

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI

Əlyazması hüququnda

As – Ge – Se və As – Ge – Te ŞÜŞƏVARİ YARIMKEÇİRİCİ SİSTEMLƏRİN LOKAL QURULUŞU VƏ FONON SPEKTRİ

İxtisas: 2220.01-Yarımkeçiricilər fizikası

Elm sahəsi: Fizika

İddiaçı: **Humay İbrahim qızı Məmmədova**

Fəlsəfə doktoru elmi dərəcəsi
almaq üçün təqdim edilmiş dissertasiyanın

AVTOREFERATI

Bakı-2023

Dissertasiya işi Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutunun “Qeyri-kristallik yarımkeçiricilərin fizikası və elektronikasi” laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir.

Elmi rəhbər: Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Abasət İsa oğlu İsayev

Rəsmi opponentlər: AMEA-nın həqiqi üzvü fizika - riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Cavad Şahvələd oğlu Abdinov

Fizika - riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Yusif Quşu oğlu Nurullayev

Fizika - riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Rauf Mədət oğlu Sərdarlı

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Ali Attestasiya Komissiyasının Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya şurası



Akademik
Arif Məmməd oğlu Həşimov

fizika elmləri doktoru, dosent
Rəfiqə Zabil qızı Mehdiyeva

Elmi seminarın sədri:

fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, dosent
Tələt Rzaqulu oğlu Mehdiyev

İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI

Mövzunun aktuallığı və işlənmə dərəcəsi. Qeyri – kristal yarımkeçirici materiallarda mövcud olan quruluş xüsusiyyətləri - atomların düzülüşündə transilyasiya simmetriyasının, uzaq nizamın olmaması, mərkəz kimi seçilmiş atomların yaxın qonşularını əhatə edən oblastlarda - birinci koordinasiya sferası hədudlarında isə kristallara məxsus olan atomlararası korrelyasiyanın saxlanıldığı yaxın nizam oblastının (YNO) (Short range order - SRO) mövcudluğu xalkogenid şüşəyəbənzər yarımkeçirici (HŞY) maddələrə də xasdır.

Difraksiya metodları ilə alınmış nəticələr və quruluşun riyazi modelləşdirilməsi göstərir ki, yaxın nizam oblastından kənarda, bir neçə koordinasiya sferasını əhatə edən və ölçüsü nanometr miqyasında olan fəzada da quruluş elementlərinin düzülüşündə müəyyən nizam mövcuddur. Orta nizam oblastı (ONO) (Medium range order –MRO) adlanan həmin oblastların varlığını sübut edən əsas faktlar rentgen şüalarının və neytronların difraksiya intensivliyinin ($I(Q)$) paylanma əyriələrində və onlardan alınan quruluş faktorunda ($S(Q)$) müşahidə olunan birinci kəskin difraksiya maksimumudur (First sharp diffraction peak- FSDP). Bununla yanaşı, neytronların qeyri-elastiki səpilməsi, işığın aşağı tezlikli Raman səpilməsi və digər başqa eksperimentlər nanometr miqyaslı müəyyən nizamlı (ONO) oblastların varlığını sübut edir.

Yaxın nizamı xarakterizə edən mühüm parametrlər 1-ci koordinasiya sferasına daxil olan atomların sayını göstərən orta koordinasiya ədədi (Z) və xalkogen atomları arasındakı kovalent rabitələrin sayının digər atomlar arasındakı kovalent rabitələrin sayına nisbəti ilə təyin olunan R parametridir. Birincinin dəyişməsi atomların qarşılıqlı vəziyyətin dəyişməsi ilə, ikincinin dəyişməsi isə kimyəvi rabitə növlərinin dəyişməsi ilə nəticələnir. Mövcud nəzəriyyələrə görə 1-ci lokal quruluşun, 2-ci isə kimyəvi rabitələrin astana xüsusiyyətli dəyişməsinə səbəb olur və fiziki xassələrin uyğun dəyişmələri ilə müşayət olunmalıdır. Qeyd olunan yaxın nizam parametrlərinin maddələrin fiziki xassələrinin idarə olunmasında rolunun tədqiqi üçün ən əlverişli obyektlər, koordinasiya ədədləri ilə fərqlənən elementlərdən ibarət olan şüşəyəbənzər çoxkomponentli xalkogenidlərdir. $8 - N$ qaydasına əsasən valent elektronlarının sayı N olan ($N \geq 4$) atom

8 – N sayda kimyəvi rabitə yaradır, yəni həmin sayda yaxın qonşuya malikdir. Ge, As, Se(Te) atomlarının koordinasiya ədədləri uyğun olaraq 4, 3 və 2 – dir. Başqa sözlə, müxtəlif kimyəvi tərkibli şüşəyəbənzər As–Ge–Se, As–Ge–Te sistemlərində yuxarıda qeyd olunan parametrlərin geniş intervalda dəyişməsinə nail olmaq mümkündür.

Koordinasiya ədədlərindəki belə fərqlənmə kimyəvi tərkibi dəyişməklə şüşəyəbənzər matrisanın dəyişilməsinə nail olmaq, həm birölçülü, həm ikiölçülü, həm də üçölçülü quruluşa malik şüşəyəbənzər material almaq üçün imkan yaranmasına səbəb olur. Şüşəyəbənzər matrisada baş verən belə dəyişmələr, fiziki xassələrin dəyişməsi ilə müşayiət olunmalı, quruluşu ilə fiziki xassələr arasındakı korrelyasiya haqqında informasiya əldə etməyə və mümkün praktiki tətbiqini aydınlaşdırmağa imkan verməlidir. Belə XŞY sistemlərin digər üstünlüyü şüşələşmə oblastının kifayət qədər geniş olmasıdır.

Tədqiqat üçün seçilən obyektlərin perspektivliyi həm də XŞY materiallarının praktik tətbiq oblastlarının geniş spektrə malik olmaları ilə əlaqədardır. İnfraqırmızı (İQ) oblastda yüksək həssaslığa, yüksək optik sındırma əmsalına, yüksək optik qeyri-xəttliliyə, kimyəvi davamlılığa malik materialların yaradılması aktual problem kimi tədqiqatçıların diqqətini son zamanlar daha çox cəlb edir. Bu ilk öncə onunla əlaqədardır ki, qeyd olunan xüsusiyyətlərə malik materiallar optoelektronika, fiber optika, qeyri xətti optik sistemlər, yaddaş qurğuları üçün perspektiv material hesab edilir. Çox komponentli XŞY materialların quruluşunun modifikasiyasına səbəb olan kimyəvi tərkibini dəyişməklə, aşqarlar əlavə etməklə makroskopik xassələrinə təsir etmək və beləliklə də həmin problemin həllinə müəyyən töhfə vermək mümkündür. Beləliklə, dissertasiyada qarşıya qoyulan məqsəd və aparılan tədqiqatlar kifayət qədər aktualdır.

Tədqiqatın obyektı və predmeti:

Tədqiqatın obyektı $As_8Ge_6Se_{86}$, $As_{16.67}Ge_{8.33}Se_{75}$, $As_{20}Ge_{10}Se_{70}$, $As_{25}Ge_{12.5}Se_{62.5}$, $As_{18.2}Ge_{18.2}Se_{63.6}$, $As_{17}Ge_{28}Se_{55}$, $As_{16.67}Ge_{8.33}Te_{75}$, $As_{20}Ge_{10}Te_{70}$, $As_{25}Ge_{12.5}Te_{62.5}$, $As_{18.2}Ge_{18.2}Te_{63.6}$, $As_{17}Ge_{28}Te_{55}$ qeyri-kristal sistemləri, predmeti isə qeyd olunan maddələrin lokal quruluşunun və fonon spektrinin tədqiqidir.

Tədqiqatın məqsədi və vəzifələri:

As – Ge – Se(Te) xalkogenid şüşəvari yarımkeçiricilərdə yaxın və orta nizam quruluşunun kimyəvi tərkibdən asılılıq qanunauyğunluqları, fonon spektri, optik, elektrik və mexaniki xassələrlə yaxın və orta nizam parametrləri arasındakı əlaqənin müəyyənləşdirilməsidir.

Bu məqsədə nail olmaq üçün:

- Fırlanan soba üsulu ilə $As_8Ge_6Se_{86}$, $As_{16.67}Ge_{8.33}Se_{75}$, $As_{20}Ge_{10}Se_{70}$, $As_{25}Ge_{12.5}Se_{62.5}$, $As_{18.2}Ge_{18.2}Se_{63.6}$, $As_{17}Ge_{28}Se_{55}$, $As_{16.67}Ge_{8.33}Te_{75}$, $As_{20}Ge_{10}Te_{70}$, $As_{25}Ge_{12.5}Te_{62.5}$, $As_{18.2}Ge_{18.2}Te_{63.6}$, $As_{17}Ge_{28}Te_{55}$ tərkibli XŞY materialları sintez olunmuşdur;
- Piknometr metodu ilə amorf halda olan nümunələrin sıxlıqları ölçülmüşdür;
- Vakuumda termik uçurma üsulu ilə sintez olunmuş maddələrin 1 ÷ 10 mkm qalınlıqlı təbəqələri alınmışdır;
- Rentgen şüalarının difraksiyası, fonon spektri (ışığın Raman səpilməsi), spektrin görünən və yaxın infraqırmızı oblastlarında optik udulma əmsalının spektral paylanması tədqiq olunmuşdur;
- Sendviç quruluşuna malik As – Ge – Se(Te) təbəqələrində yükdaşınma prosesinə elektrik sahəsinin təsiri stasionar rejimdə tədqiq olunmuşdur.

Tədqiqat metodları:

Aparılan tədqiqatlarda As – Ge – Se(Te) qeyri-kristal maddələrinin lokal quruluşunun, fonon spektrinin və elektron xassələrinin tədqiqi üçün Rentgen şüalarının difraksiyası, Raman spektroskopiyası, optik spektroskopiya və elektrik sahəsinin yükdaşınmaya təsiri metodları tətbiq olunmuşdur.

Müdafiyyə çıxarılan əsas elmi müddəalar:

1. Kimyəvi tərkibi ilə fərqlənən As – Ge – Se(Te) təbəqələrinin lokal quruluş parametrləri olan korrelyasiya məsafəsinin, ONO oblastlarında kvaziperiodun və nano boşluqların ölçülərinin ədədi qiymətləri;
2. As – Ge – Se(Te) təbəqələrinin amorf matrisasını əmələ gətirən quruluş elementlərinin və atomlar arası kimyəvi

rabitənin növləri və kimyəvi tərkibdən asılı olaraq onlarda baş verən dəyişmələr;

3. As – Ge – Se sisteminin fiziki parametrlərinin – maddənin sıxlığının, atomar həcmnin orta qiymətinin, qablaşma və kiplik əmsallarının, kohessiv enerjinin orta koordinasiya ədədindən və R parametridən asılılıq qrafiklərində müxtəlif oblastların müşahidə edilməsi və çəvik, izostatik, yüksək gərginlikli elastiki halların mövcudluğu ilə əlaqələndirilməsi;
4. As – Ge – Se təbəqələrinin qadağan zonasının eninin, kohessiv enerjisinin, rabitə enerjisinin orta qiymətinin Z və R parametrlərindən asılılığının topoloji və kimyəvi təbiətli astananın mövcudluğu ilə əlaqələndirilməsi;
5. $As_{25}Ge_{12.5}Te_{62.5}$ kimyəvi tərkibli təbəqədə maddə sıxlığının, atomar həcmnin orta qiymətinin, qablaşma və kiplik əmsallarının Z və R-dən asılılığının $R=1$, $Z=2.5$ qiymətlərində ekstremumuma malik olmasının As – Ge – Te sistemin quruluşunda $2D \rightarrow 3D$ keçidinin baş verməsi ilə əlaqələndirilməsi;
6. Düz istiqamətdə elektrik səhəsi tətbiq edilmiş $Te-Ge_xAs_yTe_{100-x-y}-Al$ strukturundan (Te elektrodada müsbət potensial yaratdıqda) yükdaşınma proseslərinin Fermi səviyyəsinin aşağısında yerləşən və dəşiklərin dayaz səviyyələr ilə idarə olunan monopolyar injeksiya cərəyanları ilə baş verməsi;
7. $Te-Ge_xAs_yTe_{100-x-y}-Al$ sturukturunun Te elektroduna mənfi potensial tətbiq olunduğu halda VAX-da müşahidə olunan N şəkilli oblastın amorf xalkogenidlərinin topoloji xüsusiyyətləri, U^- mərkəzlərin rolu və yükdaşıyıcıların rekombinasiya – generasiya prosesləri nəzərə alınmaqla izahı.

Tədqiqatın elmi yeniliyi:

- İlk dəfə olaraq kompleks şəkildə As – Ge – Se(Te) nazik təbəqələrinin yaxın və orta nizam tərtibli lokal quruluş parametrlərinin, fonon spektrinin, optik, elektrik və mexaniki xassələrinin kimyəvi tərkibdən asılılığı tədqiq olunmuşdur;

- As – Ge – Se(Te) nazik təbəqələrində kimyəvi tərkibdən asılı olaraq korrelyasiya məsafəsinin, MRO oblastı daxilində kvaziperiodun, qablaşma və kiplik əmsallarının, məhdudiyətlərin ədədi qiymətlərində və atomar həcmnin orta qiymətində baş verən dəyişmələr təcrübi olaraq müşahidə olunmuş və alınan nəticələr boşluq-klastər modeli və topoloji məhdudiyətlər nəzəriyyəsi əsasında izah olunmuşdur;

- As – Ge – Se(Te) təbəqələrinin amorf matrisasını əmələ gətirən kimyəvi rabitə növləri, əsas quruluş elementləri təyin olunmuş və kimyəvi tərkibdən asılı olaraq onlarda baş verən dəyişmələr müəyyən olunmuşdur;

- Qadağan zonanın optik eninin, orta rabitə enerjisinin, kohessiv enerjinin, maddənin sıxlığının, kipləşmə əmsalının orta koordinasiya ədədindən və kimyəvi rabitələrin növünü təyin edən R parametrindən asılılıq xüsusiyyətləri tədqiq olunan HŞY sistemlərdə topoloji və kimyəvi təbiətli astanaların mövcudluğu ilə izah edilmişdir;

- Fonon və optik udulma spektrlərində baş verən dəyişmələr, qadağan zonanın optik eninin, rabitə enerjisinin orta qiymətinin kimyəvi tərkibindən asılılığı kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelinin əsas prinsiplərinə əsaslanaraq icazəli zonaların sərhəddində lokal elektron hallarının mövcudluğu nəzərə alınmaqla izah olunmuşdur;

- $\text{Te-Ge}_x\text{As}_y\text{Te}_{100-x-y}$ –Al strukturundan yükdaşınma prosesi iki istiqamətdə elektrik sahəsi tətbiq etməklə (Te elektrodda müsbət və mənfi potensial yaratmaqla) tədqiq olunmuş və alınan nəticələr amorf halkogenidlərinin topoloji xüsusiyyətləri, U^- mərkəzlərin rolu və yükdaşıyıcıların rekombinasiya – generasiya prosesləri nəzərə alınmaqla izah olunmuşdur.

Tədqiqatın nəzəri və praktiki əhəmiyyəti:

Dissertasiya işinin nəticələri mürəkkəb komponentli xalkogenid şüşəvari yarımkeçiricilərin fonon və elektron xassələrinin mexanizmlərinin müəyyənləşdirilməsində tətbiq oluna bilər;

Tədqiq olunan XŞY As – Ge – Te sistemi 3- 20 mkm dalğa uzunluğunu əhatə edən intervalda şəffaflığı və optik sındırma əmsalının yüksək qiyməti (dalğa uzunluğunun 1,55 mkm qiymətində $n \sim 3,5$) ilə digər şüşəyəbənzər materiallardan fərqlənir. Qeyd olunan xüsusiyyətlərə malik olan materiallar optoelektronika, fiber optika,

qeyri xətti optik sistemlər, yaddaş qurğuları üçün perspektiv material hesab edilir. Dissertasiyada tədqiqat oblastlarının həm mexaniki, həm elektrik, həm də optik parametrlərinin yaxın nizam parametrləri olan koordinasiya ədədindən, rabitələrin növünü xarakterizə edən R parametrdən asılılığının geniş tədqiq olunması həmin tətbiq sahələri üçün yararlı olan kimyəvi tərkiblərin seçilməsində faydalı ola bilər.

Aprobasiyası və tətbiqi:

Dissertasiyanın nəticələri aşağıdakı elmi konfranslarda məruzə edilmişdir:

- Akademik H.B. Abdullayevin 100 illiyinə həsr olunmuş “Kondensə Olunmuş Maddələr Fizikasında Müasir İstiqamətlər” (MTCMP-2018, Bakı, Fizika İnstitutu) Beynəlxalq Konfransı;
- Amorf və mikrokristallik yarımkeçiricilərə dair 11-ci Beynəlxalq Konfrans (Sankt-Peterburq, 2018);
- “Amorf və Nanoquruluşlu xalkogenidlər” haqqında 9-cu Beynəlxalq Konfrans (Moldova Respublikası, Kişinyov, 2019);
- "Üzvi və Qeyri Üzvi Materiallarda Elektron Proseslər" haqqında XII Beynəlxalq Konfrans (ICEPOM-12, Kamianets-Podilsky, Ukraine, 2020);
- Amorf və mikrokristallik yarımkeçiricilərə dair XII Beynəlxalq Konfrans (Sankt-Peterburq, 2021).
- Akademik M.H. Şahtaxtinskiyin 90-illik yubileyinə həsr olunmuş "Kompozisiyalı quruluşlar fizikası" mövzusunda konfrans (Naxçıvan, 2022).
- Amorf və mikrokristallik yarımkeçiricilərə dair XIII Beynəlxalq Konfrans (Sankt-Peterburq, 2023).

Dissertasiya işinin mövzusunə dair yerli və xarici elmi nəşrlərdə 16 elmi əsər çap olunmuşdur. Bunların 9-u məqalə 7-si isə beynəlxalq konfrans materialıdır.

Dissertasiya işinin yerinə yetirildiyi təşkilatın adı:

Dissertasiya işi Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutunda yerinə yetirilmişdir.

Dissertasiyanın strukturu və həcmi:

Dissertasiya işi giriş, dörd fəsil, nəticələr və 144 adda istinad edilmiş ədəbiyyatın biblioqrafik siyahısından ibarət olmaqla, 135 səhifədə şərh olunmuşdur. Dissertasiya işində 24 şəkil, 10 cədvəl

vardır. Şəkillər, cədvəllər və istinad edilmiş ədəbiyyat siyahısı istisna olmaqla giriş 19746, I fəsil 46898, II fəsil 10301, III fəsil 37619, IV fəsil 50423, nəticələr 2620, ixtisarlara və şərti işarələr 3716 işarədən ibarətdir. Dissertasiya işinin ümumi həcmi 171323 işarədən ibarətdir.

DİSSERTASIYANIN ƏSAS MƏZMUNU

Girişdə dissertasiya işinin mövzusunun aktuallığı əsaslandırılmış, işin məqsədi, elmi yeniliyi, praktiki əhəmiyyəti göstərilmiş, müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar, aprobeasiya dərəcəsi, nəşrlər barədə məlumat verilmiş, həmçinin fəsil üzrə əsas məzmunu qısaca şərh olunmuşdur.

Birinci fəsildə amorf və şüşəvari maddələrin alınması, atom və lokal quruluşuna, fiziki parametrlərinin tədqiqinə aid müasir tədqiqat işləri təhlil edilmişdir. XŞY sistemlərdə uzaq nizamın (UNO) (longe range order - LRO) – yəni atomların düzülüşündə periodikliyin olmaması, yaxın nizamın (YNO) (short range order - SRO) isə mövcudluğu, yəni istənilən atoma qonşu olan atomların koordinatlarının nizamla paylaşılması qeyri-kristal maddələrin, o cümlədən As – Ge – Se(Te) XŞY sistemlərinin xassələrinin formalaşmasında əsas rol oynayır. Bununla yanaşı olaraq həmin parametrlərin kristala məxsus parametrlərdən azacıq fərqlənməsi fiziki xassələrinin kristallardan kəskin fərqlənməsinə səbəb olur. Eyni zamanda qeyd etmək lazımdır ki, son dövrdə amorf və şüşəvari maddələrin tədqiqinə həsr olunmuş elmi ədəbiyyatlarda orta nizam (ONO) (medium range order – (MRO)) quruluşunun mövcudluğu vacib problem kimi ortaya çıxır. Orta nizam – birinci koordinasiya sferasının radiusundan böyük məsafələrdə yerləşən atomlar arasındakı korrelyasiya və birinci koordinasiya sferasının hüdudlarından kənarında atomların yerləşməsində mövcud olan müəyyən qanunauyğunluqdur.

Mövcud ədəbiyyatın təhlili göstərir ki, bu sahədə kifayət qədər tədqiqatlar aparılmasına baxmayaraq, hələ də As – Ge – Se və As – Ge – Te XŞY sistemlərdə baş verən fiziki proseslərin mexanizmini izah etmək və həmçinin praktikada yararlı stabil xassəli materialların alınması üçün mühüm əhəmiyyət kəsb edən tədqiqat işlərinin aparılmasına ehtiyac var. Dissertasiya işində tədqiqat obyektini olaraq qeyd olunan tərkiblərin seçilməsi ona daxil olan elementlərin

atomlarında valent elektronların sayca fərqlənməsi ilə bağlıdır. Bu atomların koordinasiya ədədinin fərqlənməsi kimyəvi tərkibi dəyişərək şüşəyabənzər matrisanın quruluşunu dəyişməyə, yəni bir, iki və üç ölçülü quruluşa malik şüşəvari matrisa almağa imkan verir.

Beləliklə, mövcud elmi ədəbiyyatın təhlili XŞY materialların lokal quruluşu, amorf matrisanın yaranmasında iştirak edən kimyəvi rabitələrin və quruluş elementlərinin növləri və fiziki xassələri haqqında müəyyən informasiyalar verir. Lakin XŞY materialların fiziki xassələrinin izahında topoloji xüsusiyyətlərinin roluna həsr olunmuş tədqiqatların kifayət qədər olmaması, Z və R-in daha geniş intervalda dəyişməsinə imkan verən çoxkomponentli obyektlərdə aparılan tədqiqatların az olması, həm maddələrin lokal quruluşu haqqında geniş informasiya almağa, həm də optik, yükdaşınma və digər fiziki proseslərin mexanizminin müəyyənləşdirilməsi və idarə olunması metodlarının aydınlaşdırılmasında müəyyən çətinliklər yaradır və bu istiqamətdə yüksək informasiya tutumlu yeni tədqiqatların aparılmasını zəruri edir.

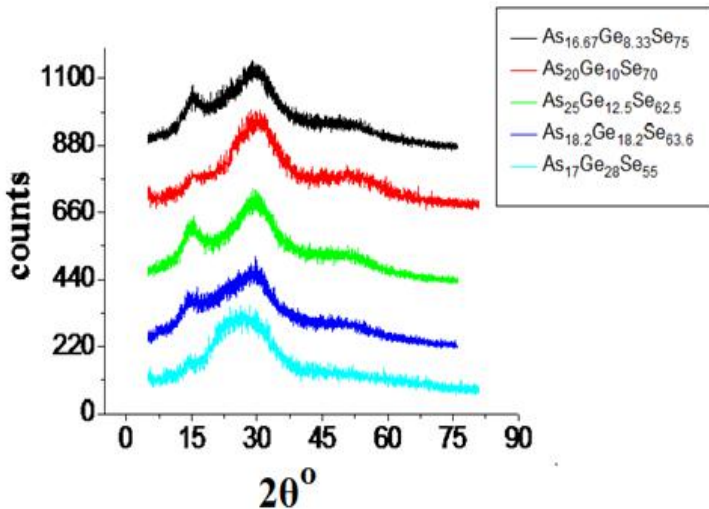
Beləliklə, elmi ədəbiyyatın geniş təhlili dissertasiya işində aparılan tədqiqatların həm elmi, həm də praktiki cəhətdən vacib problemin həllinə müəyyən töhvə verə bilməsi təsəvvürə yaradır.

İkinci fəsildə amorf və şüşəvari materialların alınma üsulları və həmçinin tədqiqat obyektini kimi seçilmiş $As_8Ge_6Se_{86}$, $As_{16.67}Ge_{8.33}Se_{75}$, $As_{20}Ge_{10}Se_{70}$, $As_{25}Ge_{12.5}Se_{62.5}$, $As_{18.2}Ge_{18.2}Se_{63.6}$, $As_{17}Ge_{28}Se_{55}$, $As_{16.67}Ge_{8.33}Te_{75}$, $As_{20}Ge_{10}Te_{70}$, $As_{25}Ge_{12.5}Te_{62.5}$, $As_{18.2}Ge_{18.2}Te_{63.6}$, $As_{17}Ge_{28}Te_{55}$ tərkibli materialların sintez texnologiyası, lokal quruluşun tədqiqində istifadə olunan metodlar şərh olunmuşdur. Vakuumda termik buxarlandırma üsulu ilə qalınlığı $1 \div 10$ mkm olan təbəqələr alınmışdır. Tədqiqatlar əsasən Almaniyanın Bruker firmasının istehsalı olan D2 PHASER toz difraktometrində, Nanofinder-30 üçölçülü konfokal lazer mikrospektroqrafında (Tokyo Instr., Japón), SPEKOL 1500 UV-VİS spektrofotometrində aparılmış və həmin metodlara uyğun proqram təminatı ilə nümunələrə xas olan parametrlər hesablanmışdır. Tədqiq olunan nazik təbəqələrin optik buraxma əmsallarının spektral asılılıqları WINASPEKT paket proqram təminatından istifadə olunaraq avtomatik rejimdə komputərə verilmişdir. Alınan təcrübi nəticələrin komputərə verilməsi

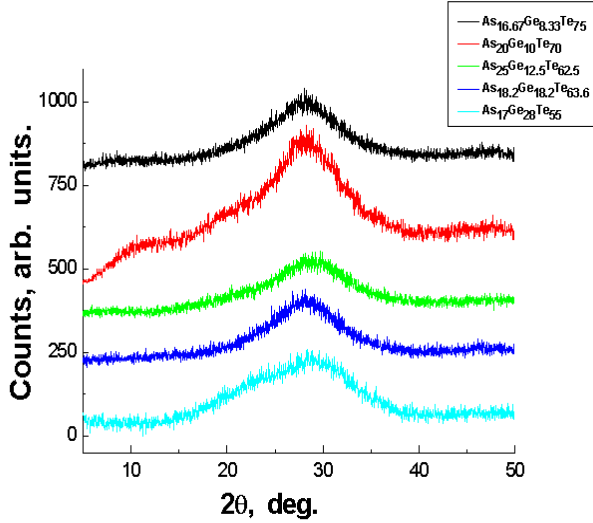
spektrofotometrin RS-232 interfeysinin vasitəsilə əldə edilmişdir. Optik tədqiqatlar dalğa uzunluğunun $\lambda=190 \div 1100$ nm intervalında və otaq temperaturunda yerinə yetirilmişdir. Qeyd olunan tədqiqatların aparılması zamanı istifadə olunan SPEKOL 1500 spektrofotometrin fotometrik dəqiqliyi $\sim 0.01 \text{ \AA}$ tərtibində olmuşdur.

Üçüncü fəsil XŞY As – Ge – Se(Te) sistemləri əsasında alınmış təbəqələrin lokal quruluşu, topoloji xüsusiyyətləri və mexaniki xassələrinin, rentgen şüalarının difraksiyası, Raman spektroskopiyası və məhdudiyətlər nəzəriyyəsinin əsas prinsiplərinin tətbiqi metodları ilə tədqiqindən alınan nəticələrin şərhinə həsr olunmuşdur. Rentgen şüalarının difraksiyası təcrübələri əsasında As – Ge – Se şüəvari sisteminin lokal quruluş parametrləri (orta nizam oblastında kvaziperiod və korrelyasiya uzunluğu) təyin olunmuş və fiziki parametrlərin (sıxlıq, qablaşma əmsalı, kiçik əmsalı, atomar həcmnin orta qiyməti, cütləşməmiş elektronların sayı, kohessiv enerji) orta koordinasiya ədədindən və atomlar arasında kimyəvi rəbitənin xarakterini müəyyənləşdirən R parametridən asılılıqları müəyyənləşdirilmişdir.

Şəkil 1.-də As – Ge – Se(Te) maddələrinin vakuumda termik buxarlandırma üsulu ilə alınan təbəqələrində rentgen şüalarının difraksiya səpilməsi əyriləri təsvir olunmuşdur.



a)



b)

Şəkil 1. Vakumda termik buxarlandırma üsulu ilə alınan As – Ge – Se (a) və As – Ge – Te (b) təbəqələrində rentgen şüalarının difraksiyasında intensivliyin paylanma mənzərəsi.

Difraksiya mənzərəsində müşahidə olunan geniş maksimumlar tədqiq olunan nümunələrin amorfliyünü sübut edir. As – Ge – Se sistemlərində rentgen şüalarının difraksiya səpilməsi intensivliyinin paylanmasını təsvir edən qrafiklərdə əksər şüşəvari maddələrə xas olan temperatur və təzyiqdən anomal asılılığı ilə digər difraksiya piklərindən fərqlənən birinci kəskin difraksiya piki (BKDP) müşahidə olunur (şəkil 1.a), As – Ge – Te sistemində isə BKDP yalnız $As_{20}Ge_{10}Te_{70}$ kimyəvi tərkibli təbəqələrdə (şəkil 1.b) müşahidə olunur. Qeyri-kristal maddələrin lokal quruluşu haqqındakı müasir təsəvvürlərə əsasən belə qənaətə gəlmək olar ki, tədqiq olunan obyektlərin difraksiya mənzərəsində müşahidə olunan fərqlilik onların lokal quruluş xüsusiyyətlərinin fərqliliyi ilə əlaqədardır. Başqa sözlə As – Ge – Se sisteminin tədqiq olunan kimyəvi tərkiblərinin hamısında BKDP-nin müşahidə olunması onlarda orta nizam oblastının formalaşdığını göstərir. As – Ge – Te sistemində yalnız orta

koordinasiya ədədinin 2,4 qiymətinə uyğun gələn $As_{20}Ge_{10}Te_{70}$ kimi kimyəvi tərkibli təbəqədə BKDP-nin müşahidə olunması yalnız həmin tərkibdə orta nizam oblastının əmələ gəldiyini göstərir. Beləliklə, bu təcrübi fakt As – Ge – Te sisteminin quruluşunun nizamsızlıq dərəcəsinin daha yüksək olmasına dəlalət edir. Yalnız $As_{20}Ge_{10}Te_{70}$ tərkibində BKDP-nin müşahidə olunması topoloji nizamlılığın ($Z=2,4$) yaranması ilə izah oluna bilər.

Amorf və şüşəvari maddələrin quruluşunun molekulyar səviyyədə tədqiqi üçün adətən molekulyar dinamika və ya digər atomar modelləşmələrdən istifadə olunur. Lakin qeyd olunan metodlar onlarda baş verən fiziki proseslərin mikroskopik səviyyədə interpretasiyasını tam təmin edə bilmir. Bu problem haqqında qeyri-kristal materialların quruluşu və onlarda baş verən fiziki proseslərin mikroskopik səviyyədə izahı ilə məşğul olan aparıcı mütəxəssislərin rəyinə görə belə metodların təkmilləşməsi hələ uzun müddətli tədqiqatların aparılmasını tələb edir. Lakin son dövrdə tədqiqatçılar tərəfindən istifadə olunan topoloji məhdudiyətlər nəzəriyyəsi (TMN) maddələrin fiziki xassələrinin kimyəvi tərkibdən asılılığını şərh etmək üçün müvəffəqiyyətlə istifadə olunur. Təqdim olunan dissertasiya işində də bu metod müvəffəqiyyətlə istifadə olunmuşdur.

Nizamsız quruluşlu materiallara məxsus amorf matrisanın kimyəvi və topoloji nizamlılığı R parametri və orta koordinasiya ədədi (Z) ilə xarakterizə olunur. Buna görə tədqiq olunan maddələrin lokal quruluşunu xarakterizə edən fiziki parametrlərin, xüsusilə də sıxlığın (ρ), orta atomar həcmi (V_a), qablaşma əmsalının (κ), kiplik əmsalının (δ) Z (a) və R (b)-dən asılılıqları tədqiq olunmuşdur. Aparılan təhlillərin yekun nəticəsi olaraq As – Ge – Se(Te) sistemlərinə daxil olan kimyəvi tərkiblərin sıxlıqlarının, orta atomar həcmələrinin, qablaşma əmsalının, kiplik əmsalının, kohessiv enerjisinin Z və R-dən asılılıq qrafiklərində ekstremumun (ρ, κ, δ parametrləri üçün maksimum, V_a üçün minimum) varlığı ($Z = 2.5$; $R = 1$ qiymətlərində) kimyəvi təbiətli sızıntı astanası ilə əlaqələndirilmiş və göstərilmişdir ki, həmin ekstremum stexiometrik $Ge_{12.5}As_{25}Se_{62.5}$, $Ge_{12.5}As_{25}Te_{62.5}$ tərkiblərinə uyğundur və onların kimyəvi formulaları üçün $[0.625(As_{0.4}Se_{0.6})] \cdot [0.379(Ge_{0.333}Se_{0.666})]$, $[0.625(As_{0.4}Te_{0.6})] \cdot [0.379(Ge_{0.333}Te_{0.666})]$ ifadələri təklif olunmuşdur. Z və R-in $Z =$

2.5 – 2.55 və $R = 1 - 0.998$ intervalına düşən qiymətlərində qeyd olunan asılılıqların xüsusiyyətləri həmin intervala uyğun olan ($As_{25}Ge_{12.5}Se_{62.5}$, $As_{18.2}Ge_{18.2}Se_{63.6}$, $As_{25}Ge_{12.5}Te_{62.5}$ və $As_{18.2}Ge_{18.2}Te_{63.6}$) kimyəvi tərkibli maddələrin çevik və yüksək gərginlikli sərt şüşə halları arasında keçid fazasını əmələ gətirən izostatik sərt şüşə halı kimi qəbul edilmişdir. Z və R –in $Z > 2.55$; $R < 0.998$ qiymətlərinə uyğun gələn tərkiblər ($As_{18.2}Ge_{18.2}Se_{63.6}$; $As_{17}Ge_{28}Se_{55}$; $As_{18.2}Ge_{18.2}Te_{63.6}$; $As_{17}Ge_{28}Te_{55}$) yüksək gərginlikli sərt şüşə halına uyğun gəlirlər.

Şəkil 2. və şəkil 3.-də As – Ge – Se(Te) sistemlərinə məxsus işığın Raman səpilmə spektrləri (fonon spektrləri) təsvir olunmuşdur. Şəkil 2.-dən görüldüyü kimi, $As_{16.67}Ge_{8.33}Se_{75}$ XŞY tərkibinə məxsus işığın Raman səpilmə spektrində tezlikləri $198-285 \text{ sm}^{-1}$ intervalını əhatə edən 218, 220, 230, 236, 252 sm^{-1} səciyyəvi tezlikli piklər və $265 \div 285 \text{ sm}^{-1}$ intervalında mailliyi aydın seçilən asılılıq və o cümlədən, $178 \div 198 \text{ sm}^{-1}$ diapozonunda yerləşən geniş səpilmə zolaqları müşahidə olunmuşdur. Spekrtdə 230 sm^{-1} və 252 sm^{-1} tezliklərinə uyğun piklər uyğun olaraq $AsSe_{3/2}$ – quruluş elementlərinin simmetrik gərilmələri, Se_8 -həlqələrinin və $Se-Se-Se$ – zəncirvari malekulların rəqsləri ilə əlaqələndirilmişdir. Bütün tərkiblərə məxsus spektrlərdə müşahidə olunan 195 sm^{-1} tezlikli maksimum (2 və 6 – cı tərkiblərin spektrlərində xüsusilə aşkar müşahidə olunur) $GeSe_4$ tetraedrində mövcud olan Ge-Se rabitələrinin rəqsi ilə əlaqələndirilir. Tədqiq olunan maddələrin amorf matrisasını əmələ gətirən quruluş elementləri, kimyəvi rabitə növləri və kimyəvi tərkibin variasiyası ilə onlarda baş verən dəyişmələr kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelinin əsas prinsiplərinə əsasən izah olunmuşdur. Kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelinə görə heteropolyar rabitələrin yaranma ehtimalı homeopolyar rabitələrə nisbətən daha yüksəkdir və ilk olaraq rabitə enerjisi yüksək olan rabitələr yaranır. Atomların valentlik tələbləri ödənilənə qədər bu proses davam edir. Qeyd etmək lazımdır ki, kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelindən nəticə olaraq alınır ki, çoxkomponentli xalkogenid şüşəvari sistemlərdə (məsələn, koordinasiya ədədi geniş intervalda dəyişən As – Ge – Se sistemində) yalnız heteropolyar rabitələrdən ibarət olan böhran tərkib halı mövcuddur. Bu baxımdan qeyd olunan modelin tətbiqindən alınır ki,

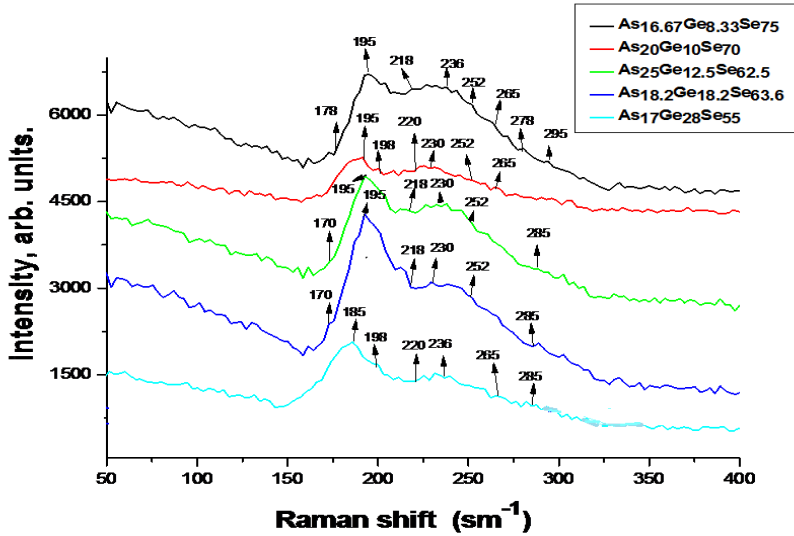
cədvəl 1-də təsvir olunan 4-cü tərkib enerji baxımından əlverişli heteropolyar rabitələrdən təşkil olunan piramidal ($\text{AsSe}_{3/2}$) və tetraedrik ($\text{Ge}[\text{Se}_{1/2}]_4$) quruluş elementlərindən ibarətdir. Həmin maddənin kimyəvi formulunu $0,625(\text{As}_{0,4}\text{Se}_{0,6}) \cdot 0,375(\text{Ge}_{0,333}\text{Se}_{0,666})$ kimi təsvir etmək mümkündür. Cədvəldə təsvir olunan ilk 3 tərkibin yaranmasında heteropolyar rabitələrdən ibarət olan piramidal ($\text{AsSe}_{3/2}$) və tetraedrik ($\text{Ge}[\text{Se}_{1/2}]_4$) quruluş elementləri ilə bərabər xalkogen atomları (Se) arasında yaranan homeopolyar rabitələr də iştirak edir. Yəni, bu halda qalıq selen atomları sözü gedən piramidal və tetraedrik quruluş elementləri arasında rabitələrin yaranmasında iştirak edir, həmçinin selenə məxsus həlqəvi və zəncirvari quruluşlar şəklində öz aralarında rabitələr yaradırlar.

Qeyd olunan quruluş xüsusiyyətləri cədvəl 1-də təsvir olunan 1-ci tərkibə məxsus işığın Raman səpilmə spektrində həlqəvi (Se_8) (252sm^{-1}) və zəncirvari -Se-Se-Se-... (236sm^{-1}) molekulların rəqsinə uyğun gələn maksimumların aydın mənzərə ilə müşahidə olunması ilə öz əksini tapmışdır.

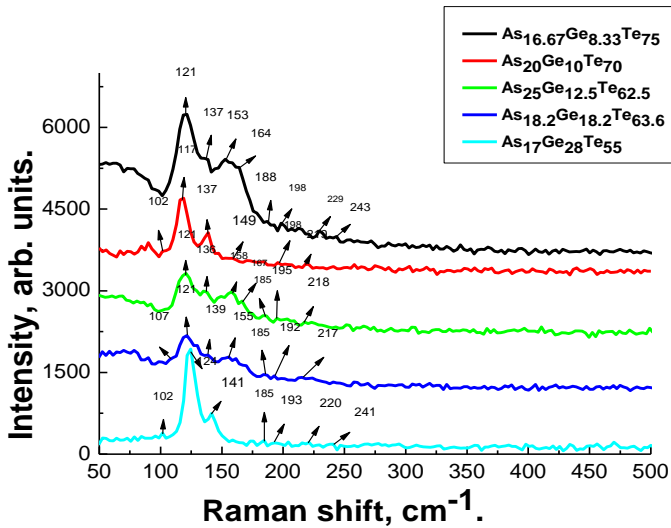
Cədvəl 1. XŞY As-Ge-Se sisteminə daxil müxtəlif kimyəvi tərkibli materiallar üçün məhdudiyətlər miqdarı (N_{co}), R – parametri və orta koordinasiya ədədinin (Z) ədədi qiymətləri.

Kimyəvi tərkib	Z	R	N_{co}
$\text{Ge}_6\text{As}_8\text{Se}_6$	2,2	3,58	2,5
$\text{Ge}_{8,33}\text{As}_{16,67}\text{Se}_{75}$	2,33	1,8	2,83
$\text{Ge}_{20}\text{As}_{10}\text{Se}_{70}$	2,4	1,4	3
$\text{Ge}_{12,5}\text{As}_{25}\text{Se}_{62,5}$	2,5	1	3,25
$\text{Ge}_{18,2}\text{As}_{18,2}\text{Se}_{63,6}$	2,55	0,998	3,375
$\text{Ge}_{28}\text{As}_{17}\text{Se}_{55}$	2,73	0,675	3,825

Tədqiqatlar göstərir ki, xalkogen atomlarının konsentrasiyasının azalması ilə spektr nəzərə çarpan dəyişməyə məruz qalır. Nəticədə kovalent əlaqəli Se atomlarının üstünlük təşkil etdiyi quruluş elementlərinə uyğun gələn səpilmə zolağı ($198 \div 285 \text{ sm}^{-1}$) tədricən zəifləyərək itir. Bunun sayəsində də $170 \div 218 \text{ sm}^{-1}$ intervalını əhatə edən yeni səpilmə zolağı və tetraedrik ($\text{Ge}[\text{Se}_{1/2}]_4$) quruluş elementlərinin simmetrik səpilmə rəqsləri ilə bağlı olan $\sim 195 \text{ sm}^{-1}$ tezlikli geniş maksimum yaranır. Rabitə enerjisi yüksək olan (cədvəl 1) Ge-Se əlaqələrinin yaranma ehtimalı böyük olduğundan spektrdə tetraedrik ($\text{Ge}[\text{Se}_{1/2}]_4$) quruluş elementlərinə məxsus $\sim 195 \text{ sm}^{-1}$ tezlikli pik özünü daha intensiv biruzə verir. Cədvəl 1-də təsvir olunan sonuncu tərkib əsasən qalıq qeyri-xalkogen atomlarının olması ilə fərqlənir. Odur ki, rabitə enerjisinin yüksək olması sayəsində (Ge – Se) əksər germanium (Ge) atomlarının mümkün valent tələbləri ödənilir və qeyri xalkogen atomlarının (As, Ge) qalıq miqdarı isə əsasən Ge – As, As – As rabitələrini əmələ gətirir. Spektrdə $170 \div 185 \text{ sm}^{-1}$ tezliklər intervalında müşahidə olunan piklərlə əlaqədar olan rəqslər qeyd olunan rabitələrin (Ge – As, As – As) varlığı ilə izah olunur. Aparılan təhlil nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, As – Ge – Se sisteminin As və Ge miqdarı az olan tərkiblərində ($\text{Ge}_6\text{As}_8\text{Se}_{86}$ və $\text{Ge}_{8.33}\text{As}_{16.67}\text{Se}_{75}$) $198\text{-}285 \text{ sm}^{-1}$ tezlik intervalını əhatə edən səpilmə zolağı həlqəvi (Se_8) və zəncirvari (- Se-Se-Se- ...) selen molekullarının rəqslərinə uyğun 252 sm^{-1} , 236 sm^{-1} tezlikli maksimumlar müşahidə olunmuşdur. As və Ge atomlarının konsentrasiyasının artması ilə həmin zolaq və maksimumlar tədricən zəifləyir və $170 - 218 \text{ sm}^{-1}$ tezlik intervalını əhatə edən yeni zolaq və $\text{Ge}(\text{Se}_{1/2})_4$, $\text{AsSe}_{3/2}$ quruluş. elementlərin rəqsinə uyğun 195 və 235 sm^{-1} tezlikli maksimumlar yaranır.



Şəkil 2. HŞY As – Ge – Se sistemində işığın Raman səpilmə spektrləri (fonon spektrləri).



Şəkil 3. As-Ge-Te sistemlərində işığın Raman səpilmə spektrləri (fonon spektrləri).

Şəkil 3.-dən göründüyü kimi, $As_{16,67}Ge_{8,33}Te_{75}$ tərkibinə məxsus spektrdə əsasən iki səpilmə zolağı müşahidə olunur. Birinci səpilmə zolağı tezlikləri 121 və 137 sm^{-1} olan maksimumların müşahidə olunduğu spektrin $100 \div 137\text{ sm}^{-1}$ intervalını, ikinci səpilmə zolağı isə 153sm^{-1} tezlikli maksimuma malik $135 \div 245\text{ sm}^{-1}$ tezliklər intervalını əhatə edir. 1-ci səpilmə zolağında müşahidə olunan 121 sm^{-1} tezlikli maksimum $GeTe_4$ tetraedrik quruluş elementlərinin (A_1 – rəqs modlarının simmetrik gərilmə rejimi) rəqsləri və eyni zamanda piramidal $AsTe_3$ (A_1 – rəqs modları) modlarının simmetrik əyilmə rəqsləri ilə əlaqələndirilir.

Tədqiq olunan bütün kimyəvi tərkiblərdə müşahidə olunmaqla tezlikləri $136 \div 141\text{ sm}^{-1}$ intervalını əhatə edən maksimumlara malik səpilmə zolağı tərkibində tellurun atom faiz miqdarı yüksək olan nümunələrdə ($As_{16,67}Ge_{8,33}Te_{75}$ və $As_{20}Ge_{10}Te_{70}$ cədvəl 3.2.1) daha böyük intensivliyə malikdir. Bu nəticə əsasən nizamsız yerləşmiş kiçik ölçülü tellur zəncirlərinin rəqsləri ilə əlaqələndirilir. Buna bənzər nəticə amorf tellurda tezliyi 157sm^{-1} maksimumun müşahidə olunduğu səpilmə zolağı ilə qeyd olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, həmin rəqslərin tezliyi tellur zəncirləri arasında uzaq təsiredici qarşılıqlı təsirlərin hesabına sürüşür. Spektrdə tezliyin 159 sm^{-1} qiymətində müşahidə olunan maksimumla əlaqədar səpilmə zolağı $AsTe_3$ (E – mod) piramidal quruluş elementlərinin antisimmetrik əyilmə rəqsləri, həmçinin tetraedral ayrılma kənarı ilə xarakterizə olunan $GeTe_4$ quruluş elementlərinə məxsus A_1 – rəqs modası və ya amorf tellurda olduğu kimi nizamsız yerləşmiş Te-Te zəncirlərinin rəqsləri ilə əlaqədardır. Digər tərəfdən spektrin $185 \div 195\text{ sm}^{-1}$ tezliklər intervalında müşahidə olunan zəif səpilmə zolağı isə $GeTe_3$ oktaedrik quruluş elementlərinin rəqsləri ilə əlaqələndirilmişdir. Lakin bu halda arsenium (As) atomlarının iştirakı ilə bağlı olan quruluş elementlərinin rəqsləri istisna olunmur. Spektrdə tezliyin $185 \div 195\text{ sm}^{-1}$ və $220 \div 230\text{ sm}^{-1}$ diapozonlarında müşahidə olunan səpilmə zolaqlarının qismən simmetrik (A_1 -rəqs mod) və piramidal $AsTe_3$ quruluş elementlərinin antisimmetrik valent rəqsləri (E-rəqs mod) ilə bağlı olduğunu nəzərə alsaq məlum olur ki, arsenium (As) və germaniumun (Ge) konsentrasiyasının artması ilə yüksək tezlik oblastında müşahidə olunan maksimumlar zəifləyir və ya tamamilə

yox olur. Doğrudan da, 2, 3, 4 və 5 nömrə ardıcılığı ilə işarələnmiş nümunələrdə Raman səpilməsinin intensivliyi spektrin tezlikləri $141 \div 230 \text{ sm}^{-1}$ – i əhatə edən oblastda kəskin zəifləyir və həmin səpilmə zolağı sonuncu nümunədə tamamilə yox olur. Spekrdə müşahidə olunan belə dəyişmələri həmin kimyəvi tərkiblərdə tellur atomlarının iştirak etdiyi quruluş elementlərinin nisbi payının azalması ilə izah etmək olar.

Tellurun atom faiz miqdarı yüksək olan $\text{As}_{16,67}\text{Ge}_{8,33}\text{Te}_{75}$ maddəsinə məxsus fonon spektrində tezliyi 124 sm^{-1} olan geniş maksimumun yaranmasının səbəbi isə tellur atomlarının iştirak etdiyi quruluş elementlərinin və nizamsız paylanmış tellur zəncirlərinin rəqsidir. Tellurun atom faiz miqdarı aşağı olan $\text{As}_{17}\text{Ge}_{28}\text{Te}_{55}$ tərkibində yuxarıda qeyd olunan nizamsız zəncirlərin rəqslərinin nisbi payı çox kiçikdir və bunun nəticəsində səpilmə zolağının eni kiçilir. Spekrdə tezliyin 141 sm^{-1} qiymətində müşahidə olunan dar enliyə malik maksimum isə kristallik tellurun (Te) E – rəqs modlarına aid edilmişdir. 2-5 sayılı nümunələrin Raman səpilmə spektrinin $102 \div 107 \text{ sm}^{-1}$ tezliklər intervalında müşahidə olunan zəif maksimumlar As–Ge–Se sisteminin fonon spektrində də müşahidə olunmuş və As–As, Ge–As əlaqələrinə aid rəqslərin yekun nisbi payının yüksək olması ilə izah olunmuşdur. Tədqiq olunan materialların amorf təbəqələrinin fonon spektrində müşahidə olunan xüsusiyyətlər və həmçinin elektron proseslərində müşahidə olunan digər xüsusiyyətlər kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelinin əsas prinsiplərinə əsaslanaraq kimyəvi tərkibin dəyişməsi ilə amorf matrisanı əmələ gətirən kimyəvi rabitə növlərində və quruluş elementlərində baş verən dəyişmələrlə izah olunmalıdır. Kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelinə görə, $Z = 2,5$ və $R=1$ qiymətinə uyğun gələn stexiometrik tərkiblər yalnız heteropolyar rabitələrdən təşkil olunmuşdur. Tellurla zəngin olan 1-ci və 2-ci nümunələrdə heteropolyar As–Te və Ge–Te rabitələrlə yanaşı homeopolyar rabitələr də yaranır ($R > 1$). Xalkogen atomlarının çatışmazlığı olan tərkiblərdə ($R < 1$) As–As homeopolyar rabitələrin konsentrasiyası yüksək olur (Ge–Te tipli rabitələrin enerjisi kifayət qədər yüksək olduğu üçün germanium atomlarının əksəriyyətinin valent tələbləri tamamilə ödənilir). Kimyəvi rabitələrin növlərində müəyyən olunan dəyişmələr kimyəvi rabitə yaxınlaşma

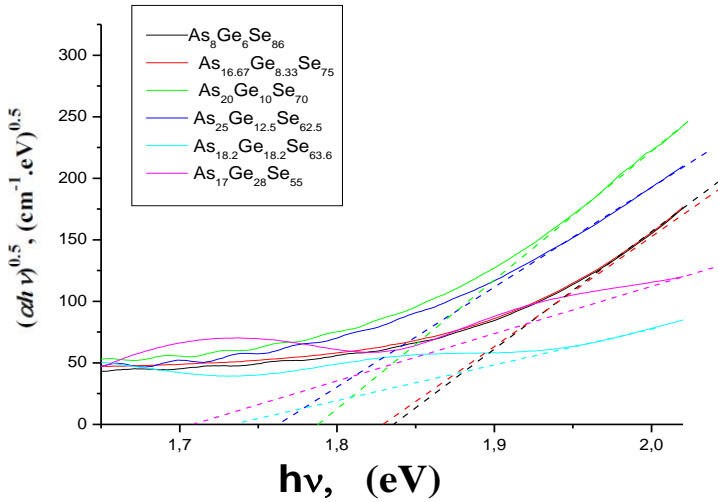
modelinin əsas prinsipləri nəzərə alınmaqla izah oluna bilər. Doğrudan da, stexiometrik tərkibli, $As_{25}Ge_{12.5}Te_{62.5}$ $[0,625(As_{0,4}Te_{0,6})] \cdot [0,379(Ge_{0,333}Te_{0,666})]$ kimyəvi tərkibinin amorf matrisası heteropolyar rabitələrdən tetraedrik $Ge[Te_{1/2}]_4$ və piramidal $AsTe_{3/2}$ quruluş elementlərindən yaranır. Bu nümunələrin fonon spektrində nizamsız yerləşmiş kiçik ölçülü Te zəncirinə xas olan rəqs modasının (157sm^{-1}) da müşahidə olunması və həmçinin $As_{17}Ge_{28}Te_{55}[0,826(Ge_{0,333}Te_{0,666})] \cdot [0,012(Ge_{0,429}As_{0,571})] \cdot [As_{0,163}]$ tərkibli nümunələrdə piramidal və oktaedrik quruluş elementləri arasında homeopolyar Te-Te rabitələrinə məxsus rəqs modasının (141sm^{-1}) mövcudluğu kimyəvi yaxınlaşma modelindən bir qədər kənara çıxmanın baş verdiyini göstərir.

Beləliklə, As-Ge-Te sistemində fonon spektrinin tədqiqinin nəticəsində həmin sistemin amorf matrisasını əmələ gətirən əsas quruluş elementləri və kimyəvi rabitə növləri təyin olunmuşdur. Stexiometrik tərkibli $As_{25}Ge_{12.5}Te_{62.5}$ ($R=1$) sisteminin amorf matrisası əsasən tetraedrik $Ge[Te_{1/2}]_4$ və piramidal $AsTe_{3/2}$ quruluş elementlərindən ibarət olduğu müəyyən olunmuşdur. Lakin fonon spektrində $AsTe_3$ tipli piramidal $GeTe_3$ tipli oktaedrik quruluş elementlərinin və Te-Te kimyəvi rabitələrinin rəqslərinə uyğun tezliklər də müşahidə olunur. Tellur atomlarının artıqlığı olan tərkiblərdə ($As_{16.67}Ge_{8.33}Te_{75}$, $As_{20}Ge_{10}Te_{70}$) yüksək tezlikli maksimumların, tellur atomlarının çatışmazlığı olan tərkiblərdə ($As_{17}Ge_{28}Te_{55}$) isə alçaq tezlikli rəqslərin yaranması kimyəvi yaxınlaşma modelindən qismən kənara çıxmanı göstərir.

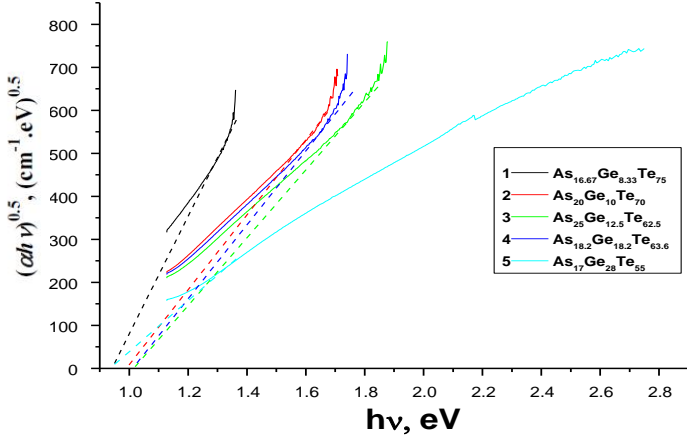
Dördüncü fəsilə As – Ge – Se və As – Ge – Te sistemlərinin optik və yükdaşınma xassələri, həmin xassələri və yaxın nizamı xarakterizə edən parametrlər arasındakı korrelyasiyanın aydınlaşdırılmasına həsr olunan tədqiqatlar şərh olunmuşdur. Bu tədqiqatların nəticəsində qadağan zonanın optik enini təyin etmək üçün nümunələrin buraxma spektrləri optik udulma əmsalının (α) yüksək qiymətlərində tədqiq olunmuş, alınan nəticələr $(\alpha h\nu)^{1/2}$ – in fotonun enerjisindən ($h\nu$) asılılığı kimi şəkil 4.(a,b) – də təsvir olunmuşdur. Tədqiq olunan obyektlərin optik buraxma spektrlərini və sıxlıqlarını təcrübi olaraq ölçməklə və bəzi hesablamalar aparmaqla həm qadağan zonanın optik eninin, həm də fiziki parametrlər olan

kohessiv enerji, orta rabitə enerjisi, qablaşma və kiplik əməslinin orta koordinasiya ədəmindən (Z) və R parametrindən asılılığı araşdırılmışdır. Məlumdur ki, xalkogenid şüşələrin zona quruluşunun təbiətini xalkogen atomlarının p - orbital halları ilə əlaqələndirilir.

Qeyd olunan yanaşmaya görə XŞY maddələrin valent zonası təklənmiş elektron cütü (TEC) (LP electron states) halları, keçirici zona isə antirabitə halları (σ^* — antibonding states) hesabına yararır. Belə yanaşmaya görə tədqiqat zamanı təcrübi təyin olunan qadağan zonanın optik eni (E_g) σ^* - halların ən aşağı energetik vəziyyəti ilə LP – halların yuxarı sərhədi arasındakı energetik məsafəyə uyğun gəlir. Ona görə də, E_g – nin qiyməti qeyd olunan energetik halların (LP və σ^*) dəyişmələrinin nəticəsindən asılı olacaqdır. Koordinasiya ədədinin artması atomlar arası qarşılıqlı təsirin güclənməsinə səbəb olur.



a)



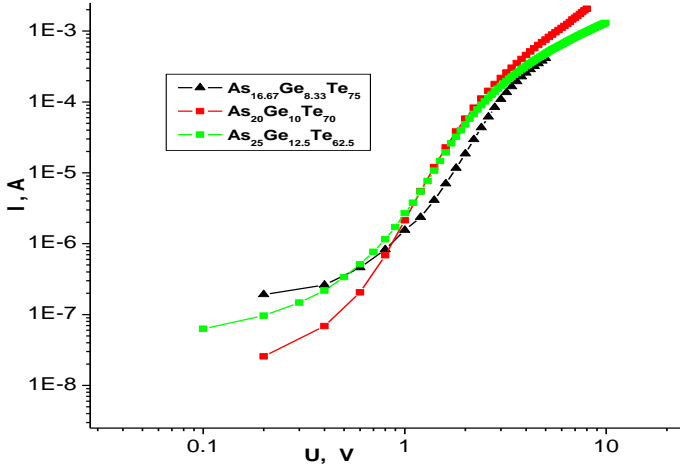
b)

Şəkil 4. As-Ge-Se (a), As-Ge-Te (b) XŞY – sisteminin optik udulma spektri

Qeyd olunan prosesin nəticəsində σ^* hallarının bir-birindən daha çox aralanması baş verir və beləliklə, keçirici zonanın aşağı sərhədi aşağıya doğru sürüşür və nəticədə E_g -nin qiyməti azalır (As-Ge-Se). Bununla bərabər optik qadağan zonanın eni (E_g) maddənin sıxlığı, kohessiv enerji (bütün rabitələrin qırılması üçün tələb olunan enerji) və orta rabitə enerjisinin qiymətlərinin dəyişmələrindən də əhəmiyyətli dərəcədə asılıdır. Müəyyən edilmişdir ki, selen və tellur tərkibli nümunələr üçün maddənin sıxlığının orta koordinasiya ədədindən asılılığı fərqli xarakterə malikdir. Z-in artması birincilərin sıxlığının artması, ikincilərin sıxlığının azalması ilə müşayiət olunur. Bu fakt selen tərkibli maddələrdə yaxın nizam effektlərinin daha güclü, tellur tərkibli maddələrdə isə daha zəif olduğunu göstərir və selenin tellura nisbətən yüksək kimyəvi aktivliyə malik olması ilə əlaqələndirilir. Kohessiv enerjinin (CE) Z və R-in qiymətlərindən asılılığından görüldüyü kimi (cədvəl 4.1.1), $Z=2.4$, $R=1.4$ qiymətlərinə malik olan $\text{Ge}_{20}\text{As}_{10}\text{Se}_{70}$ tərkibi ən optimal stabilliyə malikdir. Orta rabitə enerjisinin qiymətlərindəki maksimum $Z=2.55$

($R=0.998$) olduqda, qablaşma sıxlığında isə anoloji nəticə $Z=2.5$ ($R=1$) halında müşahidə olunmuşdur. Tədqiq olunan maddələrdə bütün parametrlərin ($E_g, E_1, CE, E_m, \kappa$) Z və R – dən asılılıq qanunauyğunluğu $Z=2.5 \div 2.55$ ($R=0.998 \div 1$) intervalında digər oblastlardan fərqlənir. Beləliklə, As–Ge–Se və As–Ge–Te XŞY sistemlərinin təcrübədə müəyyən olunan optik udulma əmsalının spektrinə Taus metodunun tətbiq olunması ilə bütün tərkiblər üçün qadağan zonanın optik eni təyin olunmuş və qadağan zonanın optik eninin, kohessiv enerjisinin, təcrübə təyin olunmuş sıxlığın, molyar həcm, kipləşmə əmsalının orta koordinasiya ədədindən və kimyəvi rabitələrin növünü xarakterizə edən R parametridən asılılıq grafiklərinin təhlili əsasında qadağan zonanın enində baş verən dəyişikliklərin mümkün izahı şərh olunmuşdur. Alınan nəticələr kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelinin əsas prinsipləri əsasında icazəli zonaların sərhədləri yaxınlığında lokal halların mövcudluğunu nəzərə almaqla izah olunmuşdur. Qeyd olunan asılılıqların təhlili tədqiq olunan XŞY sistemlərdə həm topoloji, həm də kimyəvi təbiətli sızıntı astanasının mövcudluğu haqqında ideya irəli sürülmüsünə imkan yaratmışdır. Mövcud tədqiqatların nəticələrinə əsaslanaraq $As_{25}Ge_{12.5}Te_{62.5}$ ($R = 1, Z = 2,5$) tərkibi üçün maddənin sıxlığının, atomların qablaşma və kiplik əmsallarının minimal, orta atomar həcmi isə, maksimal qiymətə malik olması $2D \rightarrow 3D$ –quruluş keçidi ilə əlaqələndirilmişdir.

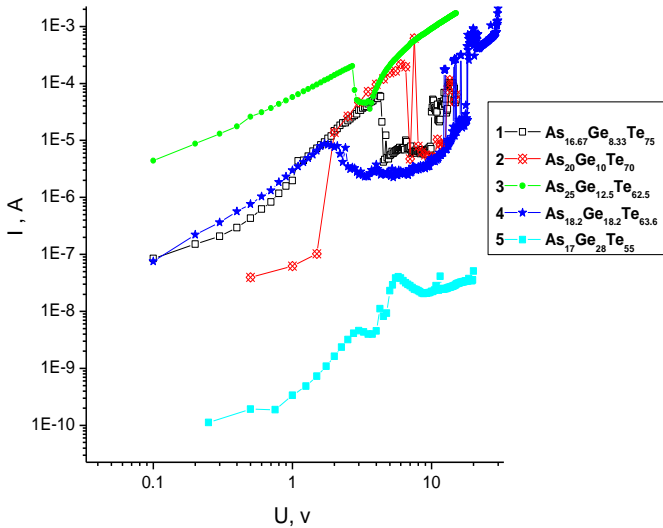
Bu fəsildə həm də $Te-Ge_xAs_yTe_{100-x-y}-Al$ sturukturundan stasionar rejimdə elektrik yükünün daşınma mexanizminin tədqiqinə həsr olunmuş tədqiqatlarının nəticələri şərh olunmuşdur. Şəkil 5.– də şüşəvari xalkogenid $Ge_{8.33}As_{16.67}Te_{75}$, $Ge_{10}As_{20}Te_{70}$, $Ge_{12.5}As_{25}Te_{62.5}$ tərkiblərinin otaq temperaturunda volt-amper xarakteristikası (VAX) təsvir olunmuşdur.



Şəkil 5. XŞY $\text{Ge}_{8.33}\text{As}_{16.67}\text{Te}_{75}$, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{Te}_{70}$, $\text{Ge}_{12.5}\text{As}_{25}\text{Te}_{62.5}$ tərkiblərinin VAX – ları.

Tellur elektrodu müsbət potensialla yükləndiyi halda sendviç quruluşlu $\text{Te} - \text{Ge}_x\text{As}_y\text{Te}_{100-x-y} - \text{Al}$ sisteminin VAX –nın səciyyəvi xüsusiyyətləri zəbt olunmuş yükdaşıyıcıların energetik paylanması üçün Fermi-Dirak paylanmasını tətbiq etməklə və həmçinin Puasson tənliyində sərbəst və zəbt olunmuş yükdaşıyıcıların (deşiklərin) konsentrasiyasını nəzərə alınmaqla Poole–Frenkel mexanizmi ilə izah olunmuşdur. VAX–in cərəyan şiddətinin kəskin artma oblastından tələsiz kvadratik qanununa keçid kulon baryerinin hündürlüyünün sıfıra qədər azalması ilə əlaqələndirilmiş və ona uyğun elektrik sahə intensivliyinin kritik qiyməti hesablanmışdır. Yükdaşınmanı idarə edən tələlərin konsentrasiyasının $\text{Ge}_{12.5}\text{As}_{25}\text{Te}_{62.5}$ tərkibli XŞY maddə üçün minimal qiymət alması həmin tərkibə uyğun matrisanın daha təkmil olması ilə əlaqələndirilmişdir.

Şəkil 6.-da $\text{Te}-\text{Ge}_x\text{As}_y\text{Te}_{100-x-y}-\text{Al}$ sendviç quruluşunun tellur elektroduna mənfi potensial tətbiq olunduğu halda otaq temperaturunda ölçülmüş VAX-ı təsvir olunmuşdur.



Şəkil 6. Te–Ge_xAs_yTe_{100-x-y} –Al Sendviç quruluşunun tellur elektroduna mənfi potensial tətbiq olunduğu halda VAX-ı.

Şəkil 6.-dan görüldüyü kimi tellur elektroduna mənfi potensial tətbiq olunduğu halda VAX tellur elektroda müsbət potensial tətbiq olunduğu halı təsvir edən asılılıqdan (şəkil 5.) kəskin fərqlənir. Bu halda gərginliyin artması ilə VAX-nın xətti oblastı qeyri-xətti asılılıq oblastı ilə əvəz olunur. Nəhayət, elektrik sahə gərginliyinin $\sim 5 \cdot 10^4$ V/sm qiymətindən başlayaraq xarakteristikanın N – şəkilli hissəyə keçidi baş verir. Məlumdur ki, kristal maddələrdə elektron proseslərini izah edən nəzəri konsepsiyalar əsasən quruluşun periodikliyinə əsaslanır. Lakin qeyri-kristal maddələrin quruluşunda uzaq nizam (UN) olmadığından yuxarıda qeyd olunan yanaşma ilə elektron proseslərin izahı əlverişli deyildir. Buna görə də, qeyri-kristal maddələrdə elektron proseslərinin şərh olunması üçün quruluşun uzaq nizamlılığı deyil, topoloji konsepsiya uğurla tətbiq olunur. Hesab olunur ki, elektrik sahə intensivliyinin sonrakı artması ilə U^- - mərkəzlərin ionlaşması baş verir və intensivliyin müəyyən böhran qiymətində sərbəst yükdaşıyıcıların konsentrasiyası özünün böhran

qiymətinə çatdıqda onların yenidən U^- - mərkəzləri tərəfindən zəbti və yaxud elektron və dəşiklərin rekombinasiyası baş verir ki, bu da nümunələrin müqavimətinin kəskin artması ilə müşayiyyət olunur. VAX-nın N – şəkilli oblastında qeyri müntəzəm ossilyasiyalar şəklində müşahidə olunan qeyri stabillik isə U^- - mərkəzlərin ionlaşma proseslərinin və yükdaşıyıcıların həmin mərkəzlər tərəfindən zəbtinin təkrarlanan periodikliyi ilə izah olunur. Tətbiq olunan gərginliyin böyük qiymətlərində yükdaşıyıcıların zəbt olunma ehtimalı kəskin azaldığından nümunələrin müqaviməti yenidən azalır. Nəticədə, VAX –in sahə intensivliyinin $2 \cdot 10^4 \div 10^5$ V/sm intervalını əhatə edən qiymətlərində yaranan N –şəkilli oblast U^- -mərkəzlərin çoxfononlu termik-sahə ionlaşması və yükdaşıyıcıların həmin mərkəzlər tərəfindən təkrar zəbti ilə əlaqələndirilmişdir. Digər tərəfdən VAX-ın N oblastında müntəzəm olmayan ossilyasiyalar şəklində müşahidə olunan dayanıqsızlıq yükdaşıyıcıların U^- -mərkəzlər tərəfindən zəbti və həmin mərkəzlərin ionlaşması prosesinin periodik olaraq təkrarlanması ilə əlaqələndirilmiş, ossilyasiyanın amplitudunun Z-in qiymətinin artması ilə azalması, az enerjili kimyəvi rabitələrin (asanlıqla qırılan) yüksək enerjili rabitələrlə əvəzlənməsi ilə əlaqələndirilmişdir.

ƏSAS NƏTİCƏLƏR

1. Rentgen şüalarının difraksiyasında intensivliyin paylanması təsvir edən As – Ge – Se sisteminin bütün kimyəvi tərkiblərinə, As – Ge – Te sistemində isə yalnız $As_{20}Ge_{10}Te_{70}$ tərkibinə aid qrafiklərdə BKDP–nin müşahidə olunması onlarda quruluş elementlərinin paylanmasında orta nizam oblastının mövcudluğunu göstərir. Korrelyasiya uzunluğu, orta nizam oblastı daxilində kvaziperiod, nanoboşluqların diametri təyin olunmuş və onların kimyəvi tərkibdən asılılığı selenin kimyəvi aktivliyinin tellurdan yüksək olması ilə əlaqədar olduğu göstərilmişdir.
2. As-Ge-Se sisteminin As və Ge –un miqdarı az olan nümunələrinin fonon spektrində həlqəvi (Se_8) və zəncirvari (- Se-Se-Se- ...) selen molekullarının rəqslərinə uyğun tezlikli maksimumlar həmin atomların konsentrasiyasının artması ilə tetraedrik və piramidal quruluş elementlərinin rəqsinə uyğun maksimumlarla

əvəz olunması kimyəvi rabitə yaxınlaşması modeli ilə izah olunmuşdur.

3. As-Ge-Te sisteminə daxil olan stexiometrik tərkibli nümunənin fonon spektrində tetraedrik və piramidal quruluş elementlərinin və Te-Te kimyəvi rabitələrinin rəqslərinə uyğun maksimumların müşahidə olunması, tellur atomlarının artıqlığı olan təkiblərdə yüksək tezlikli, tellur atomlarının çatışmazlığı olan tərkiblərdə isə alçaq tezlikli maksimumların mövcudluğu həmin sistemin amorf matrisasının kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelindən qismən kənara çıxdığını göstərir.
4. As-Ge-Se(Te) sistemlərinin Taus metodu ilə təyin olunmuş qadağan zonanın optik eninin orta koordinasiya ədədindən və kimyəvi rabitələrin növünü təyin edən R parametrindən asılılıq xüsusiyyətləri orta rabitə enerjisinin, kohersiv enerjinin, qablaşma əmsalının kimyəvi tərkibdən asılılığı ilə bağlıdır. Qeyd olunan kəmiyyətlərin Z və R-dən asılılığının analizi nəticəsində tədqiq olunan HŞY sistemlərdə topoloji və kimyəvi təbiətli astanaların mövcudluğu müəyyən olunmuşdur.
5. $As_{25}Ge_{12.5}Te_{62.5}$ ($R = 1$, $Z = 2.5$) tərkibli maddənin orta atomar həcmnin maksimum, qablaşma əmsalının minimum qiymət alması As-Ge-Te sistemin quruluşunda $2D \rightarrow 3D$ keçidinin baş verməsi ilə əlaqədardır.
6. VAX -nın sahə intensivliyinin $2 \cdot 10^4 \div 10^5$ V/sm intervalını əhatə edən qiymətlərində yaranan N -şəkilli oblast U^- mərkəzlərin çoxfononlu termik-sahə ionlaşması və yükdaşıyıcıların həmin mərkəzlər tərəfindən təkrar zəbti ilə əlaqədardır. VAX-ın N şəkilli oblastında müntəzəm olmayan ossilyasiyalar şəklində müşahidə olunan dayanıqsızlıq yükdaşıyıcıların U^- mərkəzlər tərəfindən zəbti və həmin mərkəzlərin ionlaşması prosesinin periodik olaraq təkrarlanması, ossilyasiyanın amplitudunun Z-in qiymətinin artması ilə azalması, az enerjili kimyəvi rabitələrin (asanlıqla qırılan) yüksək enerjili rabitələrlə əvəzlənməsi ilə izah edilmişdir.
7. $Te - Ge_xAs_yTe_{100-x-y} - Al$ sisteminin stasionar rejimdə tədqiq olunmuş VAX -da müşahidə olunan N - şəkilli oblast kimi xüsusiyyətlər həmin maddələrin yaddaş elementləri və çeviricilər üçün perspektiv material kimi tövsiyyə edilməsinə imkan yaradır.

Dissertasiyanın mövzusu üzrə dərc olunmuş işlərin siyahısı

1. Mekhtiyeva S.İ. / The structure and physical parameters of chalcogenide glasslike semiconductors of system As – Ge – Se / A.İ.İsayev, R.İ.Alekberov, H.İ.Mamedova, AJP Fizika, 2018 vol. XXIV №2, section:En
2. Исаев А.И., / Комбинационное рассеяние и оптическое поглощение света в халькогенидных стеклообразных полупроводниках системы As-Ge-Se / А.И. Исаев, С.И.Мехтиева, Х.И.Мамедова, Р.И.Алекберов // AJP Fizika, 2018, vol. XXIV №3, section:az, H.M.Abdullayev 100 illik konfrans.
3. Исаев А.И., С.И.Мехтиева, Х.И.Мамедова, Р.И.Алекберов, Корреляции между структурными и оптическими свойствами в халькогенидных стеклообразных полупроводников системы As-Ge-Se // Аморфные и Микрористаллические Полупроводники Сборник трудов Международной конференции 19–21 ноября 2018 года Санкт-Петербург.
4. Mammadova H.I. / Monopolar injection currents in the layers of GexAsyTe100-x-y system // AJP Fizika 2019 vol. XXV №4, section: En
5. Исаев А.И. / Корреляции между структурными и оптическими свойствами в халькогенидных стеклообразных полупроводников системы As-Ge-Se // А.И.Исаев, С.И.Мехтиева, Х.И.Мамедова, Р.И.Алекберов, , АМЕА –nın Xəbərләri, 2019 vol. XXXIX, №2.
6. Mekhtiyeva S.İ., A.İ.İsayev, H.İ.Mammadova, The parameters local structure of As – Ge – Se chalcogenide glasses, Conference on Amorphous and Nanostructured Chalcogenides (ANC-9) Chisinau, Republic of Moldova: –30June-04July, 2019, p.48-49.
7. Исаев А.И., / Структура и оптические свойства халькогенидных стеклообразных полупроводников системы As-Ge-Se / А.И.Исаев, С.И.Мехтиева,

- Х.И.Мамедова, Р.И.Алекберов // Физика и техника полупроводников, 2019, том 534, вып. 11.
8. Исаев А.И. / Влияние химического состава на структуры и физические свойства халькогенидных стеклообразных полупроводников системы As-Ge-Se / А.И. Исаев, С.И.Мехтиева, Х.И.Мамедова, Р.И.Алекберов, // Физика и химия стекла 2020, том 46, № 1, с. 1–11
 9. Исаев А.И. / Структура и оптические свойства халькогенидного стеклообразного полупроводника As-Ge-Te / А.И. Исаев, Х.И. Мамедова, С.И. Мехтиева, Р.И. Алекберов // Физика и техника полупроводников, 2020, том 54, вып. 10. с.1052–1057
 10. Isayev A.I., Mekhtiyeva S.I., Mammadova H.I., The Study of the characteristics I–V for the chalcogenide glass compositions with sandwich structure Te-Ge_{8.33}As_{16.67}Te₇₅-Al, Te-Ge₁₀As₂₀Te₇₀-Al and Te-Ge_{12.5}As₂₅Te_{62.5}-Al, Electronic Processes in Organic and Inorganic Materials (ICEPOM-12), June 1 - 5, 2020, Kamianets-Podilskyi, Ukraine
 11. Məmmədova H.İ., Halkogenid şüşəvari yarımkeçirici As-Ge-Se sisteminin lokal quruluşu, AJP Fizika 2020 vol. XXVI №1, section: Az
 12. Исаев А.И., Мамедова Х.И., Особенности комбинационного рассеяния света в слоях аморфной системы As-Ge-Te, Сборник трудов Международной конференции, Санкт-Петербург 05-07 июля 2021 года.
 13. İsaev A.İ, As – Ge – Se və As – Ge – Te halkogenid şüşəyəbənzər maddələrinin lokal quruluşu /A.İ. İsayev, H.İ. Məmmədova, S.İ. Mehdiyeva, R.İ. Ələkbərov, N.N. Eminova // AJP Fizika, 2022, section:C, Akademik M.H. Şahxatinskiyin 90-illik yubileyinə həsr olunmuş "Kompozisiyalı quruluşlar fizikası" mövzusunda konfrans, Bakı-Naxçıvan,19-20 Oktyabr, 2022-ci il
 14. Isaev A.I., Infulence of topological features and U⁻ - centers on electric charge carrying at strong electric fields in Ge_xAs_yTe_{100-x-y} amorphous films / A.I. Isaev, S.I. Mekhtiyeva, H.I.

Mammadova, M.R.Rzayev, R.I.Alekberov // Functional Materials, 2023, №1, p.28-34.

15. Исаев А.И. / Особенности локальной структуры халькогенидных стеклообразных полупроводниковых систем As-Ge-Se(Te) / А.И. Исаев, С.И.Мехтиева, Х.И.Мамедова, Р.И.Алекберов, // Известия Вузов. Физика 2023, том 66, № 3, с. 3–9.
16. Исаев А.И., С.И.Мехтиева, Х.И.Мамедова, Р.И.Алекберов, Влияние химического состава на оптические свойства халькогенидных стеклообразных полупроводников системы As-Ge-Se(Te) // Аморфные и Микрористаллические Полупроводники Сборник трудов Международной конференции 3–5 июля 2023 года Санкт-Петербург.

Dissertasiyanın müdafiəsi _____ 2023 - cü il tarixində saat _____ da Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya şurasının iclasında keçiriləcək.

Ünvan: Az-1143, Bakı şəh., H. Cavid pr. 131

Dissertasiya ilə Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutunun kitabxanasında tanış olmaq mümkündür.

Dissertasiya və avtoreferatın elektron versiyaları Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutunun rəsmi internet saytında yerləşdirilmişdir.

Avtoreferat _____ 2023-cü il tarixində zəruri ünvanlara göndərilmişdir.

Çapa imzalanıb: 15.09.2023
Kağızın formatı: A5
Həcm: 38943
Tiraj: 100