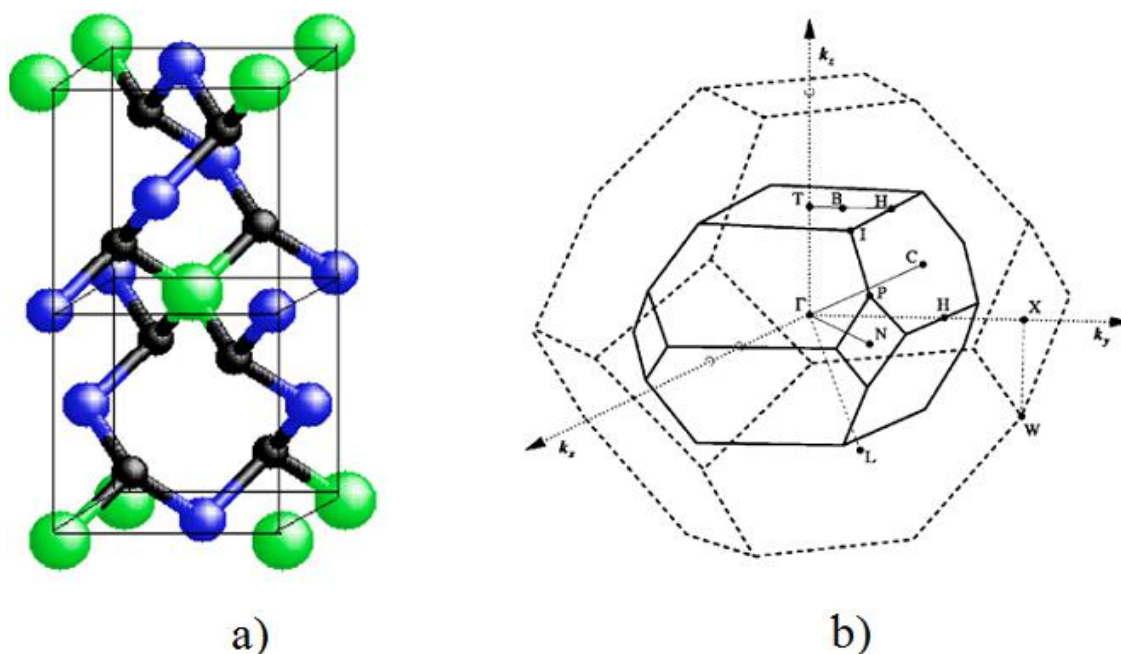
Dinamik matrisin elementlərinin tərtib edilməsi üçün yaxın qonşu atomlararası qarşılıqlı  $f_1(A^{II}-C^{VI})$ ,  $f_2(B^{III}_1-C^{VI})$ ,  $f_3(B^{III}_2-C^{VI})$  təsiri, eləcə də kation  $f_4(A^{II}-B^{III}_1)$ ,  $f_5(A^{II}-B^{III}_2)$ ,  $f_6(B^{III}_1-B^{III}_2)$  və anion  $f_7(C-C)$  altqəfəsin atomlararası qarşılıqlı təsiri nəzərə alan yeddi güc sabiti ( $f_n \neq 7$ ) daxil edilmişdir. Güc sabitləri  $F = \sum(\omega_i^{exp} - \omega_i(f_m))^2$  funksiyasının minimumuna uyğun gələn dəyişənlər kimi qəbul edilmişdir. Minimumun axtarılması coxdəyişənli funksiyaların minimumlaşdırılması standart proqramı üzrə ən kiçik kvadratlar metodu ilə həyata keçirilmişdir. Eksperimental tezliklər kimi  $B(TO)$  və  $E(TO)$  simmetriyalı tezliklərin qiymətlərindən istifadə edilmişdir [5].

Kristal qəfəsin atomlarının  $\omega$  rəqsi tezlikləri atomlararası  $f$  qarşılıqlı təsirlə və rəqsi hərəkətdə olan dipolların  $\mu$  gətirilmiş kütlələri ilə  $\omega^2 = \frac{f}{\mu}$  kimi bağlı olduğundan, elementar özlərdə müxtəlif kütləli atomları olan iki müxtəlif birləşmədə uyğun tezliklərinin nisbəti rəqsi hərəkətdə olan dipolların gətirilmiş kütlələri nisbətinin kvadrat kökünə bərabər olmalıdır. A simmetriyalı modlar anion altqəfəsinin atomlarının yerdəyişməsi ilə bağlı olduğundan,  $CdGa_2Te_4$ ,  $ZnGa_2Se_4$ -də bu

modların hesablanması üçün  $\text{CdGa}_2\text{Se}_4$ -nin anion alt-qəfəsinin atomlarının götürülmüş kütlələrindən istifadə edilmişdir.

Cədvəl 1-də tezliklərin təcrübi ( $\omega_{\text{təcr.}}$ ) və nəzəri ( $\omega_{\text{nəz.}}$ ) qiymətləri verilmişdir. Atomlararası rabitənin güc sabitlərinin qiyməti cədvəl 2-də verilmişdir. Cədvəldə həmçinin  $\text{CdGa}_2\text{S}_4$ ,  $\text{CdGa}_2\text{Se}_4$  -nin güc sabitləri göstərilmişdir. Göründüyü kimi,  $A^{\text{II}}B_2^{\text{III}}C_4^{\text{VI}}$  birləşmələrinin  $f_1(A^{\text{II}}-C^{\text{VI}})$  güc sabitlərinin qiyməti  $f_2(B^{\text{III}}-C^{\text{VI}})$  atomlararası rabitənin güc sabitlərindən xeyli böyükdür. Sonuncu onu göstərir ki, kadmium tetraedrlərində kimyəvi rabitənin təbiəti qallium tetraedrlərinə nisbətən daha çox kovalentdir.  $\text{ZnGa}_2\text{Se}_4$ -də də  $\text{CdGa}_2\text{S}_4$ ,  $\text{CdGa}_2\text{Se}_4$  və  $\text{CdGa}_2\text{Te}_4$ -da olduğu kimi, Zn-Se rabitə-

sinin güc sabitləri Ga-Se-ə nisbətən xeyli böyükdür, lakin Cd-Se-dən kiçikdir. Bu isə Zn (64,41) atomunun kütləsinin Cd (112,42) atomunun kütləsindən 2 dəfə az olması ilə bağlıdır. Qeyd etmək lazımdır ki, hesablamalarda 6 güc sabitindən istifadə edilmişdir. Bu halda təcrübə və hesablama tezlikləri arasında uyğunsuzluq 20%-dən çox idi. Güc sabitlərindən 7-i ( $f_n=7$ ) nəzərə alındıqda uyğunsuzluq 12% təşkil edirdi. Beləliklə, kadmium tetraedrlərində kovalent rabitə, qallium tetraedrlərində isə ion tipli rabitə üstünlük təşkil edir. Ona görə də bu nəticəyə gəlmək olar ki,  $S_4^2$  (tioqallat) fəza qrupunda kristallaşan  $A^{\text{II}}B_2^{\text{III}}C_4^{\text{VI}}$  birləşmələrində ion-kovalent tipli rabitə mövcuddur. Bu, [7]-dəki nəticələrə uyğun gəlir.



Şəkil 1.  $S_4^2$  fəza qrupunda kristallaşan  $A^{\text{II}}B_2^{\text{III}}C_4^{\text{VI}}$  tipli birləşmələrin kristal qəfəsi (a) və Brillüen zonası (b)

Cədvəl 1.  $\text{CdGa}_2\text{Te}_4$ ,  $\text{ZnGa}_2\text{Se}_4$ ,  $\text{CdGa}_2\text{Se}_4$ ,  $\text{CdGa}_2\text{S}_4$ -də tezliklərin eksperimental və nəzəri qiymətləri

tezlik simmetriyası	$\text{CdGa}_2\text{Te}_4$		$\text{ZnGa}_2\text{Se}_4$		$\text{CdGa}_2\text{Se}_4$ [4]		$\text{CdGa}_2\text{S}_4$ [4]	
	$\Omega$ (təc.) [5]	$\omega$ (hes.) (bu iş.)	$\omega$ (təcr.) [6]	$\omega$ (hes.) (bu iş.)	$\Omega$ təc)	$\Omega$ (hes.)	$\Omega$ (təc.)	$\Omega$ (hes.)
A	210	190,4	194	202	266	231,3	360	335,7
	150	170,5	159,3	176	189,9	198,3	314	276,8
	120	134,6	135	145	140	156,4	221	270,8
B	232	245,1	278/255	247	254	266,6	366	359
	217	230,9	246/230	-	220	226,6	326	303,4
	192	194,0	200/192	174	194	197,3	256	251,6
	93	123,2	136/126	131	176	128,4	242	160,9
	53	108,3	81/79	77	112	100,9	166	119,8
E	223	233,4	275/250	236	250	258,4	364	352,5
	210	196,1	245/236	195	236	216	332	290,8
	197	163,6	200/190	150	174	171	240	214
	169	101,5		110	104	100	120	131,9
	130	53,5	82/80	75	67,6	59	82	82,4



CdGa<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>, ZnGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>, CdGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>, CdGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>-də atomlararası rabitənin güc sabitlərinin eksperimental və nəzəri qiymətləri (10<sup>4</sup> dn/sm<sup>2</sup> vahidlərində)

atomlararası rab. güc sabitləri	CdGa <sub>2</sub> Te <sub>4</sub> (bu iş.)	ZnGa <sub>2</sub> Se <sub>4</sub> ( bu iş .)	CdGa <sub>2</sub> Se <sub>4</sub> [4]	CdGa <sub>2</sub> S <sub>4</sub> [4]
$f_1 (A^{II}-C^{VI})$	13,71	9,23	13,9	14,28
$f_2 (B_1^{III}-C^{VI})$	7,89	4,05	6,38	6,28
$f_3 ( B_2^{III}-C^{VI})$	5,61	4,01	7,89	7,89
$f_4 (A^{II}-B_1^{III})$	-1,68	-0,08	-10,6	-0,6
$f_5 (A^{II}-B_2^{III})$	2,99	0,38	1,68	3,0
$f_6 (B_1^{III}-B_2^{III})$	1,87	3,92	1,03	3,0
$f_7 (C^{VI}- C^{VI})$	1,77	1,29	1,37	0,74

## NƏTİCƏ

Güc sabitləri modeli çərçivəsində CdGa<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>, ZnGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub> birləşmələrində atomlararası rabitənin güc sabitləri hesablanmışdır. Alınmış nəticələr CdGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>, CdGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>-in məlum nəticələri ilə müqayisə olunmuşdur. Atomlararası rabitənin güc sabitlərinin təhlili göstərdi ki, kadmium tetraedrlərində kimyəvi rabitənin təbiəti gallium tetraedrlərinə nisbətən daha çox kovalent-

dir, yəni  $A^{II}B_2^{III}C_4^{VI}$  birləşmələrində ion-kovalent rabitə mövcuddur.

## MİNNƏTDARLIQ

Təqdim olunan iş Azərbaycan Respublikası Prezidenti yanında Elmin İnkişafı Fondu tərəfindən maliyyələşdirilmişdir- Grant № EIF-BGM-3-BRFTF-2+/2017-15/02/1

- |  |  |
|--|--|
| [1] <i>B.Г. Тютерева, С.И. Скачков, Л.А. Брыснева.</i> ФТТ, 1982.21, N8, с. 2236-2241.                   | [5] <i>P.M. Nicolich and S. M. Stojkovic</i> J. Phys. C: Sol. State Physics, 1981, 14, N19, L551-555.  |
| [2] <i>P.N. Keating.</i> Phys. Rev., 1966, 145, N2, p. 637-646.  | [6] <i>Т.Г. Керимова, И.А. Мамедова, Н.А. Абдуллаев, С.Г. Асадуллаева, З.И. Бадалова.</i> Физика и техника полупроводников, 2014, 48, N7, 894-897.                 |
| [3] <i>Е. Вильсон, Д. Дешиус, П. Лросс.</i> Теория колебательных спектров молекул- Мир, ИЛ, 1960, 327 с. | [7] <i>Г.Г. Гусейнов, Т.Г. Керимова, Р.Х. Нани.</i> Уточнение кристаллической структуры CdGa <sub>2</sub> S <sub>4</sub> , Известия АН Азерб. ССР, 1980, N4, 59-61 |
| [4] <i>Т.Г. Керимова, А.Ш. Хидиров, Э.Ю. Салаев, В.Я. Штейншрайбер.</i> ФТТ, 1985, 27, N6, p. 1570-1572  |  |

I.A. Mamedova

## FORCE CONSTANTS OF INTERATOMIC BONDS IN $A^{II}B_2^{III}C_4^{VI}$ TYPE COMPOUNDS

In the frame of force constants model there have been calculated force constants of the interatomic bonds for CdGa<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> and ZnGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>. Seven force constants have been entered into a dynamical matrix, considering interaction both the nearest neighbors, and interaction of atoms of anion sub lattice. The obtained results were analyses together with data for CdGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>, CdGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>. Conclusions are made on the nature of chemical bond.

И.А. Мамедова

## СИЛОВЫЕ КОНСТАНТЫ МЕЖАТОМНЫХ СВЯЗЕЙ В СОЕДИНЕНИЯХ ТИПА $A^{II}B_2^{III}C_4^{VI}$ (гр.гр. $S_4^2$ )

В модели силовых постоянных рассчитаны силовые константы межатомных связей для CdGa<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> и ZnGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>. В динамическую матрицу были введены семь силовых констант, учитывающих взаимодействие как ближайших соседей, так и взаимодействие атомов анионной подрешетки. Полученные результаты анализированы совместно с данными для в CdGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>, CdGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>. Сделаны выводы о природе химической связи.

Qəbul olunma tarixi: 08.10.2021

## CuInSe<sub>2</sub> MONOKRİSTALININ SƏTHİNDƏ FORMALAŞAN MƏSAMƏLİ NANOQURULUŞLARIN ONUN ELEKTRİK VƏ OPTİK XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ

İ. QASIMOĞLU, Q.S. MEHDİYEV, Z. QADİROĞLU, İ.A. MƏMMƏDOVA,  
İ.Q. NƏSİBOV, C.T. HÜSEYNOV

*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu*

*Az 1143 Bakı şəhəri, H.Cavid pr.131*

E-mail: [gasimoğlu@yahoo.com](mailto:gasimoğlu@yahoo.com)

Tədqiqat işində biroxlı kristallar qrupundan olan CuInSe<sub>2</sub> monokristalının səthində texnoloji proses zamanı formalaşan məsaməli nanoquruluşların əsas maddə ilə qarşılıqlı təsirinə xassələri öyrənilib. Alınması sadə, formalaşma rejimi idarə olunan olduğundan, bu maddələr foton mühitlər üçün yararlı hesab olunur [1].

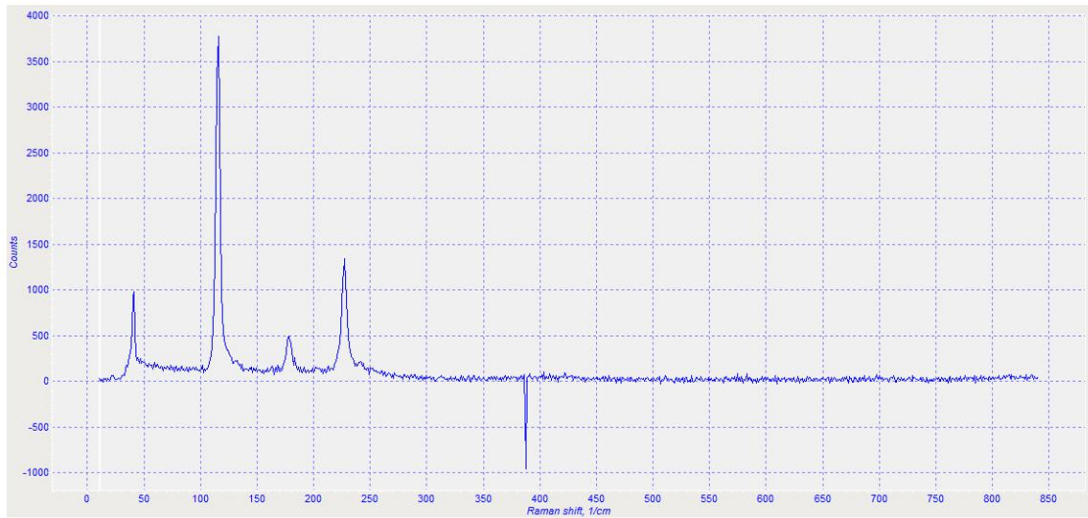
**Açar sözlər:** Xalkopirit, məsaməli quruluş, foton mühitlər.

**Pacs:** 61.80.Ed.

### GİRİŞ

CuInSe<sub>2</sub> monokristal A<sup>1</sup>B<sup>III</sup>C<sup>VI</sup><sub>2</sub> yarımkəçirici birləşmələr qrupuna daxildir, xalkopirit strukturunda kristallaşır, fəza simmetriya qrupu 42m-dir. Obyektin bağlı zonasının enerjisi günəş elementləri üçün optimal olan qiymətə yaxındır ( $E_g=1,04\text{ev}$ ,  $T=300\text{K}$ ). Bu birləşmə yarımkəçirici cihazqayırmada, xüsusilə fotoele-

mentlərin, işıq qeydedici cihazların hazırlanmasında böyük üstünlüyə malikdir. Texniki məqsədlər üçün istifadəyə yararlıdır [2]. Maddə Bridjmen-Stokbarqer üsulu ilə alınmışdır. Keçiriciliyin işarəsi elektrik hərəkət qüvvəsini ölçmək yolu ilə təyin olunmuşdur, müsbətdir yəni *p*-tipdir. Müqaviməti otaq temperaturunda  $R=0,5\text{ kOm}$ -dur. Raman və Rentgen analizləri göstərdi ki, alınan maddə yarımkəçiricidir (şəkil 1).



Şəkil 1. CuInSe<sub>2</sub> monokristalının Raman spektiri.

### MÖVZUNUN AKTUALLIĞI

İkiqat analoqlarından fərqli olaraq, üçqat birləşmələrdə baş verən daşınma prosesləri hələ tam öyrənilməmişdir. Texnoloji proseslər və kənar təsirlər hesabına kristal səthində yaranan nanoquruluşlarla kristalın özü arasında qarşılıqlı təsirlərin təbiətinin öyrənilməsi vacibdir. Bu mövzu nanoquruluşların əsas maddədən ayrılması, ölçülərinin xarici təsirlərdən sonra dəyişməsi baxımından maraqlıdır.

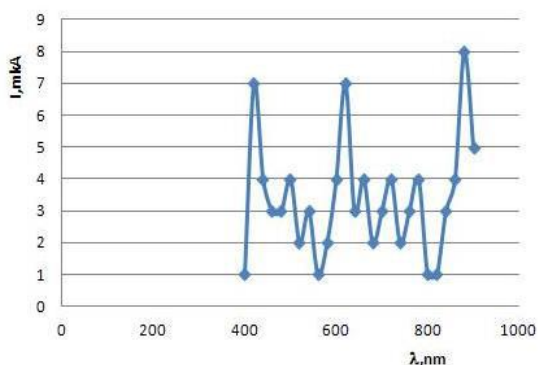
### MƏSƏLƏNİN QOYULUŞU

Yeni alınmış mürəkkəb tərkibli maddə olan CuInSe<sub>2</sub> monokristal praktik tətbiq üçün yararlıdır. Faydalı iş əmsalını artırmaq üçün yeni üsullara ehtiyac

duyulur. Obyektin xalkopirit strukturunda kristallaşdığını, simmetriya mərkəzi olmayan kristallar sinfinə daxil olduğunu nəzərə alsaq, onda məsaməli yarımkəçiricilərin yaranma səbəblərini izah etmək imkanı yaranır. Bu tip quruluşlara xarici qüvvələr təsir etdikdə, fərqli xassələr ona görə meydana çıxır ki, nazik təbəqənin daxilində rəqslər dalğa formasında yayılır. Bu zaman əmələ gələn daxili sahə təkcə kristalın ölçüləri ilə bağlı deyil, onun xarici səthində də yayılmış olur, yəni dalğa paketlərinin səth istiqamətində yayılması müşahidə olunur [3]. Digər bir məsələ kristalın səthindəki nanoobyektlərin elektrik və optik xassələrinin monokristalın mövcud xassələri ilə kompleks şəkildə izahını verilməsidir. Təcrübi və nəzəri işlərin birgə təhlilini ortaya qoymaqla, yeni nəticələr əldə edə biləcəyimizi düşünürük.

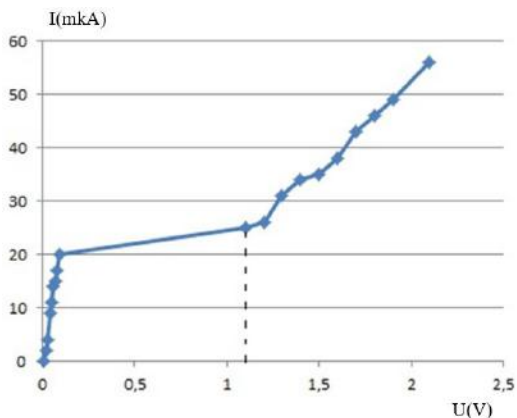
**TƏCRÜBƏNİN APARILMASI**

Yarımqeçiricilərdə elektronların dispersiya qanununun kvadratik formada olmadığını Volt-Amper xarakteristikasından müəyyənləşdirmək olar. Aparılan təcrübə zamanı qrafikin kəsilməz və ya kəsilən (diskret) olması, kristalın daxilində və ya onun səthində baş verən proseslərin göstəricisi kimi özünü aparır. Volt-Amper xarakteristikasını ölçməklə kristalın səthində baş verənləri izləyə bilərik. İstər zəif sahələrdə, istərsə də güclü sahələrdə sabit elektrik sahəsindən asılı olaraq keçiriciliyi ifadə edən qrafikin xətti olmadığını görürük. Bunlara klassik fizika qanunları ilə baxsaq, görərik ki, dalğalar kristalın səthində özünü lokallaşmış kimi aparır və nazik təbəqənin fiziki xassələri əsas maddənin yəni, altlıq kimi götürdüyümüz CuInSe<sub>2</sub> monokristalının xassələrindən kəskin fərqlənir. Belə hallarda təcrübə yolu ilə alınan nəticələr kvant nöqtəyi-nəzərindən izah olunmalıdır. Kombinasiyalı səpilmə üsulu ilə aparılan təcrübədə alınan qrafik maksimumların əsas maddə ilə əlaqəsinin zəifləmiş sərbəst elektronların və yüklü hissəciklərin hesabına yarandığını göstərir (1). Bu isə onu deməyə əsas verir ki, yüklü hissəciklər səthdəki nanoquruluşların ətrafında lokal şəkildə formalaşmışdır. Buraxma spektrindəki paketlər şəklində təkrarlanan anizotropluq isə yeni xassələrə malik periodik strukturların yarandığını göstərir (şəkil 2). Bu quruluşlar foton mühitlərin əsasını təşkil edir.



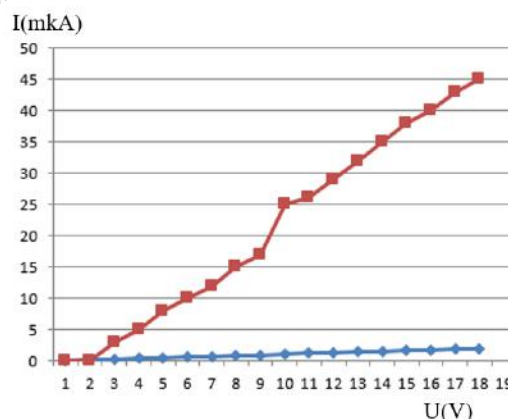
Şəkil 2. CuInSe<sub>2</sub> monokristalında buraxma spektri.

**ALINAN NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ**

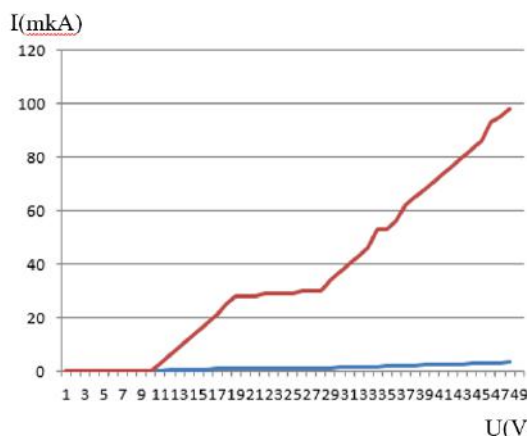


Şəkil 3. CuInSe<sub>2</sub> monokristalının Volt-Amper xarakteristikasından bağlı zonanın enerjisinin təyin olunması.

Bərk cisimlər nəzəriyyəsinin əsas problemlərindən biri müxtəlif dalğalar arasındakı qarşılıqlı təsir mexanizmlərinin öyrənilməsidir. Bunun üçün qeyri xətti proseslərin öyrənilməsinə daha çox diqqət ayrılır. Belə üsullardan biri sabit elektrik sahəsi ilə kristal daxilində tarazlığın pozulması və sahə effektindən istifadə edərək müxtəlif dalğalar üçün sındırma əmsalının ölçülməsidir. Dispersiyanın ölçülməsi zamanı aydın oldu ki, nanoquruluşlardakı sınıma əmsalının qiyməti əsas maddələrindən kəskin fərqlənir. Belə xassələrə malik kristalların alınması isə kiçikölçülü elektron sənayesi üçün vacib şərtlərdən biri sayılır. Periodik strukturlarda laylar arasındakı məsafə və ya layların ölçüləri De-Broyl dalğasına uyğun gəldiyi üçün, onların xassələrini əsas maddənin xassələrindən fərqli edir. Ona görə parametrik simmetriya pozulmaları yeni yaranan sistemlərin xassələrinin kəskin dəyişməsinə səbəb olur [4].



Şəkil 4. CuInSe<sub>2</sub> monokristalının Volt-Amper xarakteristikası.



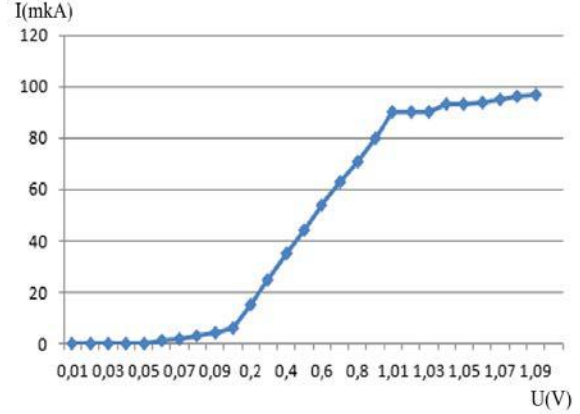
Şəkil 5. CuInSe<sub>2</sub> monokristalının Volt-Amper xarakteristikası

Volt-Amper xarakteristikasındakı intensivliyin artmasının pilləli xarakter alması, səthdəki laylı təbəqələrə məxsusdur. Nümunəyə verilən sahənin artmasına uyğun olaraq monoton artan bir intensivlik müşahidə edirik (şəkil 3). Spektirin diskretliyini ifadə edən oblastlar elektronun kristaldakı keçirici və bağlı zonaları ilə analogiya təşkil edir [5]. Hər layın sərhəddində adi düzünə dalğa və qayıdaraq bir period yubanmış dalğaları müşahidə edirik. Bunlar eyni fazada hərəkət etmiş olur. Bağlı zonada isə düzünə və qayıdan dalğalar əks fazalarda olduğundan, dalğaların sönməsi hadisəsi baş

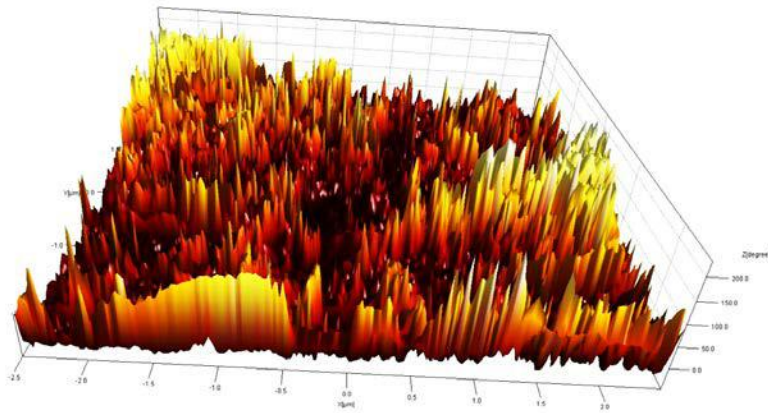
verir. Bu sönmələri isə qrafikdəki doyma hallarını ifadə edən düz xətlər göstərir. Periodik strukturlarda dalğaların yayılması altlığın dielektrik nüfuzluğundan çox asılıdır. Bizim apardığımız təcrübədə altlıq rolunu  $\text{CuInSe}_2$  monokristalı oynayır. Bu xassələrdən çox-komponentli modulyasiya qurğularının yaradılmasında bir şərtlə istifadə etmək olar ki, altlıq materialı elektro-optik effektə malik olsun. Yuxarıda deyilənlərdən aydın olur ki, dalğalar nazik lövhələrin kənarından əks olunaraq eksponensial azalır. Yarımkəçiricilərdə elektronların dispersiya qanununun kvadratik olmaması Volt-Amper xarakteristikasından müəyyənəldirilir.

Anizotropluğu ifadə edən diskretlik, səthdə mövcüd olan minizonaların içərisində baş verir. Bunlar qrafik olaraq pillə formasında özünü göstərir.  $X$ -koordinatının hər bir nöqtəsinə məxsus qiymətlərin on dəfə artdığını nəzərə alsaq, onda qrafikin kəskin qalxan hissəsi  $E_g=1,04$  eV-dan başlanır. Qrafikin bu hissədən sonrası nanoquruluşları ifadə edir (şəkil 4). Dördüncü şəkildə olduğu kimi,  $X$ -koordinatı nöqtələrinin qiymətləri 10 dəfə artırılıb ( $Y$ -oxu nöqtələrinin qiymətləri ilə mütənasibliyi təmin etmək üçün). Şəkil 5-dəki xətti hissə  $\text{CuInSe}_2$  monokristalına aiddir, qrafikin qalan hissəsi

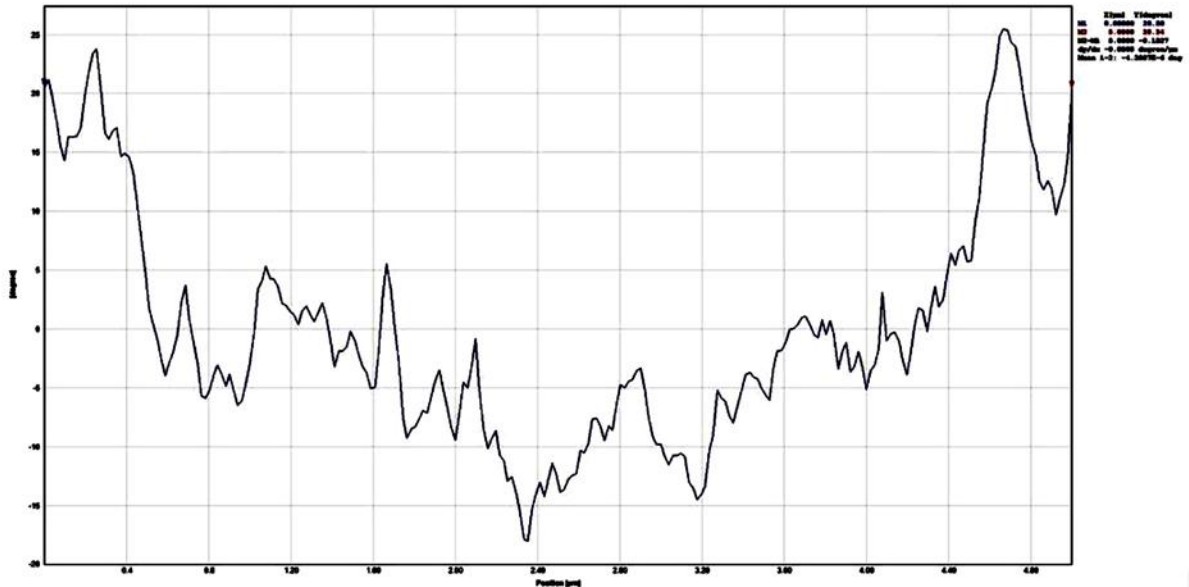
nanoquruluşları ifadə edir. Volt-Amper xarakteristikasının pilləli formada olması da, səthdə yaranan nanoquruluşlara aiddir [6]. Cərəyanın qiymətinin monoton arması isə tunnel diodlarına məxsus bir qrafikin alındığını göstərir. Ona görə də, biz bu qrafiklərdən istifadə etməklə bağlı zonanın enerjisini tapa bilirik (şəkil 3, 6).



Şəkil 6.  $\text{CuInSe}_2$  monokristalının Volt-Amper xarakteristikası.



Şəkil 7. Monokristal  $\text{CuInSe}_2$ . Səthin atom güc mikroskopunda (AGM) çəkilmiş şəkli.



Şəkil 8. Monokristal  $\text{CuInSe}_2$ . Kristal səthində güc mikroskopu ilə çəkilmiş, atom klasterlərinin paylanmasını ifadə edən



CuInSe monokristalının səthinin məsaməli olduğunu atom mikroskopunda çəkilmiş şəkildən də görmək olur (şəkil 7). Atom mikroskopunda çəkilmiş digər bi şəkildə isə kristalın məsaməli səthində atom klastərlərinin paylanması görünür. Maksimalların təpə nöqtələrini bir xətlə birləşdirsək, paylanmanın oval formada olduğunu görmüş oluruq. Atomların sətdə belə paylanması da yaranan nanoquruluşların göstəricisidir (şəkil 8).

## **YEKUN NƏTİCƏ**

Məsaməli yarıkeçiricilərin üstün xüsusiyyətlərindən biri də, anizotropluğu nizamlı formada yayılmasıdır. Bu xassələr isə laylı kristallara məxsusdur.

Laylı periodik strukturlarda alınan nəticələri, elektron potensial sahədəki xassələrinə tətbiq etmək mümkündür. Düzgün dəqiq nəticələr əldə etmək üçün maddə quruluşunun dərin qatlarındakı potensial sahələrin araşdırılmasını sadələşdirmək üçün santimetrlik-millimetrik dalğa diapazonlarında aparmaq daha məqsədəuyğundur.

Yuxarıda göstərilən halda alınan nəticələrdən istifadə etməklə çoxkanallı modulyatorların və zəif siqnallarla işləyən gücləndiricilərin hazırlanmasında istifadə oluna bilər. Bu iş Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Elmin inkişafı fondunun maliyyə yardımı ilə yerinə yetirilmişdir. Qrant N EIF-BGM-3-BRFTF-2\*/2017-15/02/1

- 
- [1] *Л.А. Головань, В.Ю. Тимошенко, П.К. Каукаров.* УФН, 2007, т.177, N 6, ст. 619-638.
- [2] *İ.Qasımoğlu.* АJP Fizika, 2013, v. XIX, N1, section: Az. s.19-21.
- [3] *Ф.Г. Басс, А.А. Булгаков, А.П. Тетервов.* Высоочастотные свойство полупроводников со сверхрешетками. М.1989, 286 ст.
- [4] *А.И. Губанов и Ф.М.Гашидзе.* ФТТ, 1959, том 1, вып 9, ст.1411-1416.
- [5] *С.М. Рывкин.* Фотоэлектрические явления в полупроводниках. М.1963. 495 ст.
- [6] *В.И.Ляшенко, В.Г. Литовченко, И.И. Стенко, В.И.Стриха, Л.В. Ляшенко.* Электронные явления на поверхности полупроводников. Киев-1968, 399 с.

**I. Qasımoğlu, Q.S. Mehdiyev, Z.Qadiroglu, I.A.Mammadova, I.Q.Nasibov, C.T.Huseynov**

### **EFFECT OF POROUS NANOSTRUCTURES FORMED ON THE SURFACE OF CuInSe<sub>2</sub> SINGLE CRYSTALS ON ITS ELECTRICAL AND OPTICAL PROPERTIES**

The study the effect of the interaction of porous nanostructures formed during the technological process on the surface of the single crystal of CuInSe<sub>2</sub>, with the parent substance. The formation mode is controlled. The resulting substances are considered suitable for photonic media [1].

**И. Гасымоглу, Г.С. Мехдиев, З. Гадироглу, И.А. Мамедова, И.Г. Насибов, С.Т. Гусейнов**

### **ВЛИЯНИЕ ПОРИСТЫХ НАНОСТРУКТУР, СФОРМИРОВАННЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ CuInSe<sub>2</sub> НА ЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА**

В ходе исследования изучались взаимодействия пористых наноструктур, образующихся в технологическом процессе на поверхности монокристаллов CuInSe<sub>2</sub>, с исходным веществом. Режим формирования контролируется, полученные вещества считаются подходящими для фотонных сред [1].

*Qəbul olunma tarixi: 15.10.2021*

# QORA-UİLYAMS KİNETİK ENERJİ OPERATORU İLƏ İFADƏ OLUNAN KVANT HARMONİK OSSİLYATORUNUN XARİCİ QRAVİTASIYA SAHƏSİNDƏ DƏQİQ HƏLLİ

**A. M. MƏMMƏDOVA**

*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu*

*Cavid pr. 131, AZ1143, Bakı, Azərbaycan*

E-mail: a.mammadova@physics.science.az

Koordinatdan asılı olaraq dəyişən kütlə formalizmi çərçivəsində xarici qravitasiya sahəsində dəqiq həll oluna bilən qeyri-relyativistik kvant harmonik ossilyatorunun konfaynment modeli təklif edilir. Baxılan ossilyator modelinin dalğa funksiyaları üçün dəqiq ifadələr uyğun Şredinger tənliyi həll edilərək tapılmışdır. Effektiv kütləsi koordinatdan asılı olaraq dəyişdiyi zaman harmonik ossilyator modelinin ermitlik xassəsinin saxlanması üçün Qora-Uilyams kinetik enerji operatoru istifadə olunmuş və göstərilmişdir ki, tədqiq edilən kvant sisteminin stasionar hallarının dalğa funksiyalarını Yakobi soxhədliləri ilə ifadə olunurlar, enerji spektri isə qeyri-ekvidistantlığı qorumaqla bərabər, həm də xarici qravitasiya sahəsindən asılı olur. Xüsusi halda xarici qravitasiya sahəsi sıfıra bərabər olduqda tədqiq edilən model stasionar hallarının dalğa funksiyaları Gegenbauer çoxhədliləri ilə ifadə olunan qeyri-relyativistik kvant harmonik ossilyatorunun konfaynment modelinə çevrilir və konfaynment parametrisinin  $a \rightarrow \infty$  limitində isə tədqiq edilən kvant sistemi xarici sahənin təsiri altında olan və stasionar hallarının dalğa funksiyaları Ermit çoxhədliləri ilə ifadə olunan qeyri-relyativistik kvant harmonik ossilyator modelini tam olaraq bərpa edir.

**Açar sözlər:** Qora-Uilyams kinetik enerji operatoru, kvant harmonik ossilyatoru, konfaynment modeli, xarici qravitasiya sahəsi, koordinatdan asılı effektiv kütlə

**PACS:** 03.65.-w; 02.30.Hq; 03.65.Ge

## 1. GİRİŞ

Son illərdə müxtəlif kvant sistemlərinə qravitasiya sahəsinin təsirinin öyrənilməsi istiqamətində çoxlu elmi-tədqiqat işləri aparılır [1-3]. Bu tip elmi-tədqiqat işlərinə marağın artması ilk növbədə, qravitasiya sahəsinin kvant ölçülərində ortaya çıxara biləcəyi bir çox “gizli” xassələrin oynaya biləcəyi əhəmiyyətli rol ilə bağlıdır. Məsələn, qravitasiya sahəsinin kvant sistemində təsirinin öyrənilməsi nəticəsində hidrogen atomunun enerji səviyyələrində əmələ gələn sürüşmələrin aşkara çıxarılması böyük marağa səbəb olmuşdur [4]. Həmçinin, qravitasiya sahəsinin materiya ilə qarşılıqlı təsiri və bu sahənin mümkün kvantlanması mühüm tədqiqat obyektlərindəndir. Qravitasiya sahəsinin kvantlanması, onun kvant nəzəriyyəsinin qurulması üçün müxtəlif yanaşmalardan, nəzəriyyələrdən istifadə edilir. Məsələn, klassik fonda kiçik həyəcanlanmalara əsaslanan perturbativ yanaşma [5], dinamik dəyişənlərin yenidən qruplaşdırılmasına əsaslanan halqa (loop) kvantlanması yanaşması [6], təbii komponentlərin qravitasiya sahəsində yeni usullarla həyəcanlanmasına əsaslanan sim nəzəriyyəsi və başqa bu qəbildən olan nəzəriyyələr kvant nəzəriyyəsinin köməyi ilə qravitasiya effektlərinin izahına istiqamətlənib. Bundan əlavə, Avropa Kosmik Agentliyi Beynəlxalq Kosmik Stansiyada (BKS) qravitasiya sahəsinin kvant sistemlərinə təsirinin araşdırılması sahəsində mühüm tədqiqatlar aparır, daha dəqiq desək, dolaşdırılmış fotonlardan biri Yerdə saxlanılmaqla, digəri BKS-ya göndərilərək qravitasiya sahəsinin kvant dolaşılıqlığına təsiri öyrənilir. Bu hadisəni öyrənmək üçün, həmçinin müxtəlif nəzəri modellər təklif edilir.

Eyni zamanda, son illər effektiv kütləsi koordinatdan asılı olaraq dəyişən kvant sistemləri də geniş tədqiq olunan obyektlər sırasına daxil olmuşdur [7-10]. Qeyd

etmək lazımdır ki, sabit effektiv kütlənin koordinatdan asılı effektiv kütlə ilə əvəz edilməsi nəticəsində həm ossilyator tipli, həm də daha fərqli potensiala malik müxtəlif kvant sistemlərinin dəqiq həlləri artıq elmi ədəbiyyatda mövcuddur və bu həllər həm bərk cisimlər fizikası, həm də fizikanın digər istiqamətlərində geniş tətbiqlərə malikdir. Bu baxımdan, biz də qarşımıza məqsəd qoyduq ki, dəqiq həllərə malik bu tip ossilyator məsələlərini genişləndirək və effektiv kütləsi koordinatdan asılı olaraq dəyişən qeyri-relyativistik harmonik ossilyatora qəfildən xarici qravitasiya sahəsi təsir etdikdə, məsələnin dəqiq həllərini taparaq, xarici qravitasiya sahəsinin tədqiq etdiyimiz kvant harmonik ossilyatorunun necə dəyişdiyini müşahidə edək.

Baxılan məqalədə Qora-Uilyams kinetik enerji operatorunun təsiri altında olan kvant harmonik ossilyatorunun qravitasiya sahəsində dəqiq həlli araşdırılır. Məqalənin ikinci bölməsində xarici qravitasiya sahəsinin təsiri altında olan və stasionar hallarının dalğa funksiyaları Ermit çoxhədliləri ilə ifadə olunan qeyri-relyativistik kvant harmonik ossilyator modeli qısa olaraq təqdim edilir. Kanonik yanaşmada uyğun Şredinger tənliyi həll edilir, stasionar halların dalğa funksiyaları və enerji spektri üçün qravitasiya sahəsində ifadələr alınır. Üçüncü bölmədə Qora-Uilyams kinetik enerji operatoruna malik qeyri-relyativistik kvant harmonik ossilyator modelinin qravitasiya sahəsi olmadan enerji spektri və stasionar halların dalğa funksiyaları haqqında qısa icmal verilir. Dördüncü bölmədə Qora-Uilyams kinetik enerji operatoruna malik qeyri-relyativistik kvant harmonik ossilyator modelinin xarici qravitasiya sahəsində enerji spektri və stasionar halların dalğa funksiyaları üçün dəqiq ifadələr alınmışdır. Sonuncu bölmədə alınan nəticələr və müxtəlif limit keçidləri araşdırılır.

**2. XARİCİ BİRCİNS QRAVİTASIYA SAHƏSİNİN TƏSİRİ ALTINDA OLAN QEYRİ-RELYATİVİSTİK KVANT HARMONİK OSSİLYATOR MODELİ**

Məqalənin bu bölməsində qeyri-relyativistik kvant mexanikasına həsr edilmiş bir çox dərslük və monoqrafiyalarda geniş müzakirə edilən fiziki sistem – xətti harmonik ossilyatorun xarici bircins qravitasiya sahəsinin təsiri altında dəqiq həlləri ilə bağlı qısa icmal verəcəyik.

Təsəvvür edək ki, baxdığımız xətti kvant harmonik ossilyatoru xarici bircins qravitasiya sahəsinin təsiri altındadır və onun potensialını aşağıdakı kimi yazmaqla bilirik:

$$V(x) = \frac{m_0\omega^2 x^2}{2} + m_0 g x. \quad (2.1)$$

Burada  $m_0$  və  $\omega$  uyğun olaraq qeyri-relyativistik kvant harmonik ossilyatorunun sabit effektiv kütləsi və dövrü tezliyidir.

Bu halda uyğun Şredinger tənliyi

$$\left[ \frac{\hat{p}_x^2}{2m_0} + \frac{m_0\omega^2 x^2}{2} + m_0 g x \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (2.2)$$

şəklində olar.

$$E \equiv E_n^g = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2 g^2}{2m_0\omega^4}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.6)$$

Uyğun olaraq stasionar halların dalğa funksiyaları aşağıdakı ifadə ilə təyin edilir:

$$\psi \equiv \psi_n^g(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{m_0\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m_0\omega(x+\frac{g}{\omega^2})^2}{2\hbar}} H_n \left( \sqrt{\frac{m_0\omega}{\hbar}} \left( x + \frac{g}{\omega^2} \right) \right). \quad (2.7)$$

Xüsusi halda,  $g = 0$  olduqda, bu hal xarici qravitasiya sahəsi olmadığı halda adi qeyri-relyativistik xətti harmonik ossilyatora uyğun gəlir ki, bu zaman da enerji spektri

$$E \equiv E_n^0 = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.8)$$

stasionar halların dalğa funksiyaları isə

$$\psi \equiv \psi_n^0(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{m_0\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m_0\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left( \sqrt{\frac{m_0\omega}{\hbar}} x \right) \quad (2.9)$$

olur.

**3. QORA-UİLYAMS KİNETİK ENERJİ OPERATORU İLƏ İFADƏ OLUNAN KOORDİNATDAN ASILI EFFEKTİV KÜTLƏYƏ MALİK KVANT HARMONİK OSSİLYATORU MODELİ**

Bu bölmədə effektiv kütləsi koordinatdan asılı olaraq dəyişən və Qora-Uilyams kinetik enerji operatoru ilə ifadə olunan kvant harmonik ossilyatoru barədə ümumi təqdimat verək.

Qora-Uilyams kinetik enerji operatoru Ermit operator olub aşağıdakı şəkildə təyin olunur:

$$\hat{H}_0^{QU} = -\frac{\hbar^2}{4} \left[ \frac{1}{M(x)} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dx^2} \frac{1}{M(x)} \right]. \quad (3.1)$$

Kanonik yanaşmada birölçülü impuls operatoru  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$  kimi təyin edildiyindən, bəzi hesablamalardan sonra aşağıdakı ikinci tərtib differensial tənliyi alırıq:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[ \frac{2m_0E}{\hbar^2} - \frac{m_0^2\omega^2}{\hbar^2} (x + x_0)^2 + \frac{g^2}{\omega^4} \right] \psi = 0. \quad (2.3)$$

Burada  $x_0$  sabiti aşağıdakı şəkildə təyin olunur:

$$x_0 = \frac{g}{\omega^2}. \quad (2.4)$$

(2.3) tənliyində

$$\tilde{E} = E + \frac{\hbar^2 g^2}{2m_0\omega^4}$$

əvəzləməsini etsək, alırıq ki,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[ \frac{2m_0\tilde{E}}{\hbar^2} - \frac{m_0^2\omega^2}{\hbar^2} (x + x_0)^2 \right] \psi = 0. \quad (2.5)$$

Bu tənliyi analitik olaraq həll edərək enerji spektri üçün dəqiq ifadə ala bilirik:

Baxılan harmonik ossilyatorun potensialını aşağıdakı şəkildə yazsaq:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{M(x)\omega^2 x^2}{2} & |x| \leq a, \\ \infty, & |x| > a, \end{cases} \quad (3.2)$$

Bu zaman, faktiki olaraq  $x = \pm a$  qiymətlərində konfaynment effektinə tabe olan və effektiv kütləsi koordinatdan asılı olan ossilyator modelini alacağıq ki, konfaynment effektinə də ossilyatorun koordinatdan asılı effektiv kütləsi olan  $M(x)$  üçün aşağıdakı aşkar şəkili seçməklə nail olmaq olar:

$$M \equiv M(x) = \frac{a^2 m_0}{a^2 - x^2} \quad (3.3)$$

Yoxlamaq olar ki, (3.3) ifadəsi aşağıdakı şərtləri ödəyir:

$$M(\pm a) = \infty, \quad M(0) = m_0, \quad \lim_{a \rightarrow \infty} M(x) = m_0.$$

Onda, (3.1) ifadəsini, həmçinin, kanonik yanaşmada impuls operatorunun  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$  kimi təyin edildiyini nəzərə alaraq, baxılan kvant ossilyator modeli üçün uyğun Şredinger tənliyini aşağıdakı kimi yazıla bilər:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{2x}{a^2 - x^2} \frac{d}{dx} - \frac{1}{a^2 - x^2} \right] \psi + \left( \frac{2m_0 a^2 E}{\hbar^2 (a^2 - x^2)} - \frac{m_0^2 \omega^2 a^4 x^2}{\hbar^2 (a^2 - x^2)^2} \right) \psi = 0 \quad (3.4)$$

Bu tənliyin həlli tədqiq edilən ossilyator modelinin enerji spektri üçün

$$E \equiv E_n^{QU} = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_0 a^2} (n^2 + n + 1), \quad (3.5)$$

stasionar halların dalğa funksiyaları üçün isə

$$\psi \equiv \psi_n^{QU}(x) = c_n^{QU} \left( 1 - \frac{x^2}{a^2} \right)^{\frac{m_0 \omega a^2}{2\hbar}} C_n \left( \frac{m_0 \omega a^2}{\hbar} + \frac{1}{2} \right) \left( \frac{x}{a} \right) \quad (3.6)$$

ifadələrinə gətirib çıxarır. Burada,  $c_n^{QU}$  normallaşma faktoru

$$c_n^{QU} = 2^{\frac{m_0 \omega a^2}{\hbar}} \Gamma \left( \frac{m_0 \omega a^2}{\hbar} + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{\left( n + \frac{m_0 \omega a^2}{\hbar} + \frac{1}{2} \right) n!}{\pi a \Gamma \left( n + \frac{2m_0 \omega a^2}{\hbar} + 1 \right)}}$$

$C_n^{(\bar{\lambda})}(x)$  isə  ${}_2F_1$  hiperhəndəsi funksiyaları ilə təyin olunan Gegenbauer çoxhədliləridir:

$$C_n^{(\bar{\lambda})}(x) = \frac{(2\bar{\lambda})_n}{n!} {}_2F_1 \left( \begin{matrix} -n, n+2\bar{\lambda} \\ \bar{\lambda}+1/2 \end{matrix}; \frac{1-x}{2} \right), \quad \bar{\lambda} \neq 0. \quad (3.7)$$

Asanlıqla göstərmək olar ki,  $a \rightarrow \infty$  limitində, yəni konfaynment effekti yoxa çıxdıqda, (3.5) və (3.6) ifadələri uyğun olaraq (2.8) və (2.9) ifadələrini tam olaraq bərpə edir.

#### 4. QORA-UİLYAMS KİNETİK ENERJİ OPERATORU İLƏ İFADƏ OLUNAN KOORDİNATDAN ASILI EFEKTİV KÜTLƏYƏ MALİK KVANT HARMONİK OSSİLYATORUNUN QRAVİTASIYA SAHƏSİNDƏ DƏQİQ HƏLLİ

Xarici sahənin kvant sistemlərinə təsirinin öyrənilməsinə olan böyük maraq səbəbindən bu sahədə çoxlu sayda araşdırmalar aparılmışdır. Biz bu bölmədə qravitasiya sahəsinin kvant sisteminə, daha dəqiq desək Qora-Uilyams kinetik enerji operatorunun təsiri altında olan qeyri-relyativistik kvant harmonik ossilyatoruna təsirini araşdıracağıq.

Qeyri relyativistik kvant harmonik ossilyatorunun potensialı, qravitasiya sahəsinin təsirini nəzərə alaraq aşağıdakı kimi yazıla bilər:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{M(x)\omega^2 x^2}{2} + M(x)gx, & |x| \leq a, \\ \infty, & |x| > a. \end{cases} \quad (4.1)$$

Burada,  $M(x)$  baxılan ossilyatorun koordinatdan asılı olan kütləsi olub (3.3) ifadəsi ilə təyin edilir,  $m_0$  və  $\omega$  isə uyğun olaraq qeyri-relyativistik kvant harmonik ossilyatorunun sabit effektiv kütləsi və dövrü tezliyidir.

Qora-Uilyams kinetik enerji operatorunun (3.1) və potensialın (4.1) ifadəsini nəzərə alaraq tam Hamiltonianı aşağıdakı şəkildə yazıla bilər:

$$\hat{H}^{QU} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{M'}{M} \frac{d}{dx} - \frac{1}{2} \frac{M''}{M} + \left( \frac{M'}{M} \right)^2 \right] + \frac{M\omega^2 x^2}{2} + M(x)gx. \quad (4.2)$$

Onda baxılan harmonik ossilyator üçün Şredinger tənliyi aşağıdakı kimi olar:



$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left[ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{M'}{M} \frac{d}{dx} - \frac{1}{2} \frac{M''}{M} + \left( \frac{M'}{M} \right)^2 \right] \psi^{QU}(x) + \left( \frac{M\omega_0^2 x^2}{2} + Mgx \right) \psi^{QU}(x) = E^{QU} \psi^{QU}(x). \quad (4.3)$$

Bu tənlikdə

$$\frac{M'}{M} = \frac{2x}{a^2 - x^2}$$

$$\frac{M''}{M} = \frac{2}{a^2 - x^2} + \frac{8x^2}{(a^2 - x^2)^2} \quad (4.4)$$

ifadələrini yerinə yazaraq, alırıq:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{2x}{a^2 - x^2} \frac{d}{dx} - \frac{1}{a^2 - x^2} \right] \psi^{QU} - \frac{2M}{\hbar^2} \left( E^{QU} - \frac{M\omega^2 x^2}{2} - Mgx \right) \psi^{QU} = 0 \quad (4.5)$$

İndi,  $M(x)$  üçün (3.3) ifadəsini nəzərə alaraq, ölçüsüz  $\xi = \frac{x}{a}$  dəyişəni daxil edək. Bu halda

$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \frac{d}{d\xi} \frac{1}{a}$$

və

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} = \frac{d}{dx} \frac{1}{a} \frac{d}{d\xi} = \frac{d^2}{d\xi^2} \frac{1}{a^2}$$

olduğundan, (4.5) tənliyi aşağıdakı şəkllə düşər:

$$\psi'' - \frac{2\xi}{1-\xi^2} \psi' + \left[ \frac{\left( \frac{2m_0 a^2 E^{QU}}{\hbar^2} - 1 \right) (1-\xi^2) - \frac{2m_0^2 g a^3}{\hbar^2} \xi - \frac{m_0^2 \omega^2 a^4}{\hbar^2}}{(1-\xi^2)^2} \right] \psi = 0. \quad (4.6)$$

(4.6) tənliyində

$$c_0 = \frac{2m_0 a^2 E^{QU}}{\hbar^2} - 1, \quad c_1 = \frac{2m_0^2 g a^3}{\hbar^2}, \quad c_2 = \frac{m_0^2 \omega^2 a^4}{\hbar^2} + c_0$$

övzləmələrini etsək,

$$\psi'' - \frac{2\xi}{1-\xi^2} \psi' + \frac{c_0 - c_1 \xi + c_2 \xi^2}{(1-\xi^2)^2} \psi = 0 \quad (4.7)$$

tənliyini alırıq. Aldığımız tənliyi dəqiq həll etmək üçün, ikinci dərəcəli differensial tənliklərə tətbiq olunan Nikiforov-Uvarov metodundan istifadə edək [11]. Bunun üçün (4.7) tənliyini

$$\psi'' + \frac{\tilde{\tau}}{\sigma} \psi' + \frac{\tilde{\sigma}}{\sigma^2} \psi = 0 \quad (4.8)$$

tənliyi ilə müqayisə edə bilərik. Burada  $\bar{\tau}$ - maksimum birinci dərəcəli çoxhədli,  $\sigma$  və  $\bar{\sigma}$  isə maksimum ikinci tərtib çoxhədlilərdir və aşağıdakı kimi təyin edilirlər:

$$\tilde{\tau} = -2\xi, \quad \sigma = 1 - \xi^2, \quad (4.9a)$$

$$\tilde{\sigma} = c_0 - c_1 \xi + c_2 \xi^2. \quad (4.9b)$$

İstifadə etdiyimiz metoda uyğun olaraq, (4.8) tənliyinin həllini

$$\psi = \varphi(\xi) y(\xi), \quad \varphi = e^{\int \frac{\pi(\xi)}{\sigma(\xi)} d\xi} \quad (4.10)$$

şəklləndə axtaraq. Burada  $\pi(\xi)$  maksimum olaraq birinci tərtib olan ixtiyari çoxhədlidir. (4.9) və (4.10) ifadələ-

rini (4.8) tənliyində nəzərə alaraq, sadə hesablamalardan sonra aşağıdakı ikinci tərtib differensial tənliyi alırıq:

$$y'' + \frac{\bar{\tau}}{\sigma} y' + \frac{\bar{\sigma}}{\sigma^2} y = 0. \quad (4.11)$$

Burada,

$$\bar{\tau} = 2\pi + \tilde{\tau},$$

$$\bar{\sigma} = \tilde{\sigma} + \pi^2 + \pi(\tilde{\tau} - \sigma') + \pi'\sigma. \quad (4.12)$$

Həmçinin,

$$\bar{\sigma} = \lambda\sigma, \quad \lambda = \text{const} \quad (4.13)$$

Onda, (4.11) tənliyini aşağıdakı hiperhəndəsi tənlik şəklində yazı bilərik:

$$\sigma y'' + \bar{\tau} y' + \lambda y = 0. \quad (4.14)$$

Bu tənliyi həll etmək üçün  $\pi(\xi)$  çoxhədlisini və  $\lambda$  sabitini tapaq. (4.13) ifadəsini (4.12) tənliyində nəzərə alsaq,

$$\pi^2 + \pi(\tilde{\tau} - \sigma') + \tilde{\sigma} - (\lambda - \pi')\sigma = 0.$$

Bu ifadədə  $\tilde{\tau} - \sigma' = 0$  olduğundan, alırıq ki,

$$\pi = \varepsilon_1 \sqrt{(\mu - c_0) + c_1 \xi + (c_2 - \mu) \xi^2}, \quad \varepsilon_1 = \pm 1. \quad (4.15)$$

Bu tənlikdə  $\mu$  üçün

$$\mu = \lambda - \pi' \quad (4.16)$$

işarələməsi əbul etmişik.

(4.15) ifadəsini aşağıdakı formada da yazı bilərik:

$$\pi = \varepsilon_1 \sqrt{\mu - c_0 - \frac{c_1^2}{4(c_2 - \mu)} + \left( \sqrt{(c_2 - \mu)} \xi + \frac{c_1}{2\sqrt{(c_2 - \mu)}} \right)^2}. \quad (4.17)$$

$\pi(\xi)$  maksimum birinci tərtib çoxhədli olması üçün (4.17)-da kvadrat kökün altındakı ifadə sıfıra bərabər olmalıdır. Bunun üçün

$$\mu - c_0 - \frac{c_1^2}{4(c_2 - \mu)} = 0. \quad (4.18)$$

Bu tənliyi həll edərək  $\mu$  üçün aşağıdakı ifadəni alırıq:

$$\mu = \frac{c_2 + c_0 + \varepsilon_2 \sqrt{(c_2 - c_0)^2 - c_1^2}}{2}, \quad \varepsilon_2 = \pm 1. \quad (4.19)$$

Buradan,

$$c_2 - \mu = \frac{c_2 - c_0 - \varepsilon_2 \sqrt{(c_2 - c_0)^2 - c_1^2}}{2} \quad (4.20)$$

$\pi(\xi)$ ,  $\bar{\tau}$  və  $\lambda$  üçün aşağıdakı ifadələri alırıq:

$$\pi(\xi) = \varepsilon_1 \left( \sqrt{\kappa} \xi + \frac{c_1}{2\sqrt{\kappa}} \right) \quad (4.21)$$

$$\bar{\tau} = 2 \left( \varepsilon_1 \sqrt{\kappa} - 1 \right) \xi + \varepsilon_1 \frac{c_1}{\sqrt{\kappa}} \quad (4.22)$$

$$\lambda = \mu + \pi' = \frac{c_2 + c_0 + \varepsilon_2 \sqrt{(c_2 - c_0)^2 - c_1^2}}{2} + \varepsilon_1 \sqrt{\kappa} \quad (4.23)$$

Stasionar halların dalğa funksiyasının ifadəsini almaq üçün (4.9) tənliyində

$$\varphi = e^{\int \frac{\pi(\xi)}{\sigma(\xi)} d\xi} = e^{\varepsilon_1 \sqrt{\kappa} \int \frac{\xi d\xi}{1 - \xi^2}} e^{\varepsilon_1 \frac{c_1}{2\sqrt{\kappa}} \int \frac{d\xi}{1 - \xi^2}}$$

olduğundan, sadə hesablamalardan sonra alırıq:

$$\varphi = (1 - \xi)^{-\kappa_1} (1 + \xi)^{-\kappa_2},$$

$$\kappa_{1,2} = \frac{1}{2} \varepsilon_1 \left( \sqrt{\kappa} \pm \frac{c_1}{2\sqrt{\kappa}} \right).$$

$\varphi(\xi)$  üçün  $\lim_{\xi \rightarrow \pm 1} \varphi(\xi) = const$  şərtinin ödənilməsi üçün:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = -1, \quad \kappa > 0, \quad \kappa_{1,2} \leq 0.$$

Onda,  $\mu$  və  $\pi$  üçün alırıq:

$$\mu = \frac{c_2 + c_0 - \sqrt{(c_2 - c_0)^2 - c_1^2}}{2}, \quad (4.24)$$

$$\pi = -\sqrt{\kappa} \xi - \frac{c_1}{2\sqrt{\kappa}} \quad (4.25)$$

Burada, eyni zamanda

$$\kappa = \frac{c_2 - c_0 + \sqrt{(c_2 - c_0)^2 - c_1^2}}{2}, \quad (4.26)$$

$$\sqrt{\kappa} = -\kappa_1 - \kappa_2, \quad (4.27)$$

$$\kappa_{1,2} = -\frac{1}{2} \left( \sqrt{\kappa} \pm \frac{c_1}{2\sqrt{\kappa}} \right). \quad (4.28)$$

Aldığımız ifadələri nəzərə alaraq dalğa funksiyası  $\varphi(\xi), \pi$  və  $\tau$  üçün aşağıdakı ifadələri alırıq:

$$\psi = \varphi(\xi)y = (1 - \xi)^{-\kappa_1} (1 + \xi)^{-\kappa_2} y, \quad (4.29)$$

$$\pi = (\kappa_1 + \kappa_2)\xi + \frac{c_1}{2(\kappa_1 + \kappa_2)}, \quad (4.30)$$

$$\bar{\tau} = 2(\kappa_1 + \kappa_2 - 1)\xi + \frac{c_1}{\kappa_1 + \kappa_2}, \quad (4.31)$$

$$\lambda = \frac{c_2 + c_0 - \sqrt{(c_2 - c_0)^2 - c_1^2}}{2} + \kappa_1 + \kappa_2.$$

Aldığımız ifadələri (4.14) tənliyində nəzərə alsaq, tənliyimiz aşağıdakı şəkllə düşər:

$$jk(1 - \xi^2)y'' + \left[ 2(\kappa_1 + \kappa_2 - 1)\xi + \frac{c_1}{\kappa_1 + \kappa_2} \right] y' + \lambda y = 0.$$

Bu tənliyi Yakobi çoxhədliləri üçün aşağıdakı ikinci tərtib differensial tənliklə müqayisə edək:

$$(1 - x^2)\bar{y}'' + [\beta - \alpha - (\alpha + \beta + 2)x]\bar{y}' + n(n + \alpha + \beta + 1)\bar{y} = 0.$$

Burada,  $\bar{y} = P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$  hiperhəndəsi  ${}_2F_1$  funksiyaları ilə

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(x) = \frac{(\alpha+1)_n {}_2F_1}{n!} \left( -n, n+\alpha+\beta+1; \frac{1-x}{2} \right), \quad \alpha; \beta \neq -1/2,$$

kimi təyin olunan Yakobi çoxhədliləridir və

$$\alpha + \beta = -2(\kappa_1 + \kappa_2), \quad \alpha + \beta = \frac{c_1}{\kappa_1 + \kappa_2}.$$

Sadə hesablamalardan sonra harmonik ossilyatorun enerji spektri üçün aşağıdakı ifadəni alırıq:

$$E \equiv E_n^{gQU} = \sqrt{\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{g^2}{a^2\omega^4}}} \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_0 a^2} (n^2 + n + 1) - \frac{m_0 \omega^2 a^2}{2} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{4g^2}{\omega^4 a^2}} \right) \quad (4.32)$$

Stasionar halların dalğa funksiyaları isə aşağıdakı formada olar:

$$\psi \equiv \psi_n^{gQU}(x) = c_n^{gQU} \left( 1 - \frac{x}{a} \right)^{-\kappa_1} \left( 1 + \frac{x}{a} \right)^{-\kappa_2} P_n^{(-2\kappa_1, -2\kappa_2)} \left( \frac{x}{a} \right). \quad (4.33)$$

Burada,  $c_n^{gQU}$

$$c_n^{gQU} = \frac{1}{2^{\sqrt{\kappa} + \frac{1}{2}}} \sqrt{\frac{(2n+2\sqrt{\kappa}+1)\Gamma(n+2\sqrt{\kappa}+1)n!}{a\Gamma(n-2\kappa_1+1)\Gamma(n-2\kappa_2+1)}} \quad (4.34)$$

normallaşma faktoru olub, Yakobi çoxhədlilərinin ortoqonallıq şərtindən aşağıdakı kimi təyin edilir:

$$\int_{-1}^1 (1-x)^\alpha (1+x)^\beta P_m^{(\alpha, \beta)}(x) P_n^{(\alpha, \beta)}(x) dx = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2n+\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{\Gamma(n+\alpha+\beta+1)n!} \delta_{mn}.$$

Beləliklə, biz artıq baxılan konfaynment məsələsini xarici qravitasiya sahəsinin təsiri altında dəqiq həll edərək, bu kvant sisteminin stasionar hallarda həm

$E_n^{gQU}$  enerji spektrinin (4.32) ilə ifadə olunan, həm də  $\psi_n^{gQU}(x)$  dalğa funksiyasının (4.33) ilə ifadə olunan aş-

kar şəkillərini tapdıq. Sonuncu bölmədə isə, bu ifadələrin mümkün limit və xüsusi hallarına qısaca olaraq nəzər salacağıq.

## 5. MÜMKÜN LİMITLƏR VƏ XÜSUSİ HALLAR

Əvvəlki bölmədə də qeyd etdiyimiz kimi, biz ilkin olaraq tədqiq etdiyimiz Qora-Uilyams kinetik enerji operatoru ilə ifadə olunan kvant harmonik ossilyatoru üçün xarici qravitasiya sahəsinin təsiri altında uyğun Şredinger tənliyinin dəqiq ifadəsini yazdıq və bu modelin effektiv kütləsinə koordinatdan asılı olaraq götürməklə və onun aşkar ifadəsini daxil etməklə bu tənliyi dəqiq həll etdik. Effektiv kütlənin koordinatdan asılı analitik ifadəsi sayəsində ossilyator modelimiz hər iki tərəfdən konfaynment effektinə tabe oldu. Tənliyi həll edərkən, məqsədə nail olmaq üçün Nikiforov-Uvarov metodundan istifadə etdik. Son nəticə olaraq aldıq ki, xarici qravitasiya sahəsinin təsiri altında olan kvant harmonik ossilyatorunun stasionar hallarının enerji spektri  $E_n^{gQU}$  enerji spektrinin (4.32) ilə,  $\psi_n^{gQU}(x)$  dalğa funksiyaları isə (4.33) ilə ifadə olunurlar. Biz, əslində, bu məqalədə dörd enerji spektri və dörd də dalğa funksiyaları analitik ifadələri təqdim etmişik. Bunlar, kanonik yanaşmada qeyri-relyativistik xətti harmonik ossilyatorun (2.8) ilə ifadə olunan enerji spektri  $E_n^0$ , eyni ossilyatorun xarici qravitasiya sahəsinin təsiri altında (2.6) ilə ifadə olunan enerji spektri  $E_n^g$ , Qora-Uilyams kinetik enerji operatoru ilə ifadə olunan kvant harmonik ossilyatorunun (3.5) ilə ifadə olunan enerji spektri  $E_n^{QU}$  və eyni ossilyatorun xarici qravitasiya sahəsində (4.32) ilə ifadə olunan enerji spektri  $E_n^{gQU}$ -dur, və əlbəttə ki, uyğun dalğa funksiyaları da (2.9) ilə ifadə olunan  $\psi_n^0(x)$ , (2.7) ilə ifadə olunan  $\psi_n^g(x)$ , (3.6) ilə ifadə olunan  $\psi_n^{QU}(x)$  və (4.33) ilə ifadə olunan  $\psi_n^{gQU}(x)$ -dir. Biz bu bölmədə qısaca olaraq qeyd etmək istəyirik ki, bu modellər arasında limit münasibətləri və xüsusi hallar mövcuddur. Əvvəlcə qeyd edək ki, (4.32) ilə (3.6) arasında çox asan xüsusi hal münasibəti mövcuddur. Belə ki, bu ifadələr hər ikisi  $n$ -dən asılı olaraq qeyri-ekvidistantdır,

$$E_n^{gQU}|_{g=0} = E_n^{QU},$$

yəni,  $g = 0$  olduqda, və ya xarici qravitasiya sahəsi yox olduqda, (4.32) ilə ifadə olunan enerji spektri (3.6) ilə ifadə olunan enerji spektrini çox asanlıqla bərpa edir. Eyni şeyi dalğa funksiyaları ilə bağlı da qeyd etmək olar. Belə ki,

$$\psi_n^{gQU}(x)|_{g=0} = \psi_n^{QU}(x)$$

Bu xüsusi halın doğruluğu asanlıqla Yakobi və Gegenbauer çoxhədliləri arasındakı münasibət vasitəsilə göstərilə bilər.

Digər tərəfdən, (4.32) ifadəsində kökaltı ifadəyə Makloren sırası metodunu tətbiq etməklə göstərmək olar ki,  $a \rightarrow \infty$  zamanı (4.32) enerji spektri (2.6) enerji spektrini tam olaraq bərpa edir, yəni qeyri-ekvidistantlıq aradan qalxır. Dalğa funksiyasının da limiti buna oxşar qaydada, lakin Yakobi və Ermit çoxhədliləri arasında limit münasibəti və qamma funksiyalar üçün Stirlinq approksimasiya metodundan istifadə etməklə göstərilə bilər,

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \psi_n^{gQU}(x) = \psi_n^g(x)$$

Beləliklə, sonda qeyd etmək istəyirik ki, biz qarşımıza qoyduğumuz məqsədə nail olduq, yəni Qora-Uilyams kinetik enerji operatoru ilə ifadə olunan kvant harmonik ossilyatoru üçün xarici qravitasiya sahəsinin təsiri altında dəqiq həlləri tapdıq və onların mümkün limitlərini və xüsusi hallarını qısaca olaraq analiz etdik. Məqalənin giriş hissəsində bu tip xarici sahələrin müxtəlif fiziki sistemlər üçün əhəmiyyətini qeyd etmişdik. Son olaraq bildirmək istəyirik ki, bu əhəmiyyət, əldə olunan həllər dəqiq analitik ifadəyə malik olduqda, daha da artır ki, biz də burada kvant sisteminin dəqiq həllərini almışıq.

- 
- [1] A. Cetoli and C.J. Pethick. 2012, Phys. Rev. D, 85 064036.
- [2] M.N. Berberan-Santos, E.N. Bodunov, L.Pogliani. J. Mathematical Chemistry, 2005, 37 101-115.
- [3] R.Yakup, S.Dulat, K. Li, M. Hekim. International Journal of Theoretical Physics, 2014, 53 1404-1414.
- [4] Geusa de A. Marques and V. B. Bezerra. Journal of Physics, 2005, 35 1096-1098.
- [5] B. Latosh. Physics of Particles and Nuclei, 2020, 51 859-878.
- [6] M. Campiglia, R. Gambini. J. Pullin. 2008, AIP Conf. Proc., 2008, 977 52-63.
- [7] N. Gräfe and H. Dehnen. International Journal of Theoretical Physics, 1976, 15 393-409.
- [8] E.I. Jafarov and A.M. Mammadova. On the exact solution of the confined position-dependent mass harmonic oscillator model under the kinetic energy operator compatible with Galilean invariance, Azerb. 2020, J. Phys. Fizika, 26, 31-35.
- [9] A.M. Mammadova. AJP Fizika, 2021, 27, 33-39.
- [10] R.F. Lima, M. Vieira, C. Furtado, F. Moraes and C. Filgueiras. Yet another position-dependent mass quantum model, J. Math. Phys., 2012, 53 072101.
- [11] A.F. Nikiforov and V.B. Uvarov. Special Functions of Mathematical Physics (Birkhauser, Basel, 1988).

**A. M. Mammadova**

**EXACT SOLUTION OF THE QUANTUM HARMONIC OSCILLATOR DESCRIBED BY GORA-WILLIAMS KINETIC ENERGY OPERATOR IN THE EXTERNAL GRAVITATIONAL FIELD**

An exactly-solvable confined model of a nonrelativistic quantum harmonic oscillator is proposed in the framework of the formalism of an effective mass varying with position. Exact expressions for the wavefunctions of the considered oscillator model have been obtained by solving the corresponding Schrödinger equation. When the effective mass varies by position, in order to preserve the Hermitian properties of the harmonic oscillator model, the Gora-Williams kinetic energy operator is employed, and it is shown that the wavefunctions of stationary states of the studied quantum system are described by Jacobi polynomials, and the energy spectrum is discrete, non-equidistant, finite and depends on the external gravitational field. In the special case, when the external gravitational field equals to zero, the model under the study reduces into a confined model of a nonrelativistic quantum harmonic oscillator, the wavefunctions of which are described by Gegenbauer polynomials, and in the limit case, when the confinement parameter  $a \rightarrow \infty$ , the quantum system under study completely restores the nonrelativistic quantum harmonic oscillator in the external field, wavefunctions of stationary states of which are described by Hermite polynomials.

**A. M. Мамедова**

**ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ КВАНТОВОГО ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА ВО ВНЕШНЕМ ГРАВИТАЦИОННОМ ПОЛЕ ОПИСЫВАЕМОГО ОПЕРАТОРОМ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ ГОРА-УИЛЬЯМС**

Предлагается точно-решаемая конфайнментная модель нерелятивистского квантового гармонического осциллятора в рамках формализма эффективной массы, меняющейся в зависимости от координаты. Точные выражения для волновых функций рассматриваемой модели осциллятора были найдены путем решения соответствующего уравнения Шредингера. При изменении эффективной массы в зависимости от координат, для сохранения свойства эрмитовости модели гармонического осциллятора, использовался оператор кинетической энергии Гора-Уильямс. Показано, что волновые функции стационарных состояний исследуемой квантовой системы описываются многочленами Якоби, а энергетический спектр является дискретным, не-эквидистантным, конечным и зависит от внешнего гравитационного поля. В частном случае, когда внешнее гравитационное поле равно нулю, исследуемая модель превращается в конфайнментную модель нерелятивистского квантового гармонического осциллятора, волновые функции которой описываются многочленами Гегенбауэра. В предельном случае конфайнментного параметра  $a \rightarrow \infty$ , исследуемая квантовая система полностью восстанавливает нерелятивистский квантовый гармонический осциллятор во внешнем поле, волновые функции стационарных состояний которого, описываются многочленами Эрмита.

*Qəbul olunma tarixi: 18.10.2021*

## METAL-OKSİD NANOHISSƏCİKLƏRİ İLƏ MODİFİKASIYA OLUNMUŞ TERMOPLASTİK POLİMER ƏSASLI NANOKOMPOZİTLƏRİN FOTOLÜMİNESSENSIYA VƏ ELEKTRET XASSƏLƏRİ

A.M. RƏHİMLİ

*Bakı Dövlət Universiteti,*

*Azərbaycan, Bakı ş., AZ-1148, Z.Xəlilov küç., 23*

*e-mail: [rahimli.almara@gmail.com](mailto:rahimli.almara@gmail.com)*

Məlumdur ki, polimer matrisə lüminessensiya, maqnit, fotovoltaik, fotorezistor və digər aktiv xassələrə malik dolduruların daxil edilməsilə nanokompozitin aktiv xassələri də dəyişə bilər. Lakin metal oksid nanohissəcikləri ilə modifikasiya edilmiş polimer əsaslı nanokompozitlərin qeyd edilən xassələrinin sistemli şəkildə təhlili tam olaraq aparılmadığı üçün, bu istiqamətdə tədqiqatı davam etdirmək həm təcrübə həm də nəzəri cəhətdən olduqca vacibdir. Təqdim olunan məqalə oksid nanohissəcikləri ilə modifikasiya olunmuş termoplastik polimer əsaslı nanokompozitlərin alınması və fotolüminessensiya və elektret xassələrinin tədqiqinə həsr edilmişdir.

**Açar sözlər:** nanokompozit, nanohissəciklər, elektret, fotolüminessensiya

**PACS:** 42.70.Jk, 78.55.-m, 81.07.Nb

Son zamanlar üzvi polimerlər və qeyri-üzvi materiallar əsasında olan yeni polimer nanokompozit materialların elektretlərin yaradılmasında istifadəsi geniş tətbiq olunmağa başlamışdır. Elektretlər güclü elektrik sahəsinə məruz qoyulduqdan sonra, elektrik polyarizasiyasını uzun müddət saxlamaq qabiliyyətinə malik olan materiallardır. Polyarizasiyadan sonra material daxilindəki müsbət yük sahə istiqamətində, mənfi yük isə sahənin əks istiqamətində yerini dəyişir. Elektretlərin bir ucunun mənfi digərinin isə müsbət olmasına baxmayaraq yekun elektretlər neytral olurlar. Elektretlərin səthində, əsasən səthdə makroskopik elektrostatik yüklərin, yaxud elektretin daxilində mövcud olan polyar qrupların yekun istiqamətlənməsi nəticəsində yaranan makroskopik elektrik sahəsi mövcud olur. Polimerlər, dielektrik və elektret materialları kimi, geniş istifadə imkanlarına malikdir. Polimer elektretlər yüngül çəkisinə, böyük kvazi-pyzeoelektrik həssaslığına və yüksək elastiklik xassəsinə görə böyük tətbiq imkanlarına malikdir.

Elektretlər dielektrik fizikası, materialşünaslıq, sensor mühəndisliyi, texnologiya və tibb kimi sahələrdə tətbiq imkanına malikdir [1-3]. Səthi potensialın qiyməti və elektretlərin yaşama müddəti, onların praktik tətbiqinin mümkünlüyünə səbəb olan ən vacib parametrlərdəndir. Son zamanlar taclı boşalma ilə yüklənmiş polimer təbəqələrinin səth potensialının sönmə proseslərinin tədqiqinə maraq xeyli artmışdır [4-8], lakin elektretlərin hazırlanmasında əsas material kimi istifadə olunan polimerlər bəzən onların praktik tətbiqində vacib olan lazımı xüsusiyyətlərə malik olmurlar. Bu səbəbdən, müxtəlif tətbiq sahələrinin tələblərini ödəyən çoxfunksiyalı elektret materialların alınması üçün, polimerlərə müxtəlif təbiətli doldurucuların daxil edilməsi məqsədəuyğun hesab olunur. Son bir neçə onillikdə materialşünaslıqda nisbətən yeni bir istiqamət inkişaf etdirilmişdir ki, bu da qeyri-üzvi hissəciklərin müxtəlif polimer matrisələrə daxil edilməsi nəticəsində əldə edilən yeni kompozit materialların tədqiqidir [9]. Bu cür kompozit materiallar polimer elektretlərin xassələrini yaxşılaşdırmaq və ya polimerləri yeni funksiyalarla təmin etmək imkanlarına görə böyük əhəmiyyət kəsb edir

[10, 11]. Bu cür kompozit materialların əsas üstünlükləri onların xassələrinin müxtəlif təbiətli doldurucu, plastifikator, boya və eləcə də digər əlavələrlə modifikasiya edilməsi imkanındır. Avtomobillərdəki elektretlər metal polimer birləşmələrini korroziyadan qoruyur, kompozit komponentlərin və məmulatların adgeziyasını artırır, möhkəmliyi yaxşılaşdırır və kompozit əmələ gəlməsinin texnoloji effektivliyini yüksəldir [12]. Elektretlərin, alınma üsulundan asılı olaraq, müxtəlif növləri mövcudur. Homoelektret, termoelektret, krioelektret və mexanoelektretlərin yükləri qalıq polyarlaşmanın hesabına yaranır. Yüklərinin əsasını injeksiyalanmış yüklər təşkil edən elektretlər isə radiasiya elektretləri, texno və elektroelektretlər adlanır. Bu növ elektretlər polimer dielektriklərin elektron dəstəsi ilə şüalandırılması nəticəsində eləcə də, taclı boşalmanın təsiri altında polyarlaşma prosesi zamanı polimer boşalma sahəsində yerləşdirildikdə və s. alınır. Bu halda polimer dielektrikin elektroneytrallığı pozula bilər və o, həm yüklənə, həm də polyarlaşa bilər [10]. Polimerlərin əksəriyyəti polyarlaşmış kovalent rabitələrə malikdir, yəni elektronlar daha çox elektromənfi atomlara tərəf istiqamətlənir. Elektrik sahəsinin təsiri altında nümunədə olan dipollar yerin maqnit sahəsi istiqamətində yönəlməyə çalışan kompasın iynəsinə oxşar şəkildə elektrik sahəsi istiqamətində yönələcəklər. Nəticədə, qeyri-polyar polimerlərlə müqayisədə daha güclü dipol polyarizasiyasına, daha yüksək dielektrik nüfuzluğuna və daha az müqavimətə malik olacaqlar. Bu təsir oriyentasiya və ya dipol polyarlaşma kimi məlumdur.

Dipol polyarlaşması temperaturdan və polimerə tətbiq olunan xarici sahənin tezliyindən asılı olduğu halda, elektron polyarlaşması tezlikdən az və ya çox dərəcədə asılıdır, lakin temperaturdan daha zəif asılılıq göstərir (qeyri-polyar plastiklərin ani polyarlaşması). Həm dipol polyarlaşma, həm də elektron polyarlaşması polimerdə monomerlərin kimyəvi tərkibindən asılıdır. Məsələn, aromatik halqalar kükürd, brom və fenol dielektrik nüfuzluğunu artırır, çünki onlar yüksək polyarlaşma qabiliyyətinə malikdirlər. Bu qanunauyğunluq aromatik halqalardakı  $\pi$  rabitələr üçün də keçərlidir.



Onlar  $\sigma$  rabitələrdən daha çox polyarlaşma qabiliyyətinə və daha yüksək dielektrik nüfuzluğuna malikdirlər. Flüor və xlor kimi yüksək elektromənfiyyətə malik elementlər dielektrik nüfuzluğuna daha güclü təsir göstərilir. Lakin bu, yalnız monomerlərdəki dipol momentləri bir-birini kompensasiya etmədiyi (söndürmədiyi) təqdirdə doğrudur, məsələn PTFE-də olduğu kimi. Amma polivinil xloridin (PVX) monomerlərindəki C-Cl rabitələri hamısı bir-birinə paralel və elektrik sahəsi istiqamətində yönəlir ki, bu da öz növbəsində polyarlaşmanı artırır. Bu əlavə effekt və C-Cl rabitələrinin güclü dipol momenti PVX-nın nisbətən yüksək dielektrik nüfuzluğunu izah edir ( $\epsilon \approx 4$ ).

Dielektrik nüfuzluğuna polimerin molekulları və ya polimerin monomerləri tərəfindən tutulmayan həcm (sərbəst həcm) də təsir göstərir. Polimerlərin oriyentasiyasına (kristallaşmasına) mane olan qruplar sərbəst həcmi artırır, bu isə vahid həcmdə polyarlaşan qrupların sayını azaltdığı üçün, dielektrik nüfuzluğunun qiymətini azaldır. Bu, həmçinin dielektrik nüfuzluğu təxminən birə bərabər olan hava ilə doldurulmuş boşluqlara da aiddir. Polyar əlavələr isə tamamilə əks təsir göstərir, yəni dielektrik nüfuzluğunu artırır. Çox effektiv əlavələr isə karbon və TiO<sub>2</sub> kimi yüksək dielektrik nüfuzluğuna malik olan qeyri-üzvi dolduruculardır. TiO<sub>2</sub> nanohissəciklərinin dielektrik nüfuzluğu da polyar polimerdən bir neçə dəfə çox olduğuna görə, onların polimer matrisəyə daxil edilməsi hesabına alınan kompozit strukturda onlar yeni xassələrə malik ola bilərlər. Nanokompozitin dielektrik xüsusiyyətləri matrisin və nanohissəciyin dielektrik nüfuzluğundan asılı olduğu üçün, TiO<sub>2</sub> nanohissəcikləri üzvi və qeyri-üzvi hibrid materiallarda doldurucu kimi sistemin dielektrik nüfuzluğunun qiymətini yüksəldə bilər. Ona görə də, yüksək dielektrik nüfuzluğuna malik TiO<sub>2</sub> nanohissəcikləri daxil edilmiş polimer əsaslı nanokompozitlərin polyarlaşması zamanı komponentlərin dielektrik nüfuzluqlarının qiymətlərindəki fərq hesabına onlarda miqrasiya polyarlaşmasına ciddi təsir edə bilər. Bu səbəbdən ədəbiyyatda TiO<sub>2</sub> nanohissəcikləri doldurucu qismində istifadə edilməklə müxtəlif növ kompozitlərin alınması geniş yayılmışdır [15, 16]. Bu tip kompozit materiallar termoplastik matrisin və matris daxilində paylanmış metal oksid hissəciklərinin aktiv xassələrini özündə birləşdirir. Bu materiallar pyezo- və piroelektrik və qeyri-xətti optik xassələrinə görə elektronika, sensor və fotoniklərdə öz tətbiqini tapmışdır [17-19].

Verilmiş işdə [15], həm təmiz polimid (PI) təbəqəsinin, həm də PI/TiO<sub>2</sub> nanokompozit təbəqələrinin səth potensialının zamandan asılı olaraq dəyişmə qanunauyğunluqları müxtəlif gərginlik və müxtəlif zaman intervallarında aparılmış taclı boşalma proseslərindən və idarə olunan mühit altında iynə ilə işləyən bir elektrod sistemi istifadə edərək tədqiq edilmişdir. TiO<sub>2</sub> nanohissəciklərinin fərqli qatılıqları ilə PI əsaslı nanokompozitlərinin səth potensialının təmiz PI təbəqələrindən daha sürətlə azaldığı müəyyən edilmişdir. Verilmiş işdə [16], TiO<sub>2</sub> nanohissəciklərinin konsentrasiyasının PP kompozit təbəqələrinin elektret xassələrinə təsiri öyrənilmişdir. PP matrisində TiO<sub>2</sub> nanohissəciklərinin konsentrasiyasının artması ilə elektretlərinin səth potensialının qiymətini azaltdığı müşahidə edilmişdir.

Digər bir maraqlı işdə [20], kimyəvi cəhətdən müxtəlif olan iki komponentdən ibarət olan heterostrukturların - müxtəlif konsentrasiyalarda TiO<sub>2</sub> nanohissəcikləri əlavə olunmuş polilaktik turşunun (PLA) deqradasiyaya uğraya bilən polimerlərinin elektret xüsusiyyətləri tədqiq edilmişdir. Hissəciklərin matrisə daxil edilməsilə səth potensialının qiymətini artdığı və taclı boşalmanın təsiri altında polyarizasiyadan asılı olmayaraq materialların elektret xassələrinin yaxşılaşdığı aşkar edilmişdir. Ən stabil elektret xassəsi müsbət yüklənmiş TiO<sub>2</sub> nanohissəciklərinin 4% həcmi miqdarına uyğun kompozit nümunələr üçün müşahidə edilmişdir.

Polimerlərin və polimer kompozitlərin yaxşı dielektrik xassələri (xüsusi elektrik müqaviməti, elektrik möhkəmliyi) onların yüksək gərginliklə işləyən maşınlarda, kondensatorlarda, generatorlarda, elektron qurğularda izolyasiya materialları kimi potensial tətbiq sahələrini genişləndirir. Bundan əlavə, polimerlər əsasında geniş fiziki-kimyəvi xüsusiyyətlərə malik materialların alınması onlardan mikroelektronika və radiotexnikada konstruksiya materialı kimi geniş istifadə imkanları açır. Məsələn, mikrosistemli texnikada yüksək xüsusi tutuma malik müxtəlif tipli kondensatorlar tələb olunur və buna köynəkləri arasındakı polimer təbəqəli izolyatorların dielektrik nüfuzluğunun və işçi gərginliyinin artırılması hesabına nail olunur.

Digər bir işdə [21], ZnO və CuO hissəciklərinin müxtəlif (0 %, 2 % və 4 %) miqdarlarına uyğun olan PP kompozit nümunələrinin səth potensialının zamandan asılı olaraq azalması qanunauyğunluğu tədqiq edilmişdir. ZnO və CuO hissəciklərinin müxtəlif konsentrasiyalarına (0 %, 2 % və 4 %) uyğun PP kompozit nümunələrinin normallaşdırılmış səth potensialının taclı boşalmanın təsiri altında polyarizasiyadan asılı olmayaraq təmiz PP təbəqələrinə nəzərən daha sürətlə söndüyü müəyyən edilmişdir. Bu, ZnO və CuO hissəciklərinin PP matrisinə daxil edilməsi ilə keçiriciliyin artması və nəticədə həcmdə daha asan və daha sürətli yükdaşınma ilə izah oluna bilər. Həmçinin, PP kompozitlərinin temperatur səth potensialının zamandan asılılıq ayrılmasının temperaturun yuxarı qiymətlərinə doğru sürüşdüyü aşkar edilmişdir. Bu isə onunla izah olunur ki, PP matrisinə ZnO və CuO hissəciklərinin daxil edilməsi polimer matrisdə yeni və daha yüksək enerjili yük tələlərinin yaranmasına gətirib çıxarır ki, bu da ayrılmanın maksimumunun temperaturun yüksək qiymətlərinə doğru sürüşməsinə səbəb olur.

Termoplastik polimerlərin yük saxlama qabiliyyətinin artırılması bir neçə üsulla aparıla bilər: (I) yüklənmə rekombinasiyası yolunu əhəmiyyətli dərəcədə uzatmaq üçün polimer matris boyunca uzanmış məsələlər şəklində maneələrin yaradılması; (II) polimer zəncirinin uyğunlaşdırılmış kimyəvi modifikasiyası və (III) yük tələlərinin yaradılması üçün funksional qrupların əlavəsi [22]. Təcrübə olaraq müəyyən edilmişdir ki, polimer matrisə dispers doldurucular daxil etdikdə, kompozit materiallarda yeni quruluş elementləri yaranır ki, bu elementlər yükdaşıyıcılar üçün tələ rolunu oynayır, bu isə öz növbəsində dielektriklərin elektret xassələrinin dəyişməsinə səbəb olur [19,20].

Müəlliflər [22] üç müxtəlif polimer təbəqəsinin üst molekulyar quruluşundakı dəyişikliyin və termiki işlənmənin parametrlərinin onların elektret xassələrinin

formalaşmasında rolunu araşdırmışlar. Taclı boşalmanın təsiri altında üç müxtəlif FEP, PETP və PP polimer təbəqələrinin elektret xassələrinə temperaturun təsiri (polimerə elektrik sahəsinin təsirindən əvvəl isidilib daha sonra isə soyudulması ilə) termostimullaşdırılmış depolyarizasiya (TSD) və səthi-potensial ölçmələri vasitəsilə araşdırılmışdır. Soyudulmadan əvvəl termik işlənmə temperaturunun və eləcə də soyuma temperaturunun yük halının stabilliyinə və sonra TSD pikinin temperaturuna təsiri öyrənilmişdir. Polimer təbəqələrin kristallik dərəcəsi və kristallitlərin ölçüsü soyudulmadan əvvəl və sonra XRD difraktoqramı vasitəsilə ölçülmüşdür. Nümunələrin elektret xassələrindəki dəyişiklik keyfiyyətcə morfoloji dəyişikliklər vasitəsilə izah edilə bilər. Bundan əlavə, TSD spektrlərində 100-130°C intervalında yerləşən piklər, ehtimal ki, həm nümunənin öz yükdaşıyıcıları, həm də injeksiya olunmuş yük daşıyıcılarının buraxılmasına aid edilə bilər. Poliarizasiya temperaturu artdıqca bu piklərin daha yüksək temperaturlara doğru sürüşməsi də bunu sübut edir. Tədqiqat işlərindən birində [16], taclı boşalmanın təsirinə məruz qalmayan nümunələrin TSD spektrləri çəkilmiş və bu zaman yalnız aşağı temperaturlarda piklər müşahidə edilmişdir. Həmçinin, qeyd etmək lazımdır ki, yüksək temperaturlarda elektrik sahəsi təsiri altında dipol relaksasiya piklərinin intensivliyi azalır. Bu cür effektin səbəbi təcrübələrdə taclı boşalmanın gərginliyinin təxminən sabit qalması ola bilər; nəticədə artan sahə intensivliyi (və daha yüksək gərginlik) aşağı cərəyan deməkdir. Bundan əlavə, termik işlənmə zamanı nümunələrin qızdırılma sürətinin də onların elektret xassələrinə təsiri təcrübə olaraq müəyyən edilmişdir. Belə ki, qızdırılma sürəti böyük olduqca, nümunə daha qısa müddətdə ərimə temperaturuna çatacaqdır (məsələn, 2-5 dəq.). Relaksasiyanın yavaş olması səbəbindən soyuma bütün molekulyar zəncirlərin təsadüfi oriyentasiyasından və ilkin quruluş elementlərinin tamamilə formalaşmasından əvvəl başlayır. Buna görə dipolların sahə istiqamətində onların oriyentasiyası yarımçıq qalır.

Ədəbiyyat analizindən belə nəticəyə gəlmək olar ki, polimer kompozit materiallar əsasında elektretlərə marağın daima artmasına baxmayaraq, müxtəlif doldurucular əsasında polimer nanokompozitlərin elektret xassələrinin dəyişmə qanunauyğunluqları tədqiqatçılar tərəfindən hələ ətraflı araşdırılmamışdır. Nəticədə, hazırkı dövrdə polimer kompozit elektretlərin istehsal sahəsində praktiki imkanları nəzəri şərhi qabaqlayır. Buna görə də, tərkibində nano ölçülü müxtəlif doldurucular olan polimer əsaslı kompozitlərin poliarlaşma xassələrinin və elektret xassələrinin araşdırılması xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Polimer dielektrlərdə elektret halının öyrənilməsində dielektrlərin quruluşu, elektrofiziki xassələri və həmçinin dielektrikdə baş verən relaksasiya prosesləri vacib amillərdən hesab olunur. Bununla yanaşı, dielektrlərin elektret halı yükün yaşama müddəti, yük sıxlığının temperaturdan və eləcə də poliarlaşma gərginliyindən ( $E_p$ ) asılılığı kimi parametrlərlə xarakterizə olunur. Poliar polimerlərdə uzun müddətli elektret effektinin formalaşması poliarlaşmadan sonra onlarda əmələ gələn və sahənin təsiri kəsildikdən sonra tədricən azalan dipol-oriyentasiya poliarlaşması ilə izah olunur.

Elektretlərə olan maraq polimerlər fizikası və kimyasının sürətli inkişafı ilə əlaqədardır. Praktikada tətbiq edilən elektretlərin demək olar ki, hamısı polimer dielektrlərdən hazırlanmışdır. Verilmiş xüsusiyyətlərə malik elektretlərin alınma tələbatı dielektrlərin elektret halına əsaslanan kifayət qədər çətin görünən fiziki tədqiqatlara təkan vermişdir.

Müəyyən edilmişdir ki, nümunələrin elektret halının tədqiqi üçün kifayət qədər səthi yüklərin mövcudluğu, yük stabilliyi və materialın TSD spektrində xarakteristik piklərin təbiəti ilə əlaqəli üç əsas parametrlərin araşdırılması tələb olunur.

Galop və Callahan [23] göstərmişlər ki, TSD spektrində ən əsas pik şüşələnmə temperaturu ətrafında olmalıdır. Təcrübə olaraq müəyyən edilmişdir ki, bu pik PP-yə müxtəlif təsirlərdən asılı deyil və ardıcıl bir neçə dəfə ölçmələrdə praktik olaraq dəyişmədən təkrarlanır. Həmçinin göstərilmişdir ki, daha yüksək temperaturlarda TSD spektrlərindən daha çox məlumat əldə etmək mümkündür. Yüksək temperaturda termostimullaşdırılmış cərəyanların qanunauyğunluqlarından asılı olaraq elektret halının formalaşma mexanizmləri və elektret halının xüsusiyyətləri haqda məlumat əldə etmək olar [1, 24-26].

Elektretləri keyfiyyətcə xarakterizə edən bir çox parametrlər mövcuddur: onlardan ən başlıcası yükün yaşama müddəti ( $\tau \sim 3-10$  il) və effektiv səthi yüklərin sıxlığıdır ( $\sigma_e \sim 10^{-5} - 10^{-3} \text{ Kl/m}^2$ ) [27]. Xarici amillərin təsiri kəsildikdən sonra, yüklənmiş və eləcə də poliarlaşmış polimerlər əsasən metastabil halda olur. Poliarlaşmış halın relaksasiya müddəti olduqca uzun ola bilər, çünki polimerin stabil hala qayıtması üçün yük daşıyıcılar-dipollar potensial çəpəri aşmalıdır. Bu müddət ərzində dipollar  $\tau_d$  zamanından asılı olaraq yenidən istiqamətlənirlər (həcmi poliarlaşma yox olur) və elektret rütubətli mühitdə olduqca ətraf mühitin daxili keçiriciliyinin hesabına daxili elektrik sahəsinin neytrallaşması baş verir. Bu səbəbdən, daha uzun yaşama müddətinə malik elektretlər əldə etmək üçün, kiçik mütəhərrikiyə malik dipollara daha dərin yük tələləri olan və elektrik keçiriciliyi aşağı olan materiallar seçmək lazımdır.

Elektretlərin keçiriciliyi və ətraf mühit amilləri də yüklərin stabilliyinə təsir edən faktorlardandır [29]. Qeyri-tarazlıqda olan relaksasiya proseslərinin polimerlərin elektroaktiv xassələrinə təsiri də daim diqqət mərkəzindədir və çoxsaylı tədqiqatçılar tərəfindən aparılan işlərin əsas mövzusu olaraq qalır. Polimer elektretlər üçün Eguçi və Gutman [28] təcrübə olaraq sübut etmişlər ki, elektretlər mühitin rütubətinə olduqca həssasdırlar. Yalnız CaCl və P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> vasitəsilə tamamilə quru saxlanılmış nümunələrin yük saxlama qabiliyyəti yaxşı olur. Rütubətliliyin 80% dən aşağı halında, elektretlərin quruduqca itirdikləri yükü geri qazandıqları müəyyən edilmişdir. Elektret halının müvəqqəti itirilməsi havanın tərkibində olan suyun elektretin səthində təbəqə əmələ gətirməsi və tədricən onun daxilindəki boşluqlara adsorbsiyası ilə izah olunur. Elektretlərin uzun müddət rütubətli mühitlərdə saxlanması nəticəsində havanın tərkibində olan su elektretin daxilindəki boşluqlara sızır və elektretdə qalıcı zərərə səbəb olur. Bu isə, öz

növbəsində polimerin səthi elektrik keçiriciliyinin artmasına və səthdə olan yüklərin relaksasiyasına gətirib çıxarır.

Digər bir işdə [30] müəlliflər tərəfindən kristallaşmanın temperatur zaman şəraitinin elektrik sahəsinin təsiri altında polyarlaşdırılmış polipropilen və kadmiyum sulfid əsasında nanokompozitlərinin quruluşuna və xassələrinə təsiri araşdırılmışdır. Kristallaşmanın temperatur zaman şəraitinin PP/CdS əsaslı nanokompozitlərinin quruluşuna, möhkəmliyinə və fotolüminessensiya xassələrinə təsiri araşdırılmış və kristallaşmanın temperatur zaman şəraitinin və digər texnoloji parametrlərin polimerin üstmolekulyar quruluşunu, kompozitlərin komponentləri arasındakı fazalararası qarşılıqlı təsiri və fazalararası təbəqənin qalınlığını dəyişdiyi müəyyən edilmişdir. Məlum olmuşdur ki, temperatur-zaman rejimlərindən biri olan yavaş soyudulma rejimində əldə edilən nanokompozitlərin lüminessensiya spektrlərinin intensivliklərinin artması, yeni CdS lüminessensiya mərkəzlərinin həyəcanlanmasına səbəb olan kompozitlərin komponentlərinin fazalararası qarşılıqlı təsirin artması ilə bağlıdır.

Polimer dielektriklərdə elektret effektinin tədqiqi yük halı və molekulyar səviyyədə yükün daşınması haqda informasiya əldə etməyə imkan verir. Təcrübə olaraq müəyyən edilmişdir ki, polimer dielektriklərin elektret halının formalaşmasında polimerin üst molekulyar quruluşu çox mühüm rol oynayır. Polimerlərin elektret xassələrinin onun elektrofiziki xassələrindən, üst molekulyar quruluşundan asılılığının müəyyənləşdirilməsi verilmiş tətbiq sahəsi üçün optimal polimer materialının seçilməsi zamanı xüsusi praktik əhəmiyyət kəsb edir [31]. Polyarlaşma şərtləri, polimer matrisə daxil edilən doldurucunun təbiəti, dielektrikin quruluşu və bu kimi digər amillər polimerlərin elektret xassələrinin formalaşmasında vacib rol oynayır. Bu istiqamətdə görülən işlər, müxtəlif üstmolekulyar quruluşlara malik polimerlərdə elektrik yüklərinin stabilləşməsinə və relaksasiya xassələrinin tədqiqinə təkan olmuşdur. Beynəlxalq simpoziumlarda bu istiqamətdə aparılan işlərə həsr olunmuş, elektretlər haqqında onlarla məqalə məruzə edilmişdir [32].

Verilmiş işdə [33] əridilmiş polipropilen (PP) liflər taclı boşalmanın təsiri altında elektrik sahəsində işlənməyə məruz qalmışdır. Liflərin elektret halı daha sonra termostimullaşdırılmış depolyarizasiya cərəyanı (TSDC) ilə tədqiq edilmişdir. Taclı boşalmanın təsiri altında polyarlaşmadan sonra PP liflərinin elektret halının Maksvell-Vaqner polarizasiyası və yük tələlərinin birgə təsirinə nəticəsi olduğu göstərilmişdir. Maksvell-Vaqner polyarlaşması, elektron şüa və ya taclı boşalmanın təsiri altında polyarizasiya kimi xarici mənbələrdən yüklü hissəciklər injeksiya olunmuş polimer nümunələr və liflər üçün xarakterikdir. Aktivləşmə enerjisi və bu proseslər üçün relaksasiya müddətləri müəyyən olunmuş və yük tələlərinin xüsusiyyətləri hesablanmışdır. Taclı boşalmanın təsiri altında polyarlaşdırılmış PP liflərində əmələ gələn elektret halının daha uzun müddətli (bir neçə ay) olduğu müəyyən edilmişdir. Termik işlənmə temperaturu və elektrik sahəsinin intensivliyinin PP liflərindəki elektret halına təsirinə dair analizi nəticəsində, sənaye istehsalı üçün PP əsaslı elektretin optimal texnoloji rejimləri təyin edilmişdir.

[16]-da göstərilmişdir ki,  $\text{TiO}_2$  nano hissəcikləri Pİ matrisində paylandıqda, nanokompozitlərdə iki cür mexanizmin baş verməsi mümkündür. Birincisi, toplu olaraq  $\text{TiO}_2$  nanohissəciklərinin daxil edilməsi ilə meydana gələn keçirici şəbəkə səbəbindən elektronlar asanlıqla elektrik sahəsinin təsiri altında nanokompozitlərə injeksiya oluna bilərlər.  $\text{TiO}_2$  nanohissəcikləri sərbəst həcmi azaltmaq üçün sərbəst həcmi və nisbətən böyük tələləri tuta bilər. İkincisi, nanohissəciklərin həcmdə paylanması yığılmış elektrik enerjisinin paylanmasına təsir edir və bir elektronun "hot" elektron olma ehtimalı daha aşağı düşür. Beləliklə, nanohissəciklərin həcm boyu bərabər paylanması yüklü hissəciklərlə zəncirlərin birbaşa toqquşmasının qarşısını alır. Həmçinin,  $\text{TiO}_2$  nanohissəciklərinin polimer matrisə daxil edilməsi ilə nanokompozitlərin yaşama müddətinin artdığı müəyyən edilmişdir.

Tərkibində qeyri-üzvi əlavələr olan polimer əsaslı kompozitlərin xassələrinin araşdırılması ilə əldə olunan nəticələr onu deməyə imkan verir ki, bu cür materialların uzun müddətli elektret halı dielektrikin quruluşunun qeyri-bircinsliyi hesabına onun həcmində, komponentləri arasında mövcud olan fazalararası sərhəddin mövcudluğu hesabına formalaşır. Fazalararası sərhəd elektret halının uzun müddət saxlanması ilə yanaşı həmçinin dielektrikin həcmi boyunca Maksvell-Vaqner polyarlaşmasının yaranmasına gətirib çıxarır. Kristallik və amorf fazaların ayrılma sərhəddi olan bu fazalararası sərhəd həmçinin yük toplamaq qabiliyyətinə malik olan tələ rolunu oynayır.

Müəyyən edilmişdir ki, polimer matrisə lüminessensiya, maqnit, fotovoltaiq, fotorezistor və eləcə də digər aktiv xassələrə malik doldurucuların daxil edilməsilə nanokompozitin aktiv xassələri də dəyişə bilər. Aktiv xassələrdəki bu dəyişiklik nanokompozitin fazalararası sərhəddində yığılan yüklərin təsiri ilə hissəciklə matrisə arasındakı qarşılıqlı təsirin dəyişməsi hesabına baş verir [34]. Ona görə də, metal oksidlərinin polimer matrisəyə daxil edilməsi hesabına nanokompozitlərdə fotolüminessensiya, elektret, fotovoltaiq, fotokeçiricilik, maqnit və eləcə də digər xassələrin dəyişdirilməsi mümkündür. Odur ki, ədəbiyyatda metal oksid nanohissəciklərinin polimerə daxil edilməsilə yüksək aktiv xassələrə malik polimer nanokompozitlərin alınması və xassələrinin tədqiqinə dair işlər çox geniş yayılmışdır.  $\text{TiO}_2$  nanohissəciklərinin ən çox yayılmış fazaları - rutil və anataza oksigen vakansiyaları hesabına görünən oblasta düşən geniş lüminessensiya pikinə sahib luminescent maddələrdir [35]. Hər iki faza öz daxili fotolüminessensiya spektrlərinə görə bir-birindən kəskin şəkildə fərqlənir. Rutil kristal, sərbəst eksitonlara aid təqribən 3.0 eV qadağan olunmuş zonanın eninə yaxın dalğa uzunluğunda bir neçə dar fotolüminessensiya zolağı nümayiş etdirir [81]. Digər tərəfdən, 3.2 eV qadağan olunmuş zona eninə malik olan anatazın 2.3eV-də pikə sahib olan geniş bir spektrə malikdir [35].

Digər bir işdə [32],  $\text{TiO}_2$  nanohissəciklərinin konsentrasiyasının onların polipropilen (PP) polimer matrisində 5 % və 10% həcmi miqdarına uyğun olan PPT5 və PPT10 nanokompozitlərinin quruluşuna və fotolüminessensiya xassələrinə təsiri öyrənilmişdir. Fotolüminessensiya intensivliyinin polimer matrisində

titan dioksid nanohissəciklərinin konsentrasiyasının artması ilə artdığı müşahidə edilmişdir. Nanokompozitlərin inensivliyi 450–700 nm intervalda, 400 nm həyəcanlanma dalğa uzunluğunda ölçülmüşdür. TiO<sub>2</sub> nanohissəciklərinin 5% həcmi miqdarına uyğun olan nanokompozitlər üçün lüminessensiya spektrlərinin intensivliyinin, 10% həcmi miqdara uyğun nanokompozitlərlə müqayisədə daha çox olduğu müşahidə edilmişdir. Bu onunla izah olunur ki, nanohissəciklərin polimer matrisədə miqdarının artması onların aqlomerasiyasına gətirib çıxarır. Bu isə lüminessent nanohissəciklərin xüsusi səth sahəsinin kiçilməsinə səbəb olur.

TiO<sub>2</sub> nanohissəciklərinin ölçülərinin (30, 150, 300 və 500 nm) və polimer matrisədəki miqdarının (0%-50%) yekun TiO<sub>2</sub>, maye kristal (MK) və polimer əsaslı nanokompozitlərin fotolüminessensiya xassələrinə təsiri kvant nöqtələri (KN) daxil edilmiş polimer əsaslı nanokompozitlərlə müqayisəli şəkildə araşdırılmışdır [36]. Müəyyən olunmuşdur ki, TiO<sub>2</sub>/MK/polimer sistemi üçün müşahidə olunan fotolüminessensiya spektrlərinin intensivliyi kvant nöqtələri daxil edilmiş polimer kompozitlə müqayisədə təxminən 6 dəfə daha çoxdur. Həmçinin, TiO<sub>2</sub>-nin 0,1 % həcmi miqdarında TiO<sub>2</sub>

nanohissəcikləri və MK/polimer matrisi arasında sinergizm effekti müşahidə edilmişdir ki, bu da düşən işığın gedilən yolunu və kvant nöqtələri ilə qarşılıqlı təsir ehtimalını artırır. Bu isə, öz növbəsində, belə materialların flüorosensiyasının artmasına səbəb olur. Nanohissəciklərin (150 nm) 0,1% miqdarına uyğun kompozitlərdə flüoressensiya xassələri materialın mexaniki xassələrini pisləşdirmədən yaxşılaşır. Lakin, bu effekt nanohissəciyin faiz miqdarının növbəti artımı ilə aradan qalxır. Beləliklə, TiO<sub>2</sub> nanohissəciklərinin polimerdə optimal həcmi miqdarı və ölçüsü müəyyən edilmişdir ki, bu da optik cihazlar üçün innovativ kvant nöqtələri panellərinin istehsalında atılmış mühüm addımdır.

Ədəbiyyat analizi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, polimer matrisə lüminessensiya, maqnit, fotovolttaik, fotorezistor və eləcə də digər aktiv xassələrə malik doldurucuların daxil edilməsilə nanokompozitin aktiv xassələri də dəyişə bilər. Aktiv xassələrdəki bu dəyişiklik nanokompozitin fazalararası sərhəddində yığılan yüklərin təsiri ilə hissəciklə matrisə arasındakı qarşılıqlı təsirin dəyişməsi hesabına baş verir.

- [1] G. Sessler and R. Gerhard-Multhaupt. Electrets: 3rd Ed., Laplacian Press, Morgan Hill, California, USA, 1999.
- [2] N. Kestelman. Electrets in engineering: Fundamentals and applications. Springer, 2000.
- [3] M. Goel. Electret sensors, filters and MEMS devices: New challenges in materials research. Current science, 2005, vol. 85, №4, pp. 443-453.
- [4] J. Giacometti, S. Fedosov and M. Costa. Brazilian J. Phys., 1999, vol. 29, №2, pp. 269-279.
- [5] J. A. Giacometti and O. N. Oliveira. Corona charging of polymers. IEEE Trans. Electr. Insul., 1992, vol. 27, №5, pp. 924-943.
- [6] D. Faust etc. Investigations into the reliability of electrophotography. 1975.
- [7] A. E. Job, J. A. Giacometti, and L. H. Mattoso. Applied Physics Letters, 1998, 72(25), 3279-3281.
- [8] S. Sapiha, J. Cerny and L. Martinu. 1993, The Journal of Adhesion, 42(1-2), 91-102.
- [9] M. Galikhanov, A. Borisova and R. Deberdeev. Russian J. Appl. Chem., 2005, vol. 78, №5, pp. 820-823.
- [10] N. Mohmeyer etc. Additives to improve the electret properties of isotactic polypropylene. Polymer, 2007, vol. 48, pp. 1612-1619.
- [11] C. Reedyk and M. Perlman. The measurement of surface charge. J. Electrochem. Soc., 1968, vol. 115, № 1, pp. 49-51.
- [12] L. Pinchuk etc. Engineering composite electrets material. 11th Int'l. Conf. Composite Materials, 1997, pp. 859-869
- [13] M.A. Ramazanov, A.S. Guseinova. Surface Engineering and Applied Electrochemistry, 2013, 49 (2), p. 97-100.
- [14] G. M. Sessler. Electrets: recent developments. J. Electrostat., 2001, vol. 51-52, p.137-145.
- [15] R. Jourdain etc. New materials for micro-scale sensors and actuators: An engineering review. Materials Sci. and Engineering: R: Reports, vol.56, №1-6, 2007, pp. 1–129
- [16] B. Kulyka etc.. J. Alloys and Compounds, vol. 502, 2010, pp. 24–27,
- [17] J. Zha etc. J. Electrostat., vol. 69, 2011, pp. 255-260.
- [18] A. Viraneva etc. Effect of TiO<sub>2</sub> particle incorporation on the electret properties of corona charged polypropylene composite films. Bulg. Chem. Communications, 2013, vol. 45, №. B, pp. 73-76.
- [19] A. Mills. Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, 1997, 108(1), 1-35
- [20] A. L. Linsebigler. Chemical Reviews, 1995, 95(3), 735-758.
- [21] M. Anpo, Research on Chemical Intermediates, 1989, 11(1), 67-106.
- [22] T. Kazashka and T. Yovcheva. Composite electret's films on the base of the polylactic acid. University of Plovdiv, "Paisii Hilendarski", Scientific studies, Physics, 2013, vol. 38.
- [23] A. Viraneva, T. Yovcheva and M. Galikhanov. Electret properties of PP/ZnO and PP/CuO composite films. IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, 2015, vol. 22, № 3, pp. 1343-1348.
- [24] Xia Zhongfu. Influence of quenching on the charge stability of polymer electrets. 6th International Symposium on Electrets, (ISE 6) Proceedings.
- [25] Thermold Design And Development Inc Wilson Nc. 1981. Final progress report on

- contract DAAK10-79-C-0403 (Thermold design and development, Inc).
- [26] *P.M. Aceeva, G.E. Zaikov.* Горение полимерных материалов. М.: Химия, 1981, 280 с.
- [27] *A.I. Gubkin.* Electrets. Nauka: Moscow, 1978, 13.
- [28] *G.A. Lushcheikin.* Polymer Electrets. Nauka: Moscow, 1976.
- [29] *Y.A. Gorokhvatskii.* Basics of Thermal Depolarization Analysis. Nauka: Moscow, 1981.
- [30] *F. Gutmann.* The Electret. Reviews of Modern Physics, 20(3), 1948, 457–472.
- [31] *A.M. Маггеррамов.* Электрические процессы в технике и химии, 2011, т. 47, №5, с. 60–64.
- [32] *Л. А. Костандов и др.* Способ получения композиционного материала. Х. М. А., Авт. Свид. СССР 763379; Бюл. изобр., №34, 1980, с. 129.
- [33] *S. Bazhenov.* J. Mater. Sci., 1997, v. 32, p. 797–802.
- [34] *A. Kravtsov etc.* Advances in Polymer Technology, 2000, 19(4), 312–316.
- [35] *M. Ramazanov etc.* Acta Physica Polonica A, 2017, 131(6), 1540–1543.
- [36] *N. D. Abazovic etc.* The Journal of Physical Chemistry B, 2006, 110(50), 25366–25370.
- [37] *S. Zhangetc.* Fluorescence enhancement of quantum dots from the titanium dioxide/liquid crystals/polymer composite films. Liquid Crystals, 48(3), 2020, 322–335.

**A.M. Rahimli**

### **PHOTOLUMINESCENCE AND ELECTRET PROPERTIES OF THERMOPLASTIC POLYMER-BASED NANOCOMPOSITES MODIFIED WITH METAL-OXIDE NANO PARTICLES**

It is known that the active properties of a nanocomposite can be changed by introducing various nanosized particles matrix possessing luminescent, magnetic, photovoltaic, photoresistive and other active properties into the polymer. However, due to the fact that the systematic analysis of above-mentioned properties of polymer-based nanocomposites modified with metal oxide nanoparticles is not fully carried out, it is important to continue research in this area, both experimentally and theoretically. The presented article is devoted to the production of thermoplastic polymer-based nanocomposites modified with oxide nanoparticles and the study of photoluminescence and electret properties.

**A.M. Рагимли**

### **ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТЕРМОПЛАСТИЧЕСКИХ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРА, МОДИФИЦИРОВАННЫХ МЕТАЛЛООКСИДНЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ**

Известно, что активные свойства нанокompозита можно изменять, вводя в полимер различные наноразмерные частицы, обладающие люминесцентными, магнитными, фотоэлектрическими, фоторезисторными и другими активными свойствами. Однако в связи с тем, что систематический анализ этих свойств нанокompозитов на основе полимеров, модифицированных наночастицами оксидов металлов не проводился в полной мере, важно продолжить исследования в этой области как экспериментально, так и теоретически. Представленная статья посвящена получению нанокompозитов на основе термопластичных полимеров, модифицированных оксидными наночастицами, а также исследованию фотолюминесцентных и электретных свойств.

*Qəbul olunma tarixi: 26.10.2021*

## GÜNƏŞ BATAREYALARINDA İSTİFADƏ OLUNAN İFRAT NAZİK SİLİSIUM TƏBƏQƏLƏRİNİN PARAMETRLƏRİ

E.Ə. KƏRİMOV

*Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti,*

*Azadlıq pros. 16/21, AZ 1010*

*E-mail: [E.Kerimov.fizik@mail.ru](mailto:E.Kerimov.fizik@mail.ru)*

Günəş elementinin uducu xüsusiyyətə malik olan məsaməli təbəqəsinin optimal qalınlığının olması nəzəri və eksperimental cəhətdən göstərilmişdir. Fotovoltaikada geniş istifadə olunan günəş elementlərinin səthinin uduculuğu, yükdaşıyıcıların rekombinasiyasını təmin etmək məqsədi ilə teksturalaşdırma texnologiyası nəzəri cəhətdən əsaslandırılma tələb edir.

**Açar sözlər:** Günəş enerjisi, spektr, günəş elementi, məsaməli səth, məsamə, fotoelektrik hərəkət qüvvəsi.

**UOT:** 666.9-129

**PACS:** 73.40.Ns, 73.40.Sx, 72.10.-d

Silisiyumun məsaməli səthi elektrokimyəvi aşındırma üsulu ilə alınır. Slanedic elektron mikroskopiyaya, qısa qapanma cərəyanının ölçülməsi, aşındırma müddəti göstərir ki, elektronun diffuziya uzunluğu  $2/3$ -ə bərabər qalınlığa malik məsaməli səth olduqda, günəş elementinin effektivliyi teksturalaşma olmadığı hala nisbətən 30% artır.

Günəş enerjisinin elektrik enerjisinə çevrilməsi gələcəyin energetikasının perspektiv istiqaməti ilə bağlı mühüm elmi-texniki problemdir. Keçən əsrin ortalarından başlayaraq aşqarlanmış yarımkeçiricilərdə, müxtəlif kimyəvi birləşmələrin heterostrukturlarında fotonların təsiri ilə yaranan elektron və deşiklərin ayrılması metodları bu gün də intensiv olaraq tədqiq olunur [1-3].

Günəş elementlərinin (GE) effektivliyinin artırılması rəngarəngliyi arasında işığın əks olunmasının azaldılması məqsədi ilə onların səthinin teksturalaşdırılmasına xüsusi nəzər salağ [4-6]. Belə tip tədqiqatlarda elektrokimyəvi aşındırma üsulu ilə məsaməli səthə malik – məsələn, məsaməli silisiyum səthli (məsamə - Si) GE alınır. Məsamələrin ölçüsü 10-103 nm təşkil edir. Silisiyum təbəqələrinin morfoloqiyasının teksturalaşma ilə dəyişilməsi 10% tərtibində udulma effekti verir – elə bu qədər də GE-nin faydalı iş əmsalının artması müşahidə olunur. Aydın ki, bu göstəricilər orta statistik göstəricilərdir. Təbəqələrin yekun fotoelektrik hərəkət qüvvəsi bir çox fiziki və həndəsi faktorların qarşılıqlı təsirindən asılıdır: elektron və deşiklərin generasiya və rekombinasiya mexanizmləri, günəş şüalanması spektrinin effektiv hissəsinin dalğa uzunluğu, məsaməli təbəqənin topoloji və metrik xarakteristikaları. Təbiidir ki, göstərilən faktorları xarakterizə edən parametrlərin optimal dəstinin olması mümkünlüyünü gözləmək olar. Tam şəkildə belə bir tədqiqatların aparılması haqqında ədəbiyyatda elə bir məlumat olmasa da, ayrı-ayrı parametrlərin rolu barədə çoxlu sayda eksperimental faktlar mövcuddur. Parametrlərin optimal dəstinin seçilməsi haqqında universal təlimatlar yalnız nəzəriyyənin eksperimentlə vəhdətində alınabilir.

Təqdim olunan məqalənin əsas məqsədi  $p-n$  keçidi üzərində məsaməli silisiyum təbəqəsinin, düşən fotonların təsiri altında elektronların deşiklərlə rekombina-

siyası nəzərə alınmaqla, maksimum generasiyasını təmin edən qalınlığının nəzəri qiymətləndirilməsi və nəticələrin eksperimentlə müqayisə edilməsidir.

$n$ - tip yarımkeçiricinin aşqarlanmış qatında  $\hbar\omega$  enerjili,  $\lambda$  dalğa uzunluqlu fotonların əks olunmasını azaldan nanoölçü tərtibində məsamələr mövcuddur. Üst səthdən hesablanan diametr ( $d$ ), məsamələrin hündürlüyü ( $x$ ) və məsamələr arasında olan məsafə ( $l$ )  $\lambda$  ilə eyni tərtibdə olduğundan, anti əksolunma (udulma) effekti reallaşır. Məsaməli təbəqənin  $L$  qalınlığı təxminən yük daşıyıcıların  $L_D$  diffuziya uzunluğuna yəni, onların konsentrasiyasının nəzərəcarpacaq dərəcədə azaldığı ( $e$  dəfə) məsafəyə bərabər götürülməlidir. Əgər  $L > L_D$  olarsa, fotonlar tərəfindən çıxarılan elektronların sayı az, yox əgər  $L < L_D$  olarsa, deşiklərlə rekombinasiya edən elektronların sayı çox olacaqdır. Qarşıya qoyulan məsələ hər iki effektin balanslaşdığı  $x/L_D$  – nisbi məsafəsinə təyin etməkdir.  $L_D$  – diffuziya uzunluğu fiziki parametrlər olaraq, aşağıdakı şəkildə qiymətləndirilir:

$$L_D = \sqrt{Dt} \quad (1)$$

burada,  $D$  – konkret yarımkeçiricidə yük daşıyıcıların diffuziya əmsalı;  $t$  – yaşama müddətidir.  $L_D$ -nin daha əlverişli standart qiymətləndirilməsi Debay radiusu şəklində qiymətləndirilmədir:

$$L_D = \frac{V_t}{\omega_0} = \sqrt{\frac{kT\varepsilon}{Ne^2}} = 4,9 \sqrt{\frac{\varepsilon T(K)}{N(\text{sm}^{-3})}} \text{sm}, \quad (2)$$

burada,  $V_t$  – yük daşıyıcıların istilik sürəti;  $\omega_0$  – elektronun məxsusi rəqslərinin tezliyi;  $N$  – artıq yük daşıyıcıların konsentrasiyası;  $e$  – elektronun yükü;  $\varepsilon$  – mühitin nisbi dielektrik nüfuzluğu;  $T(K)$  – mütləq temperaturdur.

Məsamələrin daxilində hava üçün  $\varepsilon=1$ , silisiyum üçün isə  $\varepsilon=11,8$  qiymətlərini alır. Yarımkeçiricinin vahid həcmində  $\hbar\omega$  enerjili fotonla hər saniyədə generasiya edən artıq elektron və deşiklərin sayı

$$N = \frac{\beta W}{\hbar\omega}, \quad \hbar\omega \geq E_g, \quad (3)$$



kimi təyin olunur. Burada,  $W$  – fotonun  $\lambda = \frac{\omega c}{2\pi\sqrt{\epsilon}}$  - dalğa uzunluğunun maksimal udulmanı təmin edən  $\lambda/4$ -i qalınlığına malik həcm təbəqəsində günəş şüalanmasının gücü;  $E_g$  – yarımkeçiricinin energetik qadağan zonasının eni;  $\beta$  - kvant çıxışıdır.

Yerləşdiyi ərazi və sutka müddəti üçün GE-nin istismarı zamanı günəş şüalanmasının  $I(Vt/m^2)$  intensivliyi ölçülür.  $W(Vt/sm^3)$  kəmiyyəti  $I$  vasitəsi ilə ifadə olunur:

$$W\left(\frac{Vt}{sm^3}\right) = 10^6 I\left(\frac{Vt}{sm^3}\right) \frac{\lambda(m)}{4} \quad (4)$$

Adi şəraitdə:  $T=3\cdot 10^2K$ ,  $\epsilon=11,8$ ,  $\beta=1$ ,  $\lambda/4=10^{-7}m$ ,  $I=0,7kVt/m^2$ ,  $\hbar\omega \geq E_g = 2\cdot 10^{-19}C$ ,  $W = 0,7\cdot 10^2 Vt/sm^3$ .

(2) və (3) ifadələrindən diffuziya uzunluğunun qiymətləndirilməsi  $L_D \approx 10^3$  nm olacaqdır. Göründüyü kimi, diffuziya uzunluğu mikron tərtibindədir, ölçülən fiziki parametrdir və qarşımızda duran sonrakı məsələ  $x_0/L_D$  - nin təyin olunmasıdır. Burada  $x_0$  – məsaməli təbəqənin optimal qalınlığıdır.

(3) ifadəsi  $\lambda/4$  qalınlığına malik üst təbəqədə elektronların  $N$  sayını təyin edir.

$N(x)$ -in  $p-n$  keçidi istiqamətində dəyişməsinə nəzərdən keçirək. Fotonların təsiri altında generasiya

edən elektronların sayı məsamələrin  $x$  – hündürlüklərinə mütənasibdir:

$$N_g = gp\hbar\omega, \quad 0 \leq p \leq 1, \quad (5)$$

burada,  $g-x$  üzrə elektronların generasiyası,  $p$  – təbəqənin məsaməlilik əmsalındır.

Rekombinasiya olunmuş elektron – dəşik cütlərinin sayı  $p$  və  $x$  - kəmiyyətlərinin həm artma və həm də azalmasına mütənasibdir:

$$N_z = zp(1-p)x(L_D - x), \quad (6)$$

burada,  $z$  – rekombinasiya əmsalındır.

İki asılı olmayan generasiya və rekombinasiya statistik proseslərinin reallaşmasının birlikdə ehtimalı aşağıdakı kimi hesablanır:

$$P(N_g, N_z) = \frac{gzp^2(1-p)}{N^2} \hbar\omega x^2 (L_D - x) \quad (7)$$

$p$  və  $x$  üzrə  $P(N_g, N_z)$ -in maksimumlar şərti:

$$\left. \frac{\partial P(N_g, N_z)}{\partial x} \right|_{x=x_0} = 2x_0(L_D - x_0) - x^2 = 0, \quad x_0 = \frac{2}{3}L_D \quad (8)$$

$$\left. \frac{\partial P(N_g, N_z)}{\partial p} \right|_{p=p_0} = 2p_0(1-p_0) - p_0^2 = 0, \quad p_0 = \frac{2}{3}. \quad (9)$$

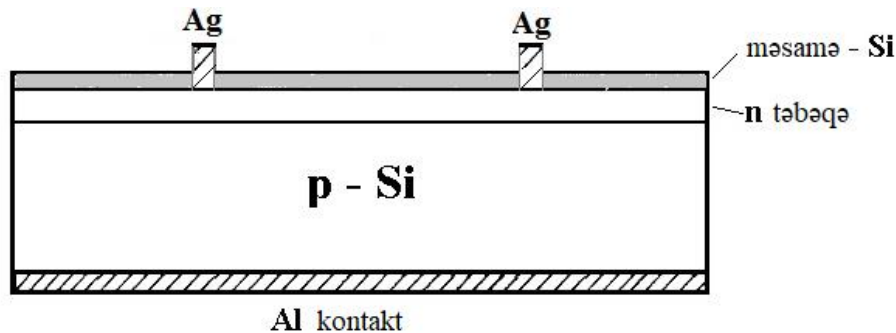
Məsaməlilik əmsalı  $p=p_0=2/3$  olduqda məsaməli təbəqənin optimal qalınlığı elektronların diffuziya uzunluğunun  $2/3$ -ni təşkil edir.

(8) ifadəsi ilə təsvir olunan qanunauyğunluğun eksperiment zamanı müşahidə olunması mümkünlüyünü aşağıda nəzərdən keçirəcəyik. Nanostrukturlanmış təbəqələrin məsaməliliyinin ölçülməsi və (9) ifadəsinin yoxlanılması isə ayrıca eksperimentin mövzudur.

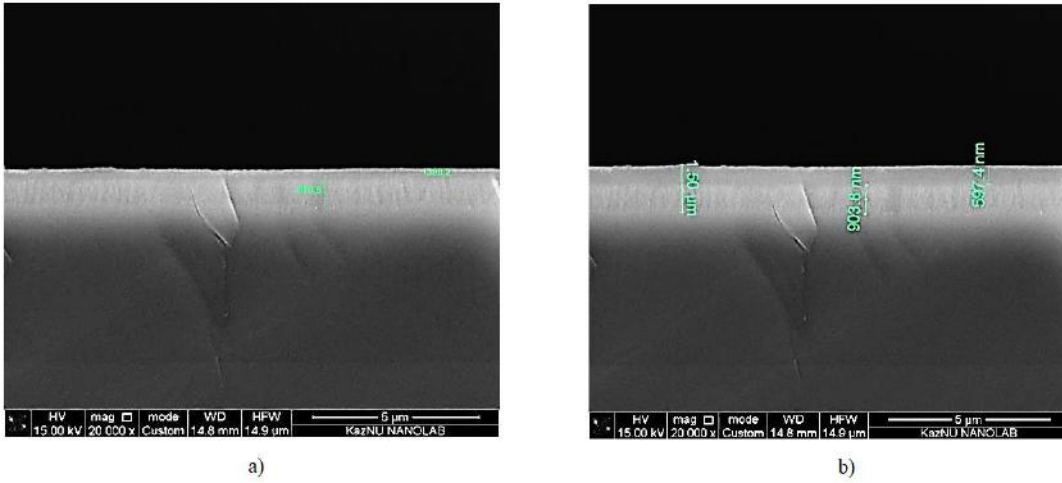
İlkin silisium kimi  $p$ -tip keçiriciliyə malik 350mkm qalınlıqlı, 12 Om·sm xüsusi müqavimətli monokristallik silisium istifadə edilmişdir.  $p-n$  keçidi fosforun termodiffuziyasının köməkliyi ilə formalaşır.  $n^+$  təbəqənin qalınlığı elektronun diffuziya 700–1500 nm

qalınlığındadır ki, bu da səthin aşındırmasından sonra yaranan məsamələrin  $p-n$  keçidinə qədər olan məsafədən az olan hündürlüyünü seçməyə imkan yaradır. Şəkil 1-də məsaməli silisiumlu günəş elementinin konstruksiyası göstərilmişdir.

Gümüş – alüminium kontaktı metal Ag tozlandırılması yolu ilə alınmışdır. Məsaməli silisium  $n^+$  təbəqəsinin səthinin cərəyanın müxtəlif sıxlıqlarında və aşındırmanın müxtəlif müddətlərində elektrokimyəvi anodlamaqla alınır. Elektrokimyəvi anodlama HF elektrolitində həyata keçirilir: anodlama cərəyanının sıxlığı 20 mA/sm<sup>2</sup> olmaqla 1:1 nisbətində etanol.



Şəkil 1. Məsaməli silisiumlu günəş elementinin konstruksiyası.



Şəkil 2. a)  $n$  – təbəqəsinin qısa müddətli aşındırılması zamanı məsaməli silisiumun en kəsiyinin, b) uzun müddətli aşındırma zamanı SEM təsvirləri.

Anodlama cərəyanının sıxlığı və aşındırma müddəti artdıqca, məsaməli örtüyün daxil olma dərinliyi  $p$ - $n$  keçidi müstəvisi istiqamətində artır. Günəş elementinin qısa qapanma cərəyanının maksimal qiymət aldığı məsaməli silisiumun effektiv  $x_0$  qalınlığını tapmaq üçün, GE-nin diffuziya  $n$ -təbəqəsinin müxtəlif zaman müddətlərində aşındırılması həyata keçirilir.

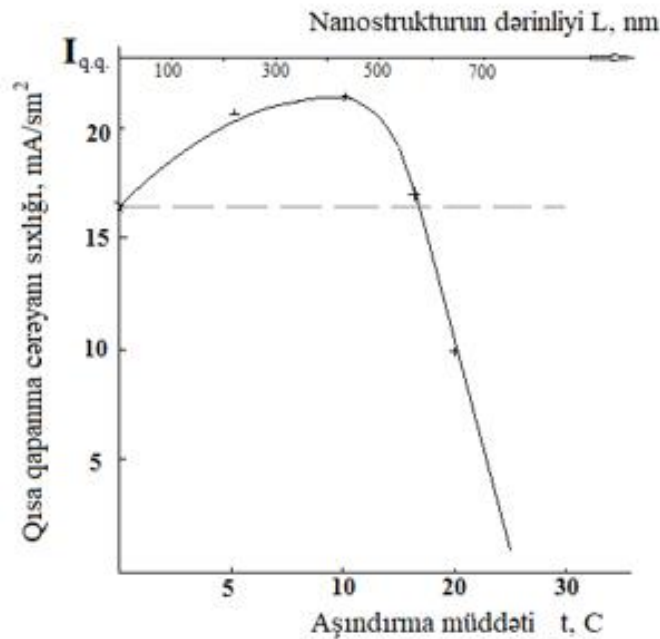
Məsaməli silisiumun  $p$ - $n$  keçidini əhatə etməklə en kəsiyinin mikrostrukturunun skanedici elektron mikroskopu (SEM) vasitəsi ilə təsvirləri alınmışdır.  $p$ - $n$  keçidin təbəqələrinin və məsaməli strukturun yaxşı görünməsi məqsədilə HF-in yüksək konsentrasiyası və nümunənin volfram lampa vasitəsilə işıqlandırılması istifadə olunur.

Şəkil 2-də a)  $n$ - təbəqəsinin qısa müddətli aşındırılması zamanı məsaməli silisiumun en kəsiyinin, b) uzun müddətli aşındırma zamanı SEM təsvirləri gös-

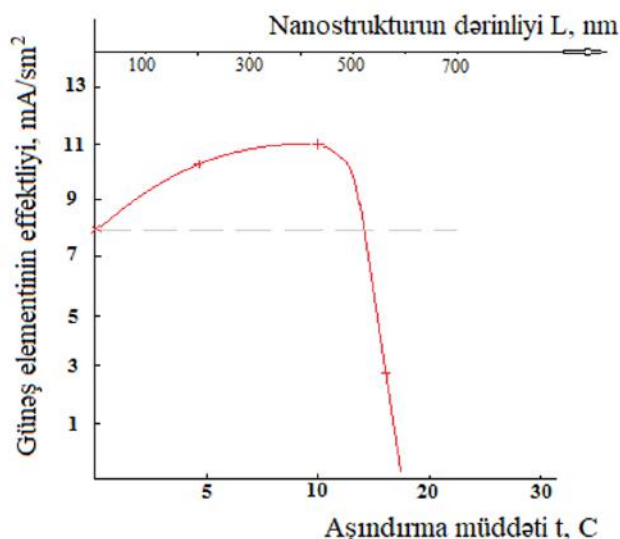
tərilmişdir. SEM təsvirlərdən GE-nin  $p$ - $n$  keçidinin oblastları,  $n$  – təbəqənin (1,5 mkm) və məsaməli təbəqənin (903,8 nm) qalınlıqları görünür.

Məsaməli təbəqəyə malik GE-nin gücü 87mVt/sm<sup>2</sup> olan volfram lampa ilə işıqlandırıldıqda qısa qapanma cərəyanları və yüksüz iş rejimində gərginlik, GE-nin volt-ampere xarakteristikasına görə dolma əmsali ölçülmüşdür.

Şəkil 3 GE-nin qısa qapanma cərəyanının sıxlığının maksimal qiymət aldığı məsamələrin effektiv dərinliyinin mövcudluğunu göstərir. Nanoməsamələrin dərinliyi SEM təsvirlərdən təyin olunur (şəkil 2 a, b). Qısa qapanma cərəyanının 22,1 mA/sm<sup>2</sup> maksimum qiyməti 10 san. aşındırma müddəti və məsaməli silisiumun GE-nin  $n$  – təbəqəsinə 420 nm daxil olma dərinliyinə uyğun gəlir. Məsaməli silisium olmadıqda, GE-nin qısa qapanma cərəyanının qiyməti 30%-ə qədər artır.



Şəkil 3. Məsamələrin dərinliyi artdıqca GE-nin aşındırma müddətinə mütənasib olan qısa qapanma cərəyanının sıxlığının dəyişməsi.



Şəkil 4.  $p-n$  keçidi istiqamətində  $n$  – təbəqəsində məsamələrin dərinliyinin artması ilə GE-nin effektivliyinin dəyişməsi.

Şəkil 4-də  $p-n$  keçidi istiqamətində məsaməli  $n$  – təbəqəsinin qalınlığının artması ilə GE-nin effektivliyinin dəyişməsi göstərilmişdir. Məsaməli təbəqənin səthdən daxil olma dərinliyi 420 nm olduqda, GE-nin effektivliyi ilkin məsaməli təbəqə olmadığı hala nəzərən müqayisədə 35% təşkil edir.

3 və 4 şəkillərindən görünür ki, GE-nin məsaməli təbəqəsinin maksimal qısa qapanma cərəyanı təmin edən optimal hündürlüyü ( $x_{0,l}$ ) və GE-nin faydalı iş əmsalı ( $x_{0,w}$ ) uyğun olaraq,  $x_{0,l} = 0,55$  və  $x_{0,w} = 0,70$  olur

ki, bu qiymətlər də nəzəriyyəyə  $x_{0,w} \approx (2/3)L_D$  çox yaxındır ( $L_D \approx 600$  nm).

İşdə alınmış nəticələrdən günəş elementlərinin effektivliyinin artırılması (35%-ə qədər) üçün istifadə oluna bilər. Günəş elementlərinin parametrlərinin optimal dəstənin mövcudluğu faktının sübut olunması müxtəlif texnologiyaların (elektrokimyəvi tox texnologiyası, səthin lazer emalı texnologiyası, üzvi elementlərin istifadəsi texnologiyası və s.) mükəmməlləşməsinə universal əlavə ola bilər.

- [1] Ж.И. Алферов. Физика и техника полупроводников. 1998, том 32, № 1, с. 3-18.
- [2] П.А. Шилиев, Д.А. Павлов. Полупроводниковые гетероструктуры: гетеропереход. Учебнометодическое пособие. Н. Новгород. 2009, с. 1-18.
- [3] М.С. Нечаев, Д.Ю. Парацук. Квантово-химическое исследование новых редокс-медиаторов на основе комплексов меди и кобальта для фото-электрохимических

- солнечных батарей. Вестник Московского университета. (Серия 3), 2012, № 6, с. 67-70.
- [4] R. Loganathan et al. Journal of Alloys and Compounds, 2014, 616, p. 363-371, (IF 2.726).
- [5] Л.Е. Воробьев, Л.Г. Голуб, С.Н. Данилов, Е.Л. Ивченко, Д.А. Фирсов, В.А. Шальгин. Оптические явления в полупроводниковых квантово-размерных структурах. Изд-во СПбГТУ. Санкт-Петербург. 2000.
- [6] H. Lindstrom, A. Holmberg, E. Magnusson et al. Nano Letters. 2001, 1 (2), p. 97-100.

**Е.А. Керимов**

#### PARAMETERS OF TOP THIN SILICON FILMS USED IN SUNNY BATTERIES

The existence of the optimal thickness of the porous of a solar cell which have an absorbing purpose, has been shown theoretically and experimentally. Among the variety of increasing the efficiency of solar cells, the presence of texturing of their surfaces has been established in order to reduce light reflection.

**Э.А. Керимов**

#### ПАРАМЕТРЫ СВЕРХ ТОНКИХ КРЕМНИЕВЫХ ПЛЕНОК, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЯХ

Теоретически и экспериментально показано существование оптимальной толщины пористого слоя солнечного элемента, имеющего поглощающее назначение. Среди многообразия повышения эффективности солнечных элементов установлено наличие текстурирования их поверхностей с целью уменьшения отражения света.

Qəbul olunma tarixi: 20.10.2021

## La<sub>1-c</sub>Sr<sub>c</sub>Mn<sub>1-y</sub>Zn<sub>y</sub>O<sub>3</sub> (c+y=0.15, 0.17) AŞQARLANMIŞ MANQANİTİN MÜQAVİMƏTİNİN TEMPERATUR ASILILIĞININ TƏDQIQI

A.M. ABDULLAYEV, M.C. NƏCƏFZADƏ, İ.N. İBRAHİMOV

*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu*

*H. Cavid pr. 131, AZ-1143 Bakı*

E-mail: [aqaadil@gmail.com](mailto:aqaadil@gmail.com)

80-300 K temperatur intervalında, maqnit sahəsi olmadıqda və 9.2 kOe intensivlikli maqnit sahəsində La<sub>0.875</sub>Sr<sub>0.125</sub>Mn<sub>0.975</sub>Zn<sub>0.025</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.90</sub>Sr<sub>0.10</sub>Mn<sub>0.95</sub>Zn<sub>0.05</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.95</sub>Sr<sub>0.05</sub>Mn<sub>0.90</sub>Zn<sub>0.10</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.975</sub>Sr<sub>0.025</sub>Mn<sub>0.875</sub>Zn<sub>0.125</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.855</sub>Sr<sub>0.145</sub>Mn<sub>0.975</sub>Zn<sub>0.025</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.88</sub>Sr<sub>0.12</sub>Mn<sub>0.95</sub>Zn<sub>0.05</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.93</sub>Sr<sub>0.07</sub>Mn<sub>0.90</sub>Zn<sub>0.10</sub>O<sub>3</sub> birləşmələrinin polikristal nümunələrinin elektrik müqaviməti tədqiq edilmişdir. Tədqiq olunan temperatur intervalında (80–300 K) birləşmələrin hamısının keçiriciliyi yarımkeçirici xarakterə malikdir. Müəyyən edilmişdir ki, bütün strukturlu tərkiblər üçün temperatur artdıqca maqnit sahəsinin müqavimətə təsiri azalır. Güman edilir ki, temperaturun artması ilə yükdaşıyıcıların yürüklüyü azalır və bu maqnit sahəsinin yükdaşıyıcılara təsirini zəiflədir.

**Açar sözlər:** Ferromaqnit, aşqarlanmış manqanidlər, yarımkeçirici, elektrik müqaviməti

**PACS:** 77.80.Bh, 72.20.-i, 64.70.kg, 75.50.Dd, 75.50.Pp

### GİRİŞ

İşin məqsədi La<sub>1-c</sub>Sr<sub>c</sub>Mn<sub>1-y</sub>Zn<sub>y</sub>O<sub>3</sub> (c+y=0.15,0.17) kimi yeni birləşmələrdə yaranan fazaların köçürülmə, maqnit və elektrik xassələrinin aşkara çıxarılması və müxtəlif radiuslu iki valentli qeyri-maqnit maqnezium və sink ionları ilə aşqarlanmış keramikanın xassələrinin müqayisəsidir.

Manqanın (Mn<sup>3+</sup>; 0.70 Å) və dəmirin (Fe<sup>3+</sup>; 0.67Å) ion radiusları praktik olaraq üst-üstə düşür və aşqarlama yalnız ikiqat mübadilə parametrlərini dəyişərək qəfəsin strukturunu cüzi dəyişir. Baxmayaraq ki, ikivalentli sinkin (0.83 Å) və üçvalentli manqanın ion radiusları kifayət qədər fərqlənir və bu da qəfəsin deformasiyasına və manqanidlərin iki valentli ionlarla aşqarlanması zamanı yaranan ferromaqnit nanoklasterlərin lokallaşmasına təsir edir.

Aşqarlanmış manqanitində metallik ferromaqnit fazanın meydana çıxması lokallaşmış spinli ion ilə delokallaşmış elektron arasında güclü mübadilə olması fərziyyəsinə əsaslanan ikiqat qarşılıqlı mübadilə mexanizmi ilə izah olunur [1, 2, 3].

Keçid metalların yarımkeçirici birləşmələrinin hətta kiçik miqdarda (dozada) aşqarlanması cox vaxt bu birləşmələrdə yeni, bəzən tamamilə gözlənilməz fiziki xassələrin meydana çıxmasına gətirir [4, 5]. Maqnit və struktur faza keçidləri və “yarımkeçirici-metal” tipli keçidlər maqnit sahəsi ilə yarana bilər [6-8].

Keramika, nazik təbəqələr, heterostruktur şəklində olan manqanidlər fundamental nöqtəyi-nəzərdə spinorbital nizamlığa, faza təbəqələşməsinə, spin asılı effektlərə [9], spintronikada praktiki tətbiqin mümkünlüyünə, maqnitokalorik effektlərə [10, 11] görə böyük maraq kəsb edir. Aşqarlanmış manqanidlərin tədqiqinə həsr olunmuş coxsaylı məqalələrə baxmayaraq, sink ionları ilə aşqarlanmış lantan manqanidlər tədqiq olunmamışdır. Bu birləşmələrin köçürülmə və maqnit xassələrinin öyrənilməsinə dair ədəbiyyatda cox az sayda məqalə nəşr olunmuşdur.

### EKSPERİMENTAL NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Rentgenstruktur tədqiqatları göstərmişdir ki, c və y konsentrasiyasından asılı olaraq, La<sub>1-c</sub>Sr<sub>c</sub>Mn<sub>1-y</sub>Zn<sub>y</sub>O<sub>3</sub> (c + y = 0.15, 0.17) romboedrik və ya ortorombik quruluşa malikdir (bax.cə.d.1). La<sub>0.875</sub>Sr<sub>0.125</sub>Mn<sub>0.975</sub>Zn<sub>0.025</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.90</sub>Sr<sub>0.10</sub>Mn<sub>0.95</sub>Zn<sub>0.05</sub>O<sub>3</sub> (c+y=0.15), La<sub>0.855</sub>Sr<sub>0.145</sub>Mn<sub>0.975</sub>Zn<sub>0.025</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.88</sub>Sr<sub>0.12</sub>Mn<sub>0.95</sub>Zn<sub>0.05</sub>O<sub>3</sub> (c+y=0.17) birləşmələri romboedrik quruluşa, La<sub>0.95</sub>Sr<sub>0.05</sub>Mn<sub>0.90</sub>Zn<sub>0.10</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.975</sub>Sr<sub>0.025</sub>Mn<sub>0.875</sub>Zn<sub>0.125</sub>O<sub>3</sub> (c+y=0.15) və La<sub>0.93</sub>Sr<sub>0.07</sub>Mn<sub>0.90</sub>Zn<sub>0.10</sub>O<sub>3</sub> (c+y=0.17) birləşmələri isə ortorombik quruluşa malikdir.

80-300 K temperatur intervalında maqnit sahəsi olmadıqda və 9.2 kOe intensivlikli maqnit sahəsində La<sub>0.875</sub>Sr<sub>0.125</sub>Mn<sub>0.975</sub>Zn<sub>0.025</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.90</sub>Sr<sub>0.10</sub>Mn<sub>0.95</sub>Zn<sub>0.05</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.95</sub>Sr<sub>0.05</sub>Mn<sub>0.90</sub>Zn<sub>0.10</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.975</sub>Sr<sub>0.025</sub>Mn<sub>0.875</sub>Zn<sub>0.125</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.855</sub>Sr<sub>0.145</sub>Mn<sub>0.975</sub>Zn<sub>0.025</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.88</sub>Sr<sub>0.12</sub>Mn<sub>0.95</sub>Zn<sub>0.05</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>0.93</sub>Sr<sub>0.07</sub>Mn<sub>0.90</sub>Zn<sub>0.10</sub>O<sub>3</sub> birləşmələrinin polikristal nümunələrinin elektrik müqaviməti tədqiq edilmişdir. Elektrik kontaktları üçün öz-özünə bərkilyən 99.9 % gümüş tərkibli metal üzvü qarışıqdan istifadə olunmuşdur. Maqnit müqaviməti

$$|MR|_{max} = \frac{[R(0) - R(H_C)]}{R(H_C)} \times 100\%$$

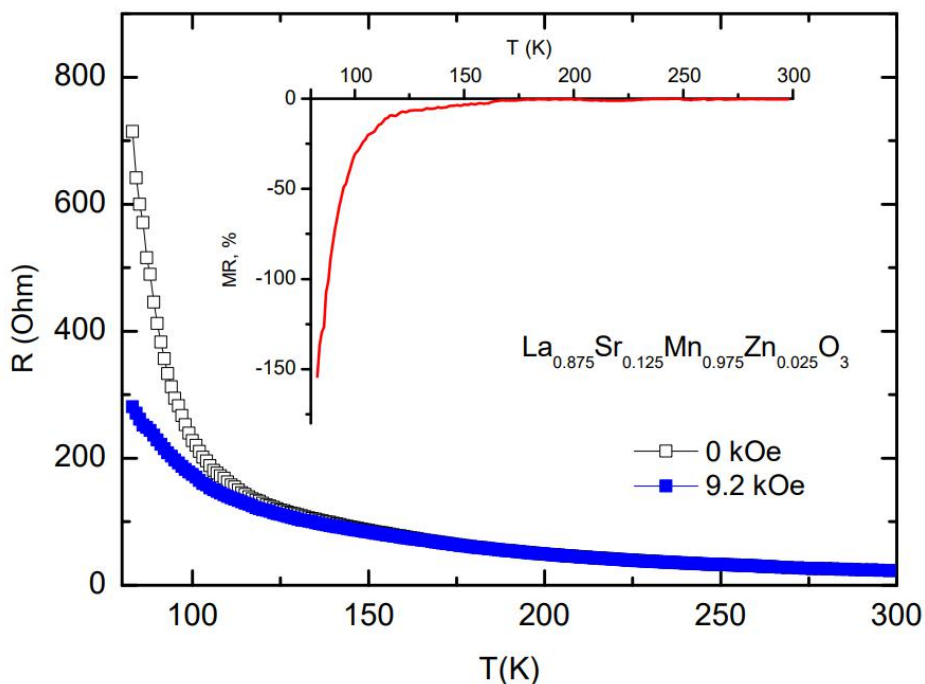
ifadəsi ilə hesablanmışdır [12]. Burada  $R(H_C)$  – fiksə olunmuş  $H_C$  intensivlikli sahədə;  $R(0)$  – maqnit sahəsi olmadığı haldakı müqavimətdir.

Yuxarıda göstərilən birləşmələr üçün maqnit müqavimətinin  $MR_{max}$  alınmış qiymətləri 1-ci cədvəldə verilmişdir.

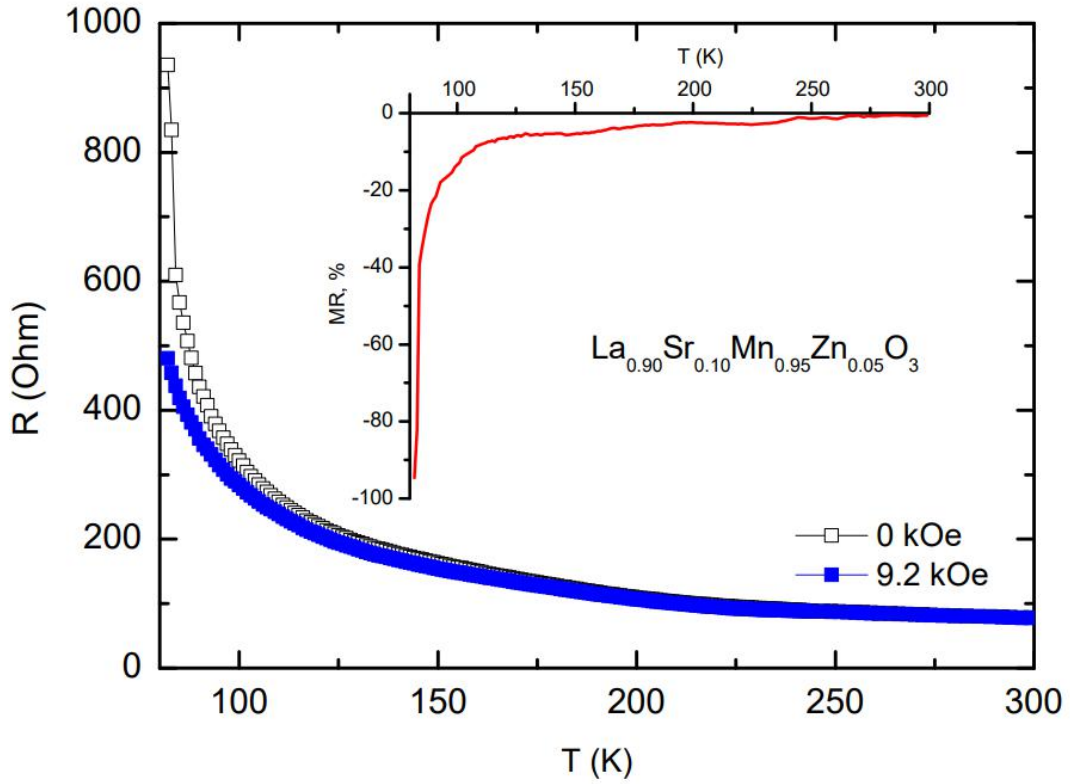
Birləşmələrin maqnit sahəsi olmadıqda (□) və 9.2kOe intensivlikli maqnit sahəsində (■) müqavimətlərinin temperatur asılılıqları 1-7-ci şəkillərdə göstərilmişdir. Şəkillərə əlavələrdə birləşmələrin maqnit müqavimətinin temperatur asılılığı verilmişdir.

Cədvəl 1.

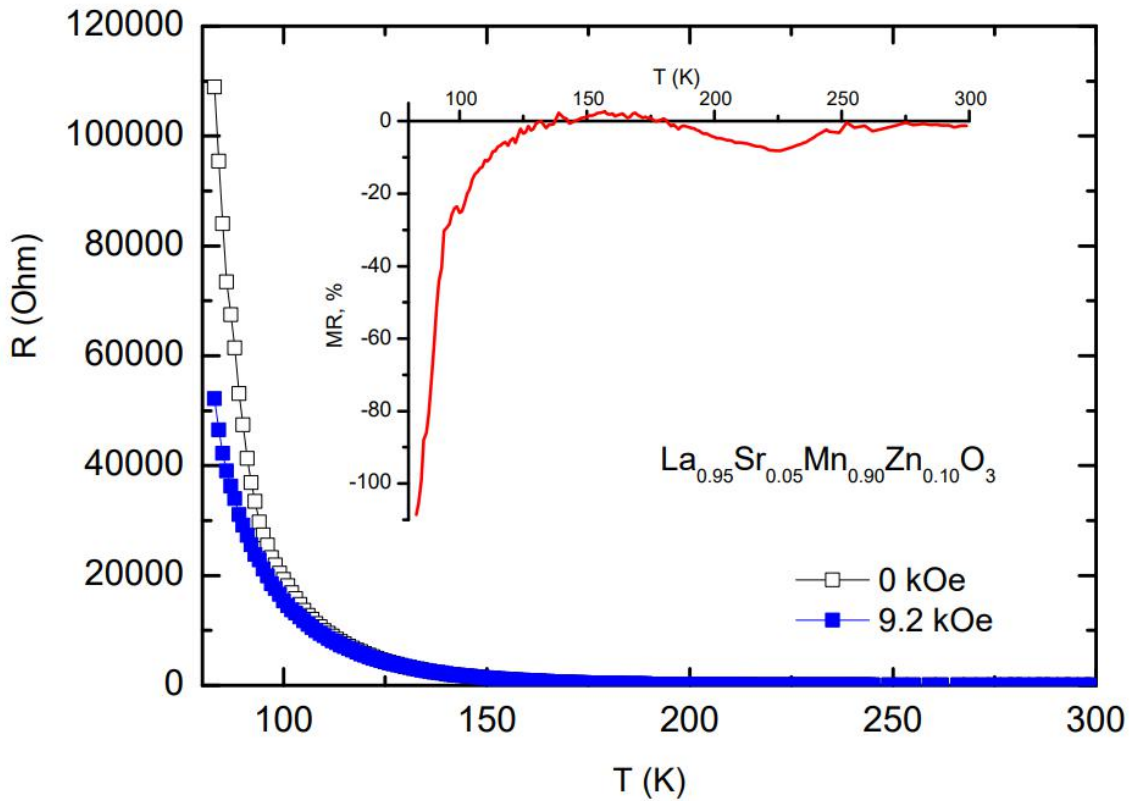
Birləşmə	Kristallik quruluş	$ MR _{\max}$ , %	$T_{MR}$ , K	$R(\text{Om})$
$\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{Mn}_{0.975}\text{Zn}_{0.025}\text{O}_3$	Romboedrik ( $R\bar{3}c$ ) $a=5.5249 \text{ \AA}$ $b=13.3387 \text{ \AA}$	~ 154	83	714
$\text{La}_{0.90}\text{Sr}_{0.10}\text{Mn}_{0.95}\text{Zn}_{0.05}\text{O}$	Romboedrik ( $R\bar{3}c$ ) $a=5.5228 \text{ \AA}$ $b=13.336 \text{ \AA}$	~ 94	83	935
$\text{La}_{0.95}\text{Sr}_{0.05}\text{Mn}_{0.90}\text{Zn}_{0.10}\text{O}_3$	Ortorombik (Pbnm) $a=5.5274 \text{ \AA}$ $b=5.4845 \text{ \AA}$ $c=7.7675 \text{ \AA}$	~ 108	83	108935
$\text{La}_{0.975}\text{Sr}_{0.025}\text{Mn}_{0.875}\text{Zn}_{0.125}\text{O}_3$	Ortorombik (Pbnm) $a=5.5241 \text{ \AA}$ $b=5.4817 \text{ \AA}$ $c=7.7643 \text{ \AA}$	~ 36	83	28510
$\text{La}_{0.855}\text{Sr}_{0.145}\text{Mn}_{0.975}\text{Zn}_{0.025}\text{O}_3$	Romboedrik ( $R\bar{3}c$ ) $a=5.5039 \text{ \AA}$ $b=13.3461 \text{ \AA}$	~71	83	1001
$\text{La}_{0.88}\text{Sr}_{0.12}\text{Mn}_{0.95}\text{Zn}_{0.05}\text{O}_3$	Romboedrik ( $R\bar{3}c$ ) $a=5.5196 \text{ \AA}$ $b=13.3512 \text{ \AA}$	~ 58	83	1067
$\text{La}_{0.930}\text{Sr}_{0.070}\text{Mn}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{O}_3$	Ortorombik (Pbnm) $a=5.5283 \text{ \AA}$ $b=5.4838 \text{ \AA}$ $c=7.7667 \text{ \AA}$	~ 60	83	6490



Şəkil 1.  $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{Mn}_{0.975}\text{Zn}_{0.025}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit sahəsi olmadıqda ( $\square$ ) və 9,2 kOe intensivlikli maqnit sahəsində ( $\blacksquare$ ) müqavimətinin temperatur asılılıqları. Əlavədə:  $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{Mn}_{0.975}\text{Zn}_{0.025}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit müqavimətinin temperatur asılılığı.

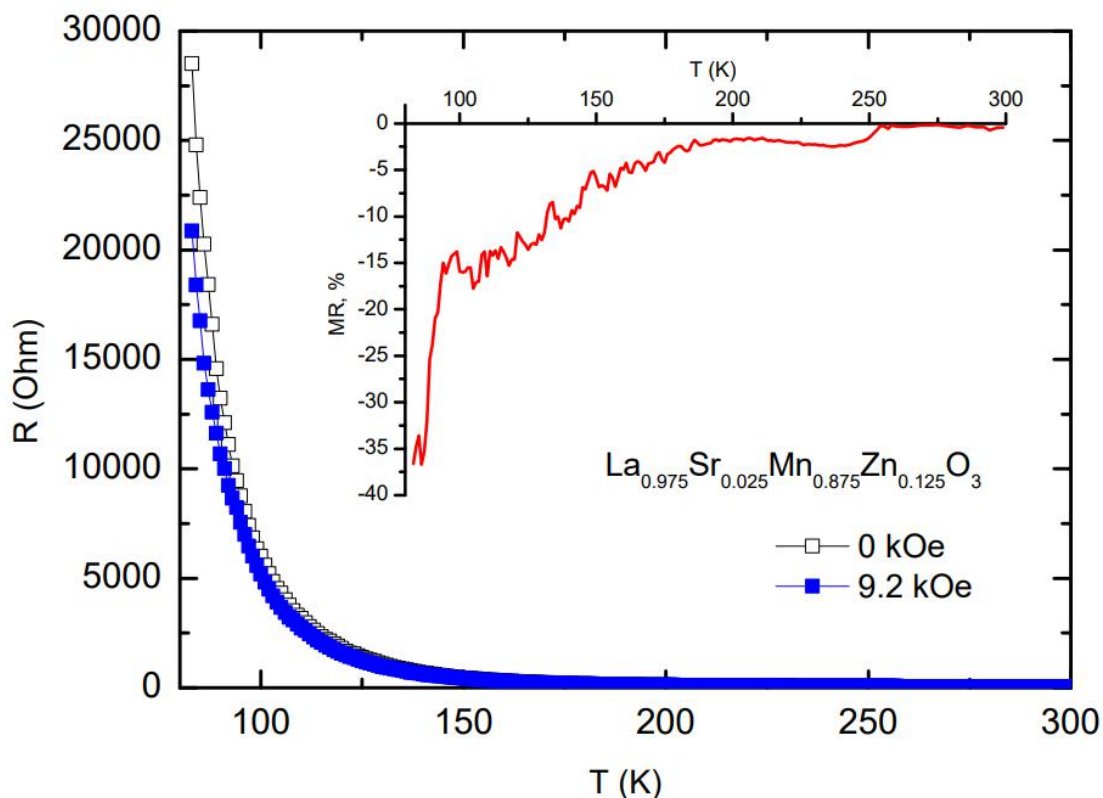


Şəkil 2.  $\text{La}_{0.90}\text{Sr}_{0.10}\text{Mn}_{0.95}\text{Zn}_{0.05}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit sahəsi olmadıqda (□) və 9,2 kOe intensivlikli maqnit sahəsində (■) müqavimətinin temperatur asılılıqları. Əlavədə:  $\text{La}_{0.90}\text{Sr}_{0.10}\text{Mn}_{0.95}\text{Zn}_{0.05}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit müqavimətinin temperatur asılılığı.

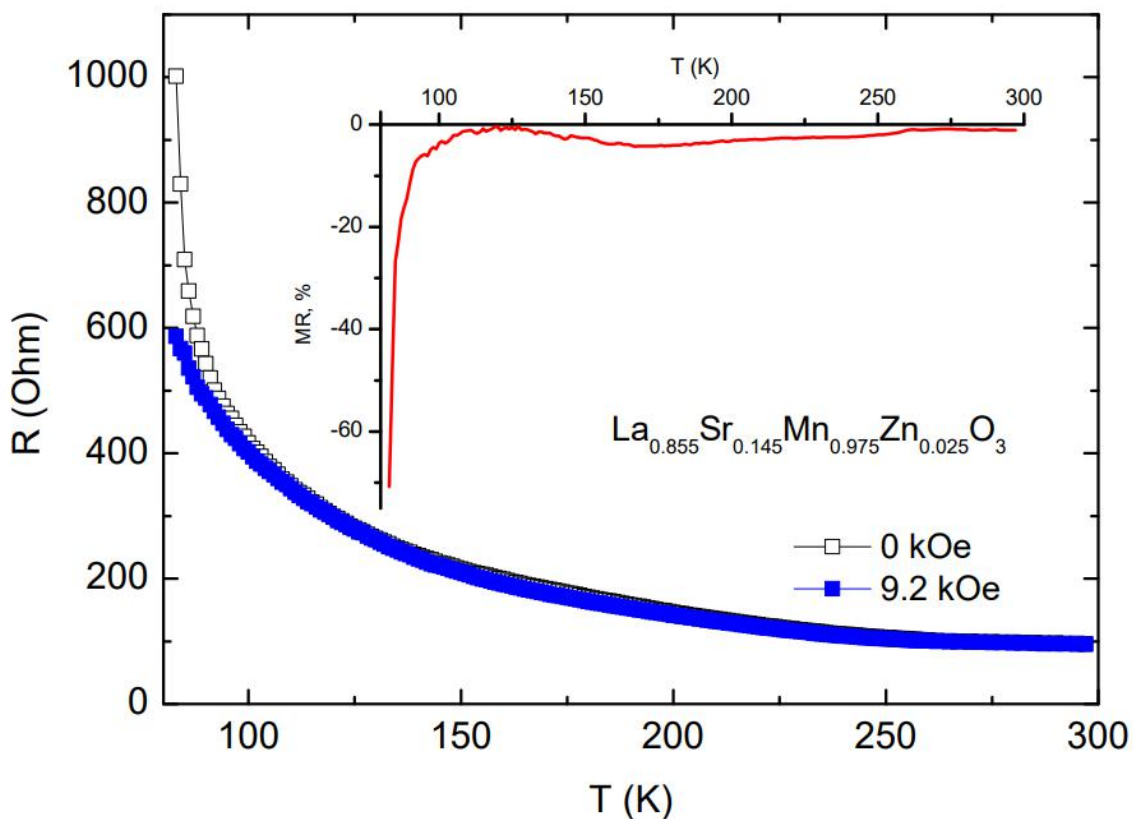


Şəkil 3.  $\text{La}_{0.95}\text{Sr}_{0.05}\text{Mn}_{0.90}\text{Zn}_{0.10}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit sahəsi olmadıqda (□) və 9,2 kOe intensivlikli maqnit sahəsində (■) müqavimətinin temperatur asılılıqları. Əlavədə:  $\text{La}_{0.95}\text{Sr}_{0.05}\text{Mn}_{0.90}\text{Zn}_{0.10}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit müqavimətinin temperatur asılılığı.

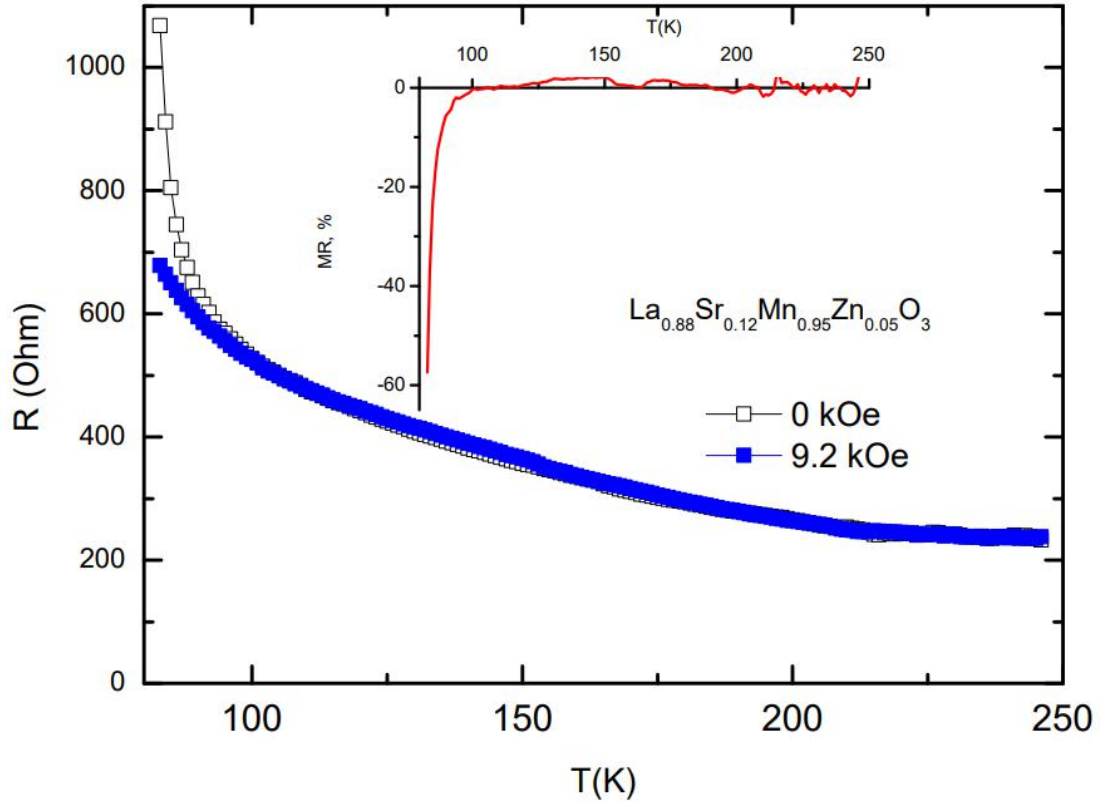




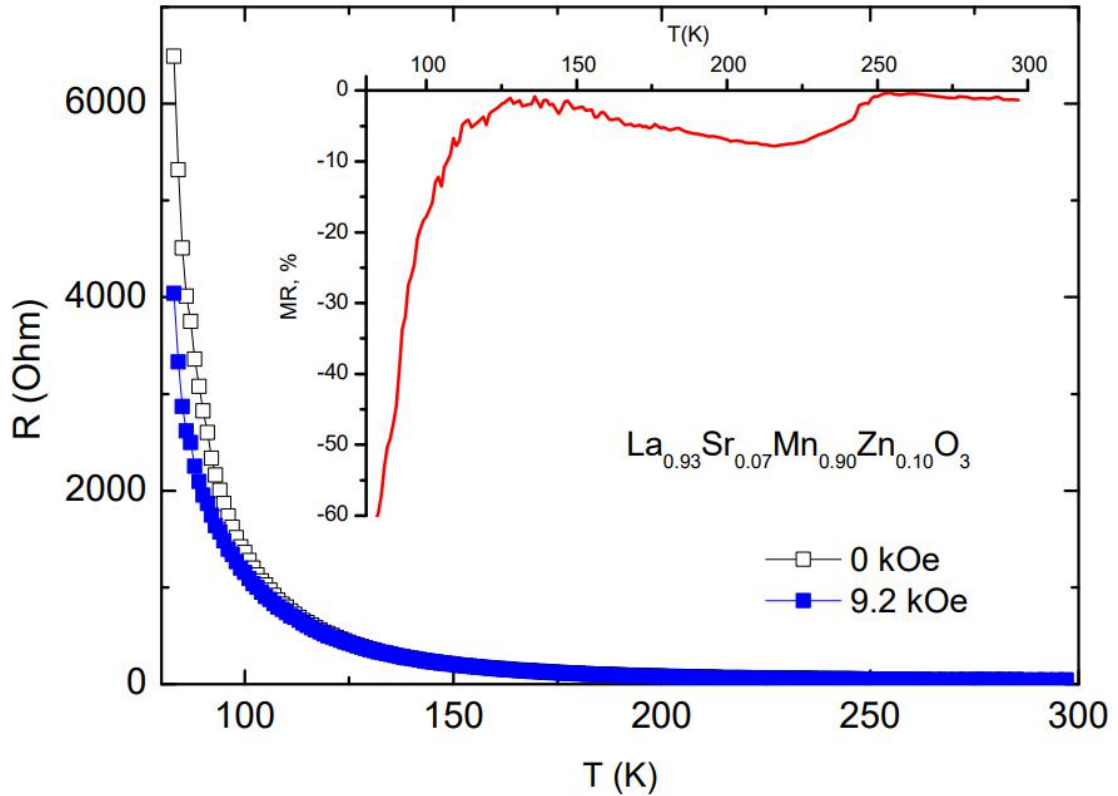
Şəkil 4.  $\text{La}_{0.975}\text{Sr}_{0.025}\text{Mn}_{0.875}\text{Zn}_{0.125}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit sahəsi olmadıqda ( $\square$ ) və 9,2 kOe intensivlikli maqnit sahəsində ( $\blacksquare$ ) müqavimətinin temperatur asılılıqları. Əlavədə:  $\text{La}_{0.975}\text{Sr}_{0.025}\text{Mn}_{0.875}\text{Zn}_{0.125}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit müqavimətinin temperatur asılılığı.



Şəkil 5.  $\text{La}_{0.855}\text{Sr}_{0.145}\text{Mn}_{0.975}\text{Zn}_{0.025}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit sahəsi olmadıqda ( $\square$ ) və 9,2 kOe intensivlikli maqnit sahəsində ( $\blacksquare$ ) müqavimətinin temperatur asılılıqları. Əlavədə:  $\text{La}_{0.855}\text{Sr}_{0.145}\text{Mn}_{0.975}\text{Zn}_{0.025}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit müqavimətinin temperatur asılılığı.



Şəkil 6.  $\text{La}_{0.88}\text{Sr}_{0.12}\text{Mn}_{0.95}\text{Zn}_{0.05}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit sahəsi olmadıqda ( $\square$ ) və 9,2 kOe intensivlikli maqnit sahəsində ( $\blacksquare$ ) müqavimətinin temperatur asılılıqları. Əlavədə:  $\text{La}_{0.88}\text{Sr}_{0.12}\text{Mn}_{0.95}\text{Zn}_{0.05}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit müqavimətinin temperatur asılılığı.



Şəkil 7.  $\text{La}_{0.93}\text{Sr}_{0.07}\text{Mn}_{0.90}\text{Zn}_{0.10}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit sahəsi olmadıqda ( $\square$ ) və 9,2 kOe intensivlikli maqnit sahəsində ( $\blacksquare$ ) müqavimətinin temperatur asılılıqları. Əlavədə:  $\text{La}_{0.93}\text{Sr}_{0.07}\text{Mn}_{0.90}\text{Zn}_{0.10}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit müqavimətinin temperatur asılılığı.

Şəkillərdən görünür ki, tədqiq olunan temperatur intervalında (80 – 300 K) birləşmələrin hamısının keçiriciliyi yarımkəçirici xarakterlidir.

## NƏTİCƏ

Beləliklə, tədqiqat göstərmişdir ki, 80-300 K temperatur intervalında maqnit sahəsi olmadıqda və 9.2kOe intensivlikli maqnit sahəsində  $La_{0.875}Sr_{0.125}Mn_{0.975}Zn_{0.025}O_3$ ,  $La_{0.90}Sr_{0.10}Mn_{0.95}Zn_{0.05}O_3$ ,  $La_{0.95}Sr_{0.05}Mn_{0.90}Zn_{0.10}O_3$ ,  $La_{0.975}Sr_{0.025}Mn_{0.875}Zn_{0.125}O_3$ ,  $La_{0.855}Sr_{0.145}Mn_{0.975}Zn_{0.025}O_3$ ,  $La_{0.88}Sr_{0.12}Mn_{0.95}Zn_{0.05}O_3$ ,  $La_{0.93}Sr_{0.07}Mn_{0.90}Zn_{0.10}O_3$

birləşmələrinin polikristal nümunələrinin elektrik müqaviməti yarımkəçirici xarakterə malikdir. Məlum olmuşdur ki, bütün strukturlu tərkiblər üçün temperatur artdıqca maqnit sahəsinin müqavimətə təsiri azalır. Fərz edilir ki, temperatur artması ilə yükdaşıyıcıların yürüklüyü azalır və bu maqnit sahəsinin yükdaşıyıcılara təsirini zəiflədir.

## MİNNƏTDARLIQ

Bu iş Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Elmi İnkişaf Fondunun maliyyə yardımı ilə yerinə yetirilmişdir - Qrant № EİF-BGM-4-RFTF-1/2017-21/03/01.

- [1] E.L. Nagaev. Lanthanum manganites and other giant-magnetoresistance magnetic conductors. UFN, 1996, vol. 166, N8, p. 833–858, (English version: Physics–Uspekhi, 1996, 39:8, 781–805)
- [2] N.G. Bebenin, R.I. Zainullina, V.V. Ustinov. Colossal magnetoresistance manganites, UFN, 2018, vol.188, N 8, p. 801–820. (English version: Physics–Uspekhi, 2018, 61:8, 719–738)
- [3] Ю.Н. Изюмов и Ю.Н. Скрябин. Модель двойного обмена и уникальные свойства манганитов, УФН, 2001, т.171, №2, с.121. (J. M. D. Coey, M. Viret, Mixed-valence manganites, Advances in Physics, 1999, Vol. 48, No. 2, 167- 293)
- [4] E. Dagotto, T. Hotta, A. Moreo. Colossal magnetoresistant materials: the key role of phase separation. Phys. Rep., 2001, vol. 344, pp. 1-153.
- [5] J. Furukawa. Phys. Soc. Jpn., 1995, vol. 64, p. 2754.
- [6] A.P. Булатов, Х.Г. Богданова, В.А. Голенцев-Кутузов и др.. Решеточные, электрические и магнитные эффекты в манганитах лантана  $La_{1-x}Sr_xMnO_3$  (x=0.125, 0.15, 0.175). ФТТ, 2010, т.52, с.2238.
- [7] Blundell S. Magnetism in condensed Matter. S. Blundell. Oxford University Press, Oxford, 2003. 238pp.
- [8] E.V. Sotirova-Haralambeva, X.L. Wang, K.H. Liu et al.. Science and Technology of Advanced Materials. 2003, vol. 4, p.149.
- [9] Z.L. Liao, G. Koster, M. Huijben, and G. Rijnders, Experimental evidence for anisotropic double exchange interaction driven anisotropic transport in manganite heterostructures, Sci Rep., 2017, 7, 2654.
- [10] Н. В. Волков. Спинтроника магнитные и туннельные структуры на основе манганитов, УФН, 2012, т.182, №3, 263-285.
- [11] А.Г. Гамзатов, А.М. Алиев, И.К. Камбаров, А.Р. Кауль. ФТТ, 2016, т. 58Б, №7, стр.1303-1305.
- [12] С.М. Дунаевский, А.Л. Малышев, В.В. Попов, В.А. Трунов., Физика твердого тела, 1997, т. 39, № 10, стр. 1831.

A.M. Abdullayev, M.C. Nadjafzade, I.N. Ibrakhimov

### INVESTIGATION OF THE TEMPERATURE DEPENDENCE OF RESISTANCE OF MANGANITE WITH THE ADDITION OF $La_{1-c}Sr_cMn_{1-y}Zn_yO_3$ (c + y = 0.15, 0.17)

The electrical resistance of polycrystalline samples of the compound  $La_{0.875}Sr_{0.125}Mn_{0.975}Zn_{0.025}O_3$ ,  $La_{0.90}Sr_{0.10}Mn_{0.95}Zn_{0.05}O_3$ ,  $La_{0.95}Sr_{0.05}Mn_{0.90}Zn_{0.10}O_3$ ,  $La_{0.975}Sr_{0.025}Mn_{0.875}Zn_{0.125}O_3$ ,  $La_{0.855}Sr_{0.145}Mn_{0.975}Zn_{0.025}O_3$ ,  $La_{0.88}Sr_{0.12}Mn_{0.95}Zn_{0.05}O_3$ ,  $La_{0.93}Sr_{0.07}Mn_{0.90}Zn_{0.10}O_3$  was studied in the temperature range 80-300 K in the absence of a magnetic field and in a magnetic field of 9.2 kOe. The electrical conductivity of all compounds in the investigated temperature range (80-300 K) is semiconductor. It is established that for all structural components, the influence of the magnetic field on the resistance decreases with increasing temperature. It is believed that with increasing temperature, the mobility of carriers decreases, which weakens the influence of the magnetic field on the carriers.

A.M. Абдуллаев, М.Дж. Наджафзаде, И.Н. Ибрагимов

### ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ СОПРОТИВЛЕНИЯ МАНГАНИТА С ДОБАВЛЕНИЕМ $La_{1-c}Sr_cMn_{1-y}Zn_yO_3$ (c + y = 0.15, 0.17)

В интервале температур 80-300 К в отсутствие магнитного поля и в магнитном поле напряженностью 9,2 кОе исследованы электрическое сопротивление поликристаллических образцов соединения  $La_{0.875}Sr_{0.125}Mn_{0.975}Zn_{0.025}O_3$ ,  $La_{0.90}Sr_{0.10}Mn_{0.95}Zn_{0.05}O_3$ ,  $La_{0.95}Sr_{0.05}Mn_{0.90}Zn_{0.10}O_3$ ,  $La_{0.975}Sr_{0.025}Mn_{0.875}Zn_{0.125}O_3$ ,  $La_{0.855}Sr_{0.145}Mn_{0.975}Zn_{0.025}O_3$ ,  $La_{0.88}Sr_{0.12}Mn_{0.95}Zn_{0.05}O_3$ ,  $La_{0.93}Sr_{0.07}Mn_{0.90}Zn_{0.10}O_3$ . Электропроводность всех соединений в исследованном интервале температур (80-300 К) является полупроводниковой. Установлено, что для всех структурных компонентов влияние магнитного поля на сопротивление уменьшается с ростом температуры. Считается, что с повышением температуры подвижность носителей уменьшается, что ослабляет влияние магнитного поля на носители.

Qəbul olunma tarixi: 27.11.2021

## Bi<sub>2</sub>Te<sub>2.7</sub>Se<sub>0.3</sub> LAYLARINDA KRİSTALLİK ÖZƏKLƏRİN VƏ NANOMƏFTİLLƏRİN FORMALAŞMA XÜSUSİYYƏTLƏRİ

S.R. ƏZİMOVA, N.M. ABDULLAYEV

*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu*

*Bakı, Azərbaycan, AZ-1143, H.Cavid pr., 131*

E-mail: [sevinc\\_azimova\\_82@mail.ru](mailto:sevinc_azimova_82@mail.ru)

İşdə, nikellə interkalyasiya olunmuş Bi<sub>2</sub>Te<sub>2.7</sub>Se<sub>0.3</sub> kristallarının kvintetlərində Ni-Te-Se zəncirlərinin əmələ gəlməsinin xüsusiyyətləri öyrənilmişdir. Van-der-Vaals qarşılıqlı təsiri ilə birləşən təbəqələrin səthlərində nanokristallik özəklərin əmələ gəldiyi müəyyən edilmişdir.

**Açar sözlər:** folqa, kvintet, nanoməftillər, interkalyasiya, koalissensiya, özünütəşkil.

**PACS:** 62.20Fe, 61.72.Cc, 61.72.Lk

### 1. GİRİŞ

Son illərdə həm klassik, həm də kvant ölçü effektlərinin tətbiqi hesabına müxtəlif fiziki mexanizmlərin aşkar olunması ilə materialların Z - termoelektrik effektivliyinin artırılma imkanları intensiv şəkildə tədqiq olunur. Belə effektlərdən biri də nanohissəciklərin sərhədlərində fononların və elektronların səpilməsidir [1].

Materialın hissəciklərinin elə bir optimal radiusu mövcuddur ki, bu halda onun termoelektrik effektivliyi maksimal qiymətə malik ola bilər. 0,02÷0,04 mkm radius intervalda, 300 K temperaturda, müvafiq olan termoelektrik effektivlik 2,08÷2,12-yə bərabər olar, bir şərtlə ki, temperatur qradientinə və elektrik cərəyanına paralel istiqamətlənmiş ayrı-ayrı hissəciklərin qaynaq səthlərində monokristaldan nanostrukturlaşmış materiala keçdikdə termoelektrik itkisi baş verməsin [2]. Nanostrukturda nanoklasterlərin təşkili və özünütəşkilinin idarə edilməsi aktual problemdir və onun həlli fərqli xüsusiyyətlərə malik yeni növ materialların yaradılmasına imkan yarada bilər. Bu materialların xassələrini iki yolla - nanoklasterlərin ölçüsünü və ya klasterlərarası qarşılıqlı əlaqəni dəyişdirməklə etmək mümkündür. Nanoquruluşun nanoklasterlərdən təşkili, kristalların və atomların formalaşması qanununa tabedir - onlarda real səth və real klasterlərarası sərhədlər mövcuddur [3]. Anodizasiya şərtlərindən və kristalın ilkin xüsusiyyətlərindən asılı olaraq quruluşlar aşağıdakı qruplardan ibarət olur: nanoklasterlər, aşırıqəfəslər, kvant nöqtələri, özəklər, teksturalı səthlər, domenlər, məsaməli laylar. Bu zaman mürəkkəb dinamik sistemin öz-özünə təşkili baş verir. Belə vahid ehtimalın baş vermə prosesi koherentdir [4]. Laylı təsadüfi mühitlərdə müstəvi dalğaların dinamik lokallaşması sürətlərin təsadüfi sahələrdə bir nöqtəli fəza-zaman ehtimal sıxlığının analizinə əsaslanaraq aşqar sahəsinin klasterizasiyası vahid yanaşma əsasında araşdırılır [5].

Müxtəlif cərəyan sıxlıqlarında *n*-tip keçirici kristalların geniş intervallarda aşındırıldığı zaman fərqli effektlər müşahidə oluna bilər. Oxşar şərəitdə *p*-tip kristalların aşındırıldığı zaman, *n*-tipdən fərqli olaraq, məsamələr yaranır. Bu halda, səthin aşındırılması klaster çətlərinin yaranmasına səbəb olur [6-7].

Xarici həyəcanlandırma və sürtünmələr olmadıqda, birinci tərtib diferensial tənliklər sisteminin məsələsinin həlli hissəciyin düzxətli hərəkətinə uyğundur:

$$r(t) = r_0 + \mathcal{I}ot, \quad \mathcal{I}(t) = \mathcal{I}_0$$

Formalaşma prosesində hissəciyin (*div u(r, t) ≠ 0*) potensial sahə sürətləri halı üçün, zamanın başlanğıc anında kvadratda bərabər yerləşmiş bölgələr əmələ gəlir. (hissəciklərin yüksək konsentrasiyasının olduğu sahələr daha çox seyrək zonalarda yerləşir). Məsamələrdə klasterlərin əmələgəlmə mexanizmi nəzərdən keçirilir və qapalı məsamələr üçün *n* atomlu klasterin yaranması aşağıdakı düsturla verilir:

$$\Delta\mu = \Delta\mu^0 + \ln[n_0(n)/N]$$

Burada  $\Delta\mu^0 = \mu_0 - \mu_2$  kimyəvi potensiallar fərqi, Qapalı məsamədə klasterin əmələ gəlməsinin Gibbs sərbəst enerjisi:

$$\Delta G = (4/3)\pi R^3 \rho [3\alpha/R\rho - (\Delta\mu^0 + \ln[n_0/(n_0 - n)])]$$

Məsamə daxilində həll olunmuş maddənin məhdud konsentrasiyası *n<sub>max</sub>* klasterinin məhdud həcmnin reallaşmasına səbəb olur, maksimuma çatdıqdan sonra böyümə prosesi enerji baxımından əlverişsiz olur, yəni klasterin böyüməsi dayanır və konsentrasiyanın *n<sub>0</sub>/N* artması ilə klasterin kritik həcmi (ölçüsü) azalır [5].

Klasterlərin maksimum ölçüləri *n<sub>max</sub>* həmişə məsamənin ölçüsü *n<sub>0</sub>*-dan az olur və konsentrasiyası saxlanılmaqla məsamə ölçüsü böyüdükcə klasterlərin sayı artır. *n<sub>max</sub>*-u qiymətləndirərkən, məsamələrin heterogenlik amilinin təsirinin, həmçinin məsamə ölçüsünün 10-dan 100 nm-ə qədər və daha çox artması ilə bir məsamədə bir neçə klasterin əmələ gəlmə ehtimalı yaranır. Məsamələr həmçinin klasterin əmələ gəlmə sürətinə təsir edir, onun artması enerji səddinin azalması hesabına baş verir [3].

Məlumdur ki, interkalyasiya olunmuş Bi<sub>2</sub>Te<sub>2.7</sub>Se<sub>0.3</sub> birləşmələrinin mexaniki pozulması matrisanın parçalanmasına gətirib çıxarır və 50-100 nm bəzən isə hətta tək monoatom təbəqələrdən ibarət hissəciklər almağa imkan verir. İnterkalyasiya reaksiyası keçid metallarının dihalogenidlərinin bir çox laylı birləşmələri üçün xarakterikdir [8].

B. Boledzyuk tədqiqatlarında elektrokimyəvi interkalyasiya "müddətli" elektrik sahəsi üsulu ilə həyata keçirilmişdir. Elektrolit kimi CoSO<sub>4</sub> - ün doymuş sul

məhlulu istifadə edilmişdir. InSe təbəqələrarası fəzasının eninin ( $4.168 \text{ \AA}$ ) və kobaltın ion radiusunun ( $r_{\text{Co}}=0.885 \text{ \AA}$ ) nisbəti  $\text{Co}^{2+}$  ionlarını InSe laylararası fəzaya yerləşdirməyə imkan verir. Sabit maqnit sahəsində interkalyasiya edilmiş  $\text{Co}_{0.1}\text{InSe}$  interkalyatlarının Van-der-Vaals səthində Co klasterlərinin üçölçülü AFM təsvirində, nanoboşluqlarda Co nanohissəciklərinin toplanması və kobaltın ayrıca nanoformalaşması tədqid olunur. Kobalt klasterləri domen quruluşu ilə xarakterizə olunur. Onların formalaşması InSe-nin atomik hamar Van-der-Vaals səthlərində dislokasiyaların lokallaşdığı yerlərdə, fərdi nanoölçülü formalaşmalar isə təbəqələrin səthində nanoboşluqlarda baş verir. Hər iki halda quruluşlar kobalt atomları arasında maqnit mübadiləsi qarşılıqlı təsirinə mühüm rol oynadığı InSe təbəqələrinin Van-der-Vaals müstəvilərində interkalant atomlarının öz-özünə təşkili nəticəsində formalaşır [9].

Beləliklə, laylı kristalların ağır metal ionlarla interkalyasiya metodu vasitəsilə layların səthində nanoquruluşlu özəklərin - yeni fazanın yerləşdirilməsinin mümkünlüyü aşkar edilmişdir.

İşin məqsədi laylı  $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$  kristallarının Van-der-Vaals səthinin defektlərində  $\text{Ni}^{+2}$  interkalyantının rolunu, yerini, o cümlədən özəkəmələgəlmə dinamikasını müəyyən etməkdən ibarətdir.

## 2. TƏCRÜBƏ

$\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$  laylı kristallarının Van-der-Vaals təbəqələrində özək əmələ gəlməsinin xüsusiyyətlərini öyrənmək üçün,  $1 \times 2 \text{ sm}$  ölçüdə nümunələr əldə edilmişdir. Nümunələr  $\text{NiSO}_4$  elektrolitinin 0,5%-li məhlulunda Ni ilə interkalyasiyasından alınmışdır. Elektrodlardan biri kimi  $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$  kristalı, ikinci elektrod kimi isə karbon çubuğu götürülmüşdür. Nümunənin məhlulda interkalyasiyası 5V gərginlikdə,  $\sim 0,7\text{A}$  cərəyanda aparılmışdır. Elektroliz fasilələrlə,  $1 \div 5$  dəqiqə zaman müddətində məhlulun temperaturu  $65^\circ\text{C}$  saxlanılmaqla aparılmışdır. İnterkalyasiya prosesində  $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$  kristallarının laylarında aşağı və yuxarı Van-der-Vaals təbəqələrinin səthlərində yeni yarımkeçirici  $\text{Ni}_{1,297}\text{Te}$  birləşməsi əmələ gəlir.

AFM ölçmələri üçün interkalyasiya edilmiş kristal nümunələri Qeim metodu ilə 50-100 nm qalınlığında soyulur.

X-şüalarının difraksiya analizi  $8^\circ < 2\theta < 65^\circ$  diapazonunda D2 fazalı difraktometrə (Bruker) və  $\text{CuK } \alpha$  şüalarından ( $\lambda=1,5406 \text{ \AA}$ ) istifadə edilməklə, quruluş tədqiqatları isə EVA və TOPAZ proqramlarından istifadə etməklə aparılmışdır.

Elektron mikroskop ölçüləri üçün  $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$  nazik folqaları, Qeim metodlarından istifadə etməklə, kütlə monokristalının səthinin (0001) ardıcıl olaraq parçalanması yolu ilə hazırlanmışdır.

Səth tədqiqatlarında ACM-BRUKER Nano N8 Neos atom qüvvə və NC-AFM darayıcı elektron mikroskopu və JEOL JSM-6610LV Skanedici Elektron Mikroskopudan (OXFORD INSTRUMENTS X-MAX) istifadə edilmişdir.

## 3. ANALİZ

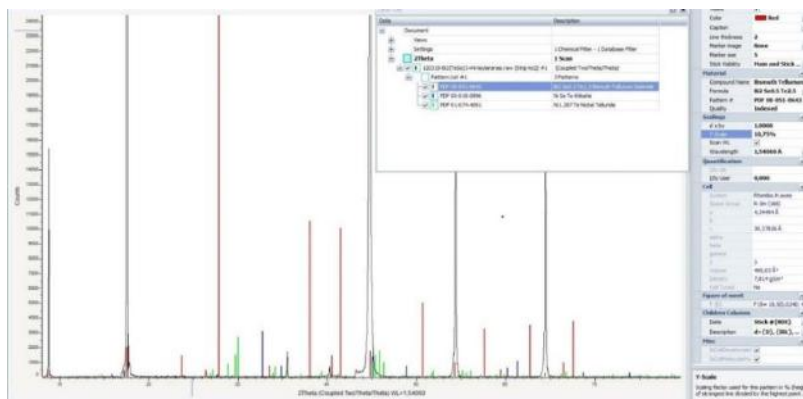
Rentgen faza tədqiqatları 50 nm-dən 1 mkm-ə qədər qalınlıqlı  $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3} < \text{Ni} >$  təbəqələrində aparılmışdır.

$\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$  folqalarının Ni ionları ilə interkalyasiyası ortorombik quruluşa malik 1,33%  $\text{Ni}_{1,297}\text{Te}$  birləşməsinin əmələ gəlməsi ilə nəticələnir. Tədqiqatlardan  $\text{Ni}_{1,297}\text{Te}$  birləşməsinin fəza qrupunun  $\text{Pmc}2_1$ , qəfəs parametrlərinin  $a = 3,909 \text{ \AA}$ ,  $b = 6,863 \text{ \AA}$ ,  $c = 12,340 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 90^\circ$ ,  $\beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 90^\circ$  olduğu müəyyən edilmişdir.

$\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$  laylı kristallarının pilləvari səth relyefləri tədqiq edilmişdir, bu da özünü təşkil etmə prosesinin maddənin köçürülməsi, yəni atomların diffuziyası ilə baş verdiyini təsdiq edir. [10-11].

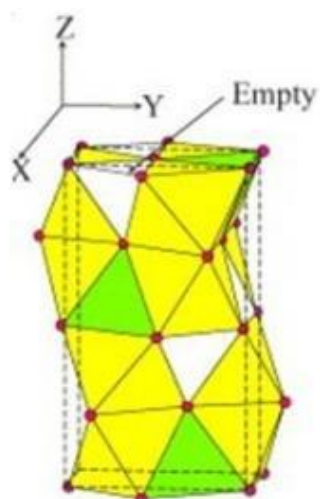
İşdə [12-13]  $d \sim 0.5 \text{ nm}$ -ə uyğun gələn  $\text{Ni}_{1,297}\text{Te}$  klasterlərinin ölçüləri müəyyən edilmişdir.  $\text{Ni}_{1,297}\text{Te}$  klasterləri  $a \times 3a \times c$  altıbucaqlı  $\text{Ni}_{0,55}\text{Se}_{0,08}\text{Te}_{0,37}$  strukturunun təhrif olunmuş ortorombik versiyası kimi təsvir edilə bilər.

Həmçinin, rentgen analizinin nəticələrinə əsasən iddia etmək olar ki, Ni ionları səthindəki defekt quyularında boş yerləri dolduraraq 1,17% -  $\text{Ni}_{1,297}\text{Te}$  və 1,33% Ni-Se-Te tərkibli zəncirlər əmələ gətirə bilər. Tək özək ölçüsü  $D-35 \pm 5 \text{ nm}$  olduqda, hissəciklərin birləşmə müstəvilərinə paralel istiqamətdə folqa müstəvi təbəqəsi ilə eyni xəttə yerləşən, ölçüləri 35, 70, 100 nm olan ikili, üçlü, dördlü  $\text{Ni}_{1,297}\text{Te}$  nanonaqillər əmələ gəlir.



Şəkil 1.  $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3} < \text{Ni} >$  folqalarında tərkibinin rentgen faza analizi.



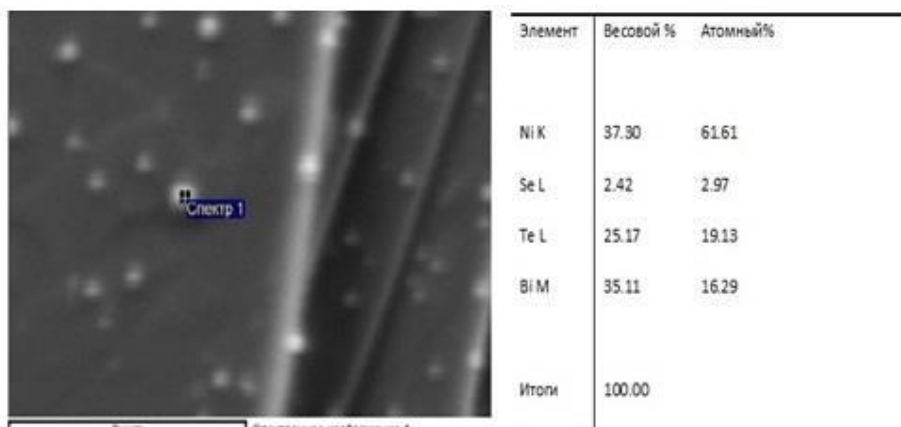


Şəkil 2. Fəza qrupu  $Pmc2_1$ , qəfəs parametrləri  $a = 0,39089$  nm,  $b = 0,68627$  nm,  $c = 1,23400$  nm olan  $Ni_{1.29}Te$  klasterinin quruluşu [8].



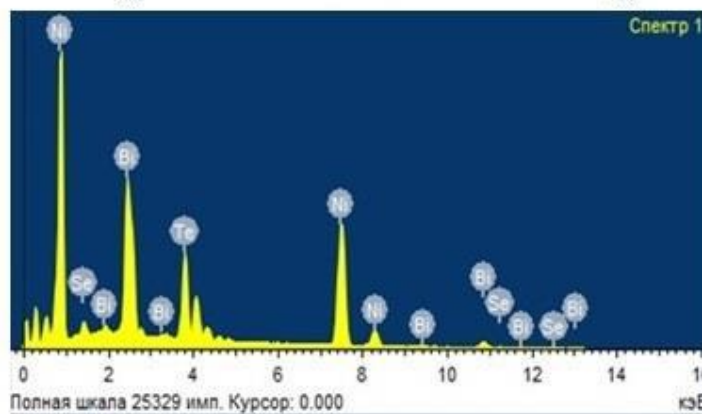
40nm

Şəkil 3. (2D), orta ölçülü  $D-35 \pm 5$  nm  $Ni_{1.297}Te$  özək və iki, üç, dörd özəkli nanonaqillər.



a.

b.



c.

Şəkil 4. SEM mikroskopunda sferik  $Ni_{1.297}Te$  nanokristalitəri: a) elektron təsviri, b) element cədvəli, c) spektrin tam bölgüsü.

Şəkil 3-dən görüldüyü kimi ölçüləri  $D-35 \pm 5$  nm bərabərdir. Bu ölçülü özəklər  $n-106$  atomlardan təşkil olunur. Belə özəklər birləşərək nanokristallitlər təşkil edir. Ni<sub>1.297</sub>Te özəkdən ibarət olan ikili, üçlü, dördlü nanonaqillər formalaşır.

R. Adelung tədqiqatlarından məlumdur ki, materiallarda və sistemlərdə effektlərin ölçüsü 100 nm-dən az olan hissəciklər tədqiq edilmişdir. Səthin çuxurlarında, doymamış atom rabitələrində nanokristallitlər əmələ gəldiyi göstərilmişdir [14]. V.Dubrovskiy və A. Qruzintsev göstərmişlər ki, nanotel nanokristalları bir çox digər nanostrukturular kimi özünütəşkil prosesləri nəticəsində deyil, səthin ilkin hazırlanması nəticəsində əmələ gəlir. Diametri, hündürlüyü, forması, sıxlığı, quruluşu və tərkibinə dəqiq nəzarət etmək mümkün olur [15-16].

Bizim aldığımız nanokristallitlər 100 nm civarında özəklərdən və nanonaqillərdən ibarətdir və səthə yaxın çuxurlarda öz-özünə təşkil olunub. Nanotel nanokristalları bu nümunələrdə müşahidə edilməmişdir.

Nümunənin layının səthindəki pilləvari defektlərin sərhədlərində yaranan Ni<sub>1.297</sub>Te-un tədqiqi SEM (Skanedici Elektron Mikroskopu) vasitəsilə aparılmışdır.

Şəkil 4-də 500-600 nm ölçüdə Ni<sub>1.297</sub>Te pilləli müstəvinin hamar səthində formalaşmasına və nanokristallitlərin element cədvəlinə əsasən Ni<sub>1.297</sub>Te birləşməsinin stexiometryası göstərilmişdir.

Alınmış nəticələr göstərir ki, Bi<sub>2</sub>Te<sub>2.7</sub>Se<sub>0.3</sub> laylı kristalların səthinin pilləvari kənarlarında yeni fazanın böyüməsi əsas iki proseslə müəyyənləşir: nikel ionlarının elektrik sahəsində daşınması və defektlərdə toplanması. Özəklərin kristallaşması koaleksensiya prosesi ilə baş verir və nanokristallit özəklərin ölçüləri 500-600 nm ola bilər [17].

A<sub>2</sub>B<sub>3</sub><sup>V</sup> kristalların laylı səthində nanoölçülü özəklərin yerləşdirilməsi praktiki əhəmiyyətə malikdir və yeni nanokompozit material kimi tətbiq oluna bilər.

Bu formalaşma hadisəsinin mexanizmi stoxastik sistemlərdə koherent hadisələr nöqtəyi-nəzərindən təsvir edilmişdir. Mümkün tətbiqlərin spektrlər üzrə orta statistik göstəricilərini nəzərə alaraq ayrı-ayrı tədqiq olunan proseslərin həyata keçirilməsi üçün, təsadüfi proseslərin riyazi aparatına və sahələrinə əsaslanan özək-nanokristallit modelinin işlənilməsi və hazırlanması və yaradılmasının mümkünlüyü göstərilmişdir.

#### 4. NƏTİCƏLƏR

Rentgen struktur tədqiqatı əsasında nikel ilə interkalyasiya edilmiş Bi<sub>2</sub>Te<sub>2.7</sub>Se<sub>0.3</sub> birləşməsinin fəza qrupu Pmc2<sub>1</sub> qəfəs parametrləri  $a = 3.909 \text{ \AA}$ ,  $b = 6.863 \text{ \AA}$ ,  $c = 12.340 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 90^\circ$ ,  $\beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 90^\circ$  -ə uyğun olan ortorombik quruluşlu Ni<sub>1.297</sub>Te yarımqeçiri özəklər aşkar edilmişdir. Nikel ionlarının Bi<sub>2</sub>Te<sub>2.7</sub>Se<sub>0.3</sub> birləşməsinin səthə yaxın defektlərində Ni-Te-Se zəncirlərini əmələ gətirməsi Van-der-Vaals səthində doymamış sərbəst rabitələrin bərpası ilə əlaqədardır.

Bi<sub>2</sub>Te<sub>2.7</sub>Se<sub>0.3</sub> <Ni> səthinin skanedici elektron mikroskop vasitəsilə tədqiq etdiyimiz zaman sferik formalı maksimal ölçüsü 500-600 nm olan Ni<sub>1.297</sub>Te tərkibli nanokristallitlər aşkar edilmişdir. Bu sferik nanokristallitlər layların pilləvari defektlərində formalaşır. Bi<sub>2</sub>Te<sub>2.7</sub>Se<sub>0.3</sub> laylı krisralların pilləvari kənarlarında yeni fazanın böyüməsi əsas iki proseslə müəyyənləşir - nikel ionlarının elektrik sahəsində daşınması və defektlərdə toplanması. Özəklərin kristallaşması koaleksensiya prosesi ilə baş verir.

Van-der-Vaals səthinə yaxın, ölçüləri ~35 nm olan Ni<sub>1.297</sub>Te özəklərinin əmələ gəlməsi - quruluşa xas olan 20 nm radiuslu xətti defektlərin çuxurlarının doldurulması ilə əlaqəlidir. Özəklərin quruluşu nikel atomları arasında maqnit mübadiləsi qarşılıqlı təsirinin mühüm rol oynadığı Bi<sub>2</sub>Te<sub>2.7</sub>Se<sub>0.3</sub> laylarının müstəvilərinə yaxın məsələlərdə interkalyant atomlarının öz-özünə təşkili nəticəsində əmələ gəlir, məsələlərdə özəklərin böyümə prosesi enerji baxımından əlverişsiz olur və özəyin böyüməsi dayanır.

Göstərilmişdir ki, Bi<sub>2</sub>Te<sub>2.7</sub>Se<sub>0.3</sub><Ni> yarımqeçiricilərinin interkalyasiyası zaman ortoromboedrik quruluşa malik və orta ölçüsü  $D-35 \pm 5$  nm olan tək, ikiqat, üçlü, dördlü Ni<sub>1.297</sub>Te özəklərinin və nanonaqillərinin öz-özünə təşkili mümkündür.

Bu tədqiqat işində, laylı Bi<sub>2</sub>Te<sub>2.7</sub>Se<sub>0.3</sub> kristalların nikkəllə interkalyasiyası Van-der-Vaals səthində özəklərin əmələ gəlməsi və defektlərin bərpasına səbəb olmuşdur. Bu da, alternativ təbəqələrdən ibarət birləşmənin nanokompozit material kimi istifadə edilməsinə imkan verir. AFM metodu ilə Van-der-Vaals səthlərində ortorombik quruluşa malik Ni<sub>1.297</sub>Te özəklərinin nanokristallitlərdən ibarət olduğu göstərilmişdir.

- [1] П. Булат, И.А. Дробкин, В.В. Каратаев, В.Б. Освенский, Д.А. Пиенай-Северин. ФТТ, 2010, том 52, вып. 9, с. 1712-1716.
- [2] П.В. Горский, В.П. Михальченко. Термоэлектричество. 2013, №4, с.5-12.
- [3] В.А. Поздняков. Физические материаловедение наноструктурных материалов, Учебные пособия, М.: МГИУ, 2007. с. 423.
- [4] Я.А. Сычикова. Журнал Computational nanotechnology ISSN 2313-223X, 2016, №1 с. 40-45.
- [5] В.И. Кляцкин, Д.Гурарий. Когерентные явления в стохастических динамических системах. УФН, 1999, 169 171-207.
- [6] Я.А. Сычикова. ФИП PSE, 2015, т. 13, № 2, vol. 13, с.164-168.
- [7] Я.А. Сычикова Физическая инженерия поверхности. 2010, т.8, №3, с. 259-264.
- [8] Н.Е. Сорокина, В.В. Авдеев, А.С. Тихомиров, М.А. Лутфуллин, М.И. Саудишинов. Композиционные наноматериалы на основе интеркалированного графита, МГУ имени М.В.Ломоносова Научно-образовательный центр по нанотехнологиям, 2010, с. 8.
- [9] В.Б. Боледзюк, З.Д. Ковалюк З.Р. Кудринский, О.С. Литвин, А.Д. Шевченко. Журнал технической физики, 2014, том 84, вып. 10, с. 45.

- [10] Н.А. Абдуллаев, С.Р. Азимова, О.А. Алиев, К.М. Джафарли, К.Ш. Кахраманов, Н.М. Абдуллаев, Тепловое освальдовское созревание эвтектик термоэлектрических систем  $A^{IV}B^{VI}-NiSb$ , Микро- и нанотехнологии в электронике Материалы XI международной Научно-технической конференции 3–8 июня 2019 г. Нальчик, с. 226-230.
- [11] С.Р. Азимова. Формирование дефектов в тонких фольгах из слоистых кристаллов. *Elmi əsərlər. Ученые записки. Scientific works*, №2, 2019, с. 33-37.
- [12] L.D. Gulay, I.D. Olekseyuk. *Journal of Alloys and Compounds*, vol.376, Issues 1–2, 11 August 2004, p. 131-138.
- [13] D. Lubomir D. Gulay, I. Olekseyuk, *Crystal Structures of the Compounds  $Ni_3Te_2$ ,  $Ni_{3-\delta}Te_2$  ( $\delta = 0.12$ ) and  $Ni_{1.297}Te$* , October 2004 *ChemInform* 35(41).
- [14] R. Adelung, O. C. Aktas, J. Franc, A. Biswas, R. Kunz, M. Elbahri, J. Kanzow, U. Schurmann and F. Faupel. *Nature Materials*. 2004, т. 3, с. 375.
- [15] В.Г. Дубровский, Г.Э. Цырлин, В.М. Устинов. *Физика и техника полупроводников*, 2009, том 43, вып. 12.
- [16] А.Н.Грузинцев, А.Н. Редькин, З.И. Маковей, Е.Е. Якимов, К. Бартхоу (C.Barthou). *Физика и техника полупроводников*, 2007, том 41, вып.6, с. 730-734.
- [17] В.Г. Дудбровский. *Письма в ЖТФ*, 2010, том 36, вып.5, с. 53-61.

**S.R. Azimova, N.M. Abdullaev**

### **SPECIFIC FEATURES OF GRAIN AND NANOWIRES FORMATION IN LAYERED $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$ CRYSTALS**

In work was studied the features of the formation of Ni-Te-Se chains in quintiles of  $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$  crystals intercalated with nickel. It was found that nanocrystalline grains are formed on the surfaces of layers connected by Van-der-Waals interaction.

**С.Р. Азимова, Н.М. Абдуллаев**

### **ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ЗЕРЕН И НАНОПРОВОДОВ В СЛОИСТЫХ КРИСТАЛЛАХ $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$**

В работе изучались особенности формирования цепочек Ni-Te-Se в квинтилях кристаллов  $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$ , интеркалированных никелем. Установлено, что на поверхностях слоев, связанных Ван-дер-Ваальсовским взаимодействием происходит формирование нанокристаллических зерен.

*Qəbul olunma tarixi: 29.11.2021*

**S.Q. Abdullayev, M.Ş. Qocayev, A.K. Qulayeva**

### **MÜON KOLLAYDERLƏRİNDƏ CP-TƏK ASİMMETRİYALARIN TƏDQIQI**

Minimal Supersimmetrik Standart Model çərçivəsində müon kollayderlərində fermion cütünün yaranması prosesində CP-tək asimetriyalar tədqiq edimişdir. Müon-antimüon cütünün, həmçinin də fermion-antifermion cütünün ixtiyari polyarlaşma halları nəzərə alınmaqla, prosesin effektiv kəsiyi üçün ümumi ifadə alınmışdır. Müon-antimüon cütünün polyarlaşma halları ilə bağlı uzununa və eninə CP-tək asimetriyalar, həmçinin də fermion və antifermionun uzununa və eninə polyarlaşma dərəcələri təyin edilmişdir. Həmin xarakteristikaların öyrənilməsi Hiqqz bozonların təbiəti haqqında informasiya verə bilər.

**Məmmədova Rəsmiyə Lətif**

### **POLİPROPİLEN/Na<sup>+</sup> MONTMORİLLONİT TIPLI NANOGİL KOMPOZİTLƏRİNDƏ POLYARİZASIYA PROSESLƏRİ VƏ ELEKTRET XÜSUSİYYƏTLƏRİ**

İşdə Na<sup>+</sup> montmorillonit + polipropilen (PP) və nanogil əsasında nanokompozitlərin elektret xüsusiyyətləri və polyarlaşma prosesi araşdırılıb. Təcrübədən tapılan elektretin kompensasiya gərginliyinin qiymətini bilərək, elektrotermopolyarlaşma prosesi zamanı elektretlərin səthində yığılan yüklərin səth sıxlığının  $\sigma$  qiymətləri məlum düsturdan istifadə edilərək hesablanır. Nanogil əlavələri olan poliolefinlərin elektret xüsusiyyətlərinə malik olması səbəbindən elmi və praktik maraq doğurur.

**A.S. Hüseynova**

### **PP VƏ PE ƏSASINDA ALINMIŞ NANOKOMPOZİTLƏRİN RELAKSASIYA ZAMANINA ELEKTROTERMOPOLYARLAŞMANIN TƏSİRİ**

PP və PE-ə əsasında bir sıra nanokompozitlər üçün elektrotermopolyarlaşmanın elektret yüklərinin səthi sıxlığına və dönmə temperaturundan relaksasiya müddətinə təsiri öyrənilib. Göstərilib ki, nanodoldurucunun (1% MnO<sub>2</sub>, 0.5% MnO<sub>2</sub>, 7% ZrO<sub>2</sub>, 2% TiO<sub>2</sub>, 1% PbCrO<sub>4</sub>) əlavə edilməsi nanokompozitlərin elektret potensial fərqi əvvəlcə artması, sonra isə azalması ilə müşahidə olunur. Belə asılılıq nanokompozitin komponentləri arasında mövcud olan polimer matrisanın sərhəd təbəqələrinin fiziki strukturunun dəyişməsi və polyarizasiya şərtlərindən asılı olaraq, fazalararası təbəqədə baş verən qarşılıqlı təsir qüvvələrinin dəyişməsi ilə izah olunur. Yüknün relaksasiya müddətinin dönmə temperaturdan asılılığı da bütün nümunələr üçün təxminən eyni meyllikdədir.

**S.R. Bağirova**

### **POLİMERİN MOLEKUL KÜTLƏSİNİN VƏ BƏZİ BİRATOMLU SPİRTLƏRİN POLİVİNİLPIRROLİDON-DEKSTRAN-SU İKİFAZALI SİSTEMLƏRİNİN HAL DİAQRAMINA TƏSİRİ**

İşdə bəzi biratomlu spirtlərin (metanol, etanol, propanol) və PVP-nin molekulyar kütləsinin PVP-Dekstran-su ikifazlı sistemin hal diaqramına təsirinə baxılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, metanolun (CH<sub>3</sub>OH), etanolun (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH) və propanolun CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH təsiri ilə ikifazlı PVP-Dekstran-su ikifazlı sisteminin binodal əyrisi homogen oblasta doğru sürüşür, yəni heterogen oblast böyüyür. PVP-nin molekulyar kütləsinin artması ilə sistemin bimodal əyrisi koordinat başlanğıcına doğru sürüşür. Alınmış nəticəni belə izah etmək olar: PVP-Dekstran-su ikifazlı sisteminin faza-məhləgətirən komponentləri suyun strukturunu özünəməxsus şəkildə dəyişdirir. Spirtlərin mühitə daxil etdikdə, onların hidrosil qrupları məhluldakı su molekulları ilə hidrogen rabitəsinə girir və suyun strukturunu dağıdır, nəticədə faza-məhləgətirən komponentlərin bəzisi həllolması asanlaşır. PVP-nin molekulyar kütləsinin artması eyni konsentrasiyalı məhlulda polimer molekullarının sayı azaldığından, mühitdəki sərbəst su molekullarının sayı artır və həllolma asanlaşır.

**İ.İ. Abbasov**

### **HƏYƏCANLANMA İŞİĞİNİN DALĞA UZUNLUĞUNUN LO FONONUN ENRJİSİNƏ YAXIN İNTERVALDA DƏYİŞMƏKLƏ POLİKİRİSTALLİK ZnSe -də UDMA KƏNARINDA MÜŞAHİDƏ OLUNAN LÜMINESSENSİYANIN TƏDQIQI**

Xüsusi aşqarlanmamış CVD (chemical vapor deposition-buxar halından kimyəvi çökdürmə) polikristallik ZnSe nümunəsini otaq temperaturunda dalğa uzunluğunu 440-dən 435nm-ə qədər 5nm, yəni ZnSe -də LO fononunun enerjisi qədər dəyişmək şərti ilə işıqla həyəcanlandırdıqda, 451-468nm dalğa uzunluğu intervalında müşahidə olunan lüminessensiya spektrinin müəyyən xüsusiyyətləri öyrənilmişdir. Bu tədqiqatla göstərilən dalğa uzunluqlu intervalda müşahidə olunan anomal udma kənarında süalanmanın selen və oksigen artıqlaması ilə müəyyən olunan ZnSeO (Se) nümunəsi üçün lokallaşmış eksiton süalanması kimi polyariton izahı daha da dəqiqləşdirilmişdir.

**R.A. Hasanova**

**GÜMÜŞ VƏ TELLURLA AŞQARLANMIŞ  $Ag_2Te$  BİRLƏŞMƏSİNİN  
ELEKTROFİZİKİ XASSƏLƏRİNİN TƏDQIQI**

Məqalədə gümüş və tellurla aşqarlanmış  $Ag_2Te$  birləşməsinin elektrofiziki xassələrinin öyrənilməsi göstərilmişdir. Eyni zamanda,  $p$  -  $Ag_2Te$  kristalında  $S$  –şəkilli VAX müşahidə olunur ki, ondan yaddaş elementi kimi istifadə etmək olar. Gümüş və tellurla aşqarlanmış  $Ag_2Te$  birləşməsinin elektrofiziki xassələri öyrənilərkən, onlara radiasiyanın təsiri də tədqiq olunmuşdur.

**Ş.Ş. Əmirov**

**FABRİ-PERO REZONATORUNDA DALĞA ƏDƏDLƏRİ FƏRQİNİN ULTRA  
QISA İMPULSLARIN ENERJİSİNƏ TƏSİRİ**

Güclü dalğanın kompleks amplitudunun dəyişmədiyi sabit amplitud yaxınlaşmasında Fabri-Pero tipli rezonatorada cəm tezlikli ultra qısa lazer impulslarının enerjisi üçün analitik ifadə alınmışdır. Dalğa ədədləri fərqlinin cəm tezlikli ultra qısa lazer impulslarının enerjisinə təsiri, qrup sürətləri fərqi və faza modullaşmasını nəzərə almaqla, öyrənilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, məsələnin digər parametrlərinin qiymətlərindən asılı olaraq, enerji maksimumlarının dalğa ədədləri fərqlinin həm müsbət, həm də mənfi qiymətlərinə uyğun olur. Dalğa ədədləri fərqlinin müxtəlif qiymətlərində enerjinin maksimumlarına rezonatorun qaytarma əmsalının müəyyən optimal qiyməti uyğun gəlir. Faza modullaşmasının artması ilə enerjinin azalması müşahidə olunmuşdur.

**E.R. Həsənov, R.K. Mustafayeva, Ş.M. Xalidova**

**HİDRODİNAMİK HƏRƏKƏTDƏN YARANAN MAQNİT SAHƏSİ**

Hidrodinamik hərəkət zamanı yaranan maqnit sahəsi üçün analitik ifadə alınıb. Larmor tezliyi hesablanıb. Uzununa və eninə dalğalar halında maqnit sahənin analitik ifadələri müxtəlifdir.

**Vəli A. Hüseyinov, Rəsmiyyə E. Qasımova, Nərmin A. Zeynalova**

**MAQNİT SAHƏSİNDƏ AŞAĞI ENERJİLİ NEYTRİNONLARIN ENİNƏ POLYARLAŞMIŞ  
ULTRARELATİVİSTİK ELEKTRONLARDAN ANTİSTOKS SƏPİLMƏSİ**

Biz standart Waynberg-Salam modeli çərçivəsində, Z-bozon propaqatoru effekti nəzərə alınmaqla, xarici sabit bircins maqnit sahəsində aşağı enerjili neytrinoların (relikt neytrinolar da daxil olmaqla) eninə polyarlaşmış ultrarelativistik elektronlardan anti-Stoks səpilməsini araşdırırıq. Zəif sahə halında relikt neytrinoların elektronlardan səpilməsinin kəsiyinə sahə və polyarlaşma effektlərinin verdiyi pay olduqca kiçikdir və Z-bozon propaqatoru prosesin kəsiyinə praktik olaraq pay vermir.

**Vəli A. Hüseyinov, Rəsmiyyə E. Qasımova**

**MAQNİTLƏŞMİŞ ULDUZLARDA AŞAĞI ENERJİLİ ANTİNEYTRİNONLARIN ENİNƏ  
POLYARLAŞMIŞ ULTRARELYATİVİSTİK ELEKTRONLARDAN SƏPİLMƏSİ**

Biz standart Waynberg-Salam modelinin aşağı enerjili yaxınlaşmasında xarici sabit bircins maqnit sahəsində kifayət qədər aşağı enerjili antineytrinoların eninə polyarlaşmış ultrarelativistik elektronlardan səpilməsini tədqiq edirik və alınmış nəticələrin astrofiziki tətbiqinə baxırıq.

**Şakir M. Nağıyev, Şövqiyyə Ə. Əmirova, Həsən P. Vəliyev**

**"DƏQIQ HƏLL EDİLƏ BİLƏN VƏ KVAZİ-HARMONİK DAVRANIŞLI QEYRİ-XƏTTİ KVANT  
OSSİLATORU" VƏ "KOORDİNATDAN ASILI EFFEKTİV KÜTLƏLİ FORMACA İNVARİANT  
SİSTEMLƏRİN CƏBRİ ÜSULLA HƏLLƏRİ" VƏ DİGƏRLƏRİNƏ DAİR ŞƏRH**

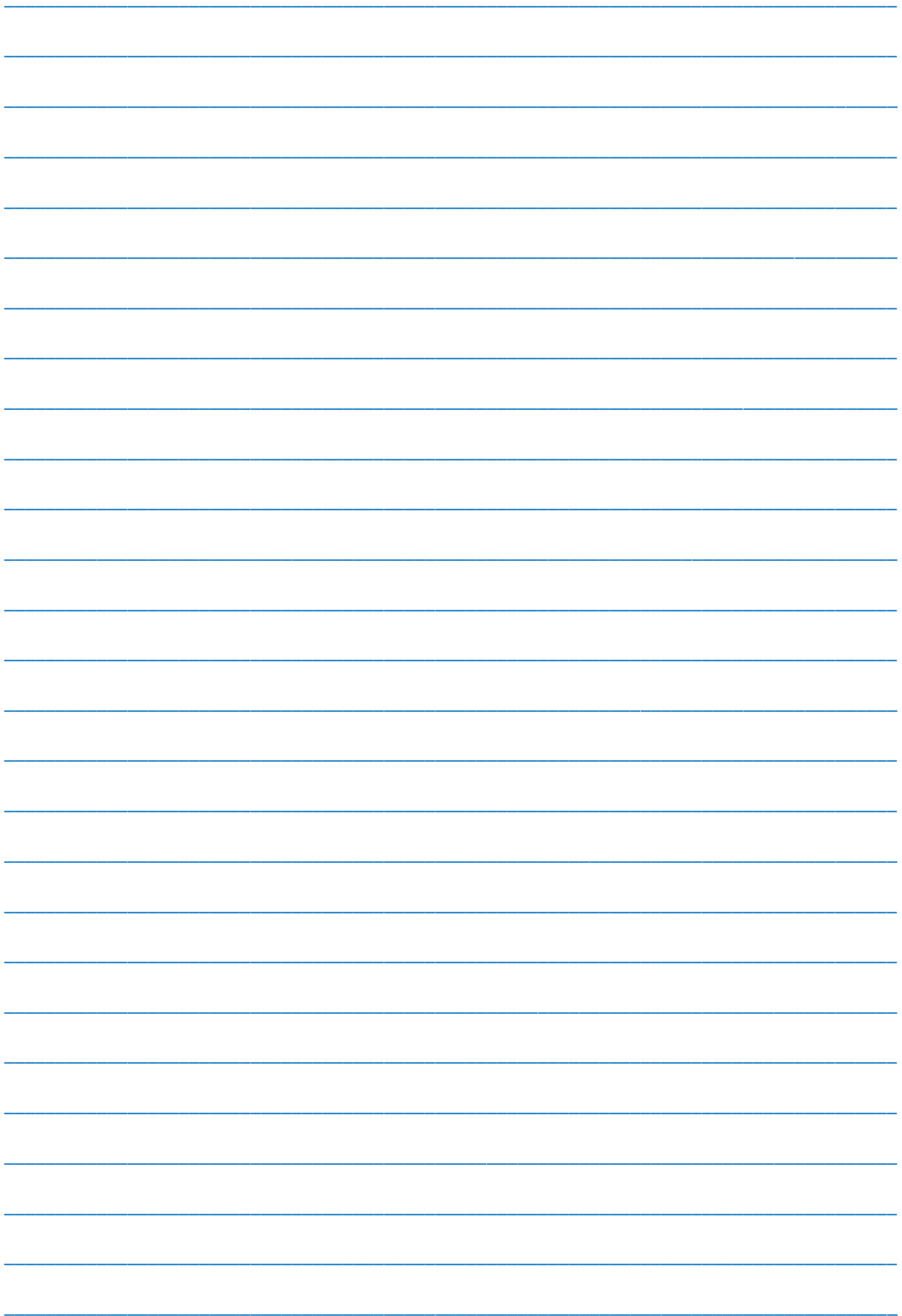
[3, 4] məqalələri [1] - işində təklif olunmuş qeyri-xətti klassik harmonik osillatorun kvant versiyasının öyrənilməsinə həsr edilmişdir. [3, 4] məqalələrinin müəllifləri klassik Hamiltonian üçün müxtəlif kvantlanma sxemlərini tətbiq etmişlər və kvant qeyri-xətti harmonik osillatorun dalğa funksiyalarını, uyğun olaraq,  $\Lambda$ -dan asılı  $\mathcal{H}_n(y, \Lambda)$  Hermit coxhədlilərlə və  $\tilde{\lambda}$ -dəyişdirilmiş  $\mathcal{H}_n(\zeta, \tilde{\lambda})$  Hermit coxhədlilərlə ifadə etmişlər. Göstərmişik ki, bu coxhədlilər yeni coxhədlilər deyil, əslində onlar  $\Lambda < 0$  və  $\tilde{\lambda} < 0$  üçün  $C_n^\nu(x)$  Gegenbauer coxhədliləridir,  $\Lambda > 0$  və  $\tilde{\lambda} > 0$  üçün isə  $P_n(x; \nu, N)$  psevd-Yakobi coxhədlilərinin parametrləri  $\nu = 0$  qiymətinə uyğun  $P_n(x; 0, N)$  xüsusi hallarıdır. Bundan əlavə, biz  $P_n(x; 0, N)$  coxhədliləri üçün yeni törədici funksiya qurmuş və onların  $C_n^\nu(x)$  coxhədlilərlə əlaqəsini tapmışıq, həmçinin psevd-Yakobi coxhədlilərlə bağlı iki dəqiq həll oluna bilən potensial qurmuşuq.

**S.S. Hüseynova**

**ZnO SUPERQƏFƏSİNDƏ MƏXSUSİ NÖQTƏVİ DEFEKT LƏRİN VƏ Cu AŞQARLAMAQLA  
TƏMƏL PRİNSİPLƏRDƏN ÖYRƏNİLMƏSİ**

Bu məqalədə mis aşqarlı ZnO superqəfəslərinin elektron və maqnit xassələrinin ab initio hesablamaları təqdim edilir. ZnO əsasında vurtsit tipli altıbucaqlı strukturlarda sink və ya oksigen atomlarının nöqtəvi defektləri olduqda elektron halı sıxlığının dəyişməsi nəzərə alınmışdır. Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi çərçivəsində müxtəlif psevdopotensiallardan istifadə edərək, mis aşqarlı ZnO strukturları, eləcə də müxtəlif yüklü defekt vəziyyətlərini ehtiva edən ZnO əsaslı strukturlar üçün maqnit momentləri və qadağan





## MÜNDƏRİCAT

1. ZnSnAs <sub>2</sub> kristalının struktur və elektron xassələrinin təməl prinsiplərdən tədqiqi <b>V.N. Cəfərova</b>	3
2. Ge-As-Se-S xalkogenid şüşəvari sistemində rentgen difraksiya səpilməsi <b>S.İ. Mehdiyeva, R.İ. Ələkbərov, S.M. Məmmədov</b>	7
3. CuInZnSe <sub>3</sub> birləşməsinin dielektrik xassələri <b>S.İ. İbrahimova</b>	11
4. A <sup>II</sup> B <sub>2</sub> <sup>III</sup> C <sub>4</sub> <sup>VI</sup> (f.qr. S <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ) tip birləşmələrdə atomlararası rabitənin güc sabitləri <b>İ.Ə. Məmmədova</b>	15
5. CuInSe <sub>2</sub> monokristalının səthində formalaşan məsaməli nanoquruluşların onun elektrik və optik xassələrinə təsiri <b>İ. Qasımoğlu, Q.S. Mehdiyev, Z. Qadiroğlu, İ.A. Məmmədova, İ.Q. Nəsimov, C.T. Hüseynov</b>	18
6. Qora-Uilyams kinetik enerji operatoru ilə ifadə olunan kvant harmonik ossilyatorunun xarici qravitasiya sahəsində dəqiq həlli <b>A. M. Məmmədova</b>	22
7. Metal-oksid nanohissəcikləri ilə modifikasiya olunmuş termoplastik polimer əsaslı nanokompozitlərin fotoluminessensiya və elektret xassələri <b>A.M. Rəhimli</b>	30
8. Günəş batareyalarında istifadə olunan ifrat nazik silisium təbəqələrinin parametrləri <b>E.Ə. Kərimov</b>	36
9. La <sub>1-c</sub> Sr <sub>c</sub> Mn <sub>1-y</sub> Zn <sub>y</sub> O <sub>3</sub> (c+y=0.15, 0.17) aşqarlanmış manqanitin müqavimətinin temperatur asılılığının tədqiqi <b>A.M. Abdullayev, M.C. Nəcəfzadə, İ.N. İbrahimov</b>	40
10. Bi <sub>2</sub> Te <sub>2.7</sub> Se <sub>0.3</sub> laylarında kristallik özəklərin vənanoməftillərin formalaşması xüsusiyyətləri <b>S.R. Əzimova, N.M. Abdullayev</b>	46
11. <b>FİZİKA, 2021, vol. XXVII №4 section: En</b> buraxılışında dərc olunan məqalələrin qısa xülasəsi	51



[www.physics.gov.az](http://www.physics.gov.az)