

ŞÜŞƏVARI XALKOGENİD As-Se, As-Se-S və As-Se-Te YARIMKEÇİRİCİ SİSTEMLƏRİNİN ŞÜŞƏLƏŞMƏ TEMPERATURLARI İLƏ FİZİKİ PARAMETRLƏRİ (V_a , κ , Z , E) ARASINDA KORRELYASIYA

R.İ. ƏLƏKBƏROV

*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası, H.M. Abdullayev adına Fizika İnstitutu,
Bakı, Az 1143, H.Cavid, 131
E-mail: Rahim-14@mail.ru*

İşdə As_2Se_3 , $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$, $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ halkogenid şüşəvari tərkiblərinin diferensial skanedici kalorimetriya (DSC) metodu ilə şüşələşmə temperaturu və piknometrik üsulla sıxlıqları ölçülmüşdür. Sıxlıqlarının təcrübi qiymətlərindən istifadə edərək amorf matrisanı xarakterizə edən atomar həcmi orta qiyməti (V_a), qablaşma sıxlığı (κ), o cümlədən koordinasiya ədədinin orta qiyməti (Z) və orta rabitə enerjisi (E) hesablanmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, As_2Se_3 birləşməsində selen atomlarının qismən kükürdlə ($As_{40}Se_{30}S_{30}$ və $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$) əvəz olunması şüşələşmə temperaturunu, orta rabitə enerjisini və kohesiv enerjini artırır, tellurla əvəzləmə ($As_{40}Se_{30}Te_{30}$ və $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$) isə onların qiymətlərini azaldır. Alınmış nəticələr amorf matrisanı əmələ gətirən kimyəvi rabitələrdə baş verən dəyişikliklərlə izah olunmuşdur.

Açar sözlər: halkogenid şüşə, şüşələşmə temperaturu, kohesiv enerji.

PACS: 81.05. Gc

1. GİRİŞ.

Son zamanlar halkogenid şüşəvari yarımkeçiricilərin optik liflər, müstəvi dalğa ötürücüləri və lazerlərdə uğurlu tətbiq imkanlarının olduğunu müəyyənləşdirən çoxsaylı tədqiqatlar aparılır [1-3]. Lakin bu maddələrin uğurlu tətbiqinin əldə olunması onlarda baş verən fiziki proseslərin mexanizmlərinin mükəmməl şərhini və fiziki xassələrinin məqsədyönlü idarə olunmasını tələb edir. Bu problemin həllinə lokal quruluş və fiziki xassələr arasında korrelyasiyanı aşkara çıxarmaqla nail olmaq olar. Həmçinin, tələb olunan nəticələrin mümkünlüyü üçün stabil fiziki xassələrə malik maddələrin alınma üsulların təkmilləşdirmək zəruridir. Optik qadağan zonanın eni və şüşələşmə temperaturu şüşəvari halı xarakterizə edən mühüm parametrlər olub, bilavasitə amorf matrisanın səltliyi ilə bağlı olduğundan göstərilən kəmiyyətlər və amorf matrisanın səltliyini xarakterizə edən digər fiziki parametrlər, o cümlədən koordinasiya ədədi, orta rabitə enerjisi, kohesiv enerji, quruluşun kipliyi, orta molyar həcmi və.s arasında korrelyasiya yaratmağa xüsusi diqqət yetirilir. Bu qəbildən olan çoxsaylı tədqiqatların müəllifləri [4-5] tərəfindən şüşələşmə temperaturunu koordinasiya ədədi və orta rabitə enerjisi ilə əlaqələndirən müxtəlif düsturlar təklif olunmuşdur. İşdə tədqiqat zamanı təqdim olunan maddələr orta koordinasiya ədədinin (stexiometrik və stexiometrik olmayan tərkiblər üçün uyğun olaraq 2.4 və 2.33 qiymətləri təşkil edir) qiymətinə görə qismən fərqlənsə də, onların tərkibinə məxsus enerjisi ilə fərqlənən kimyəvi rabitələr optik və digər fiziki parametrlər arasında korrelyasiya yaratmağa imkan verir.

Məqalədə As_2Se_3 , $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$, $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ HŞY tərkibləri sintez olunaraq sıxlıq və şüşələşmə temperaturunu (T_g) müəyyənləşdirən təcrübələr yerinə yetirilmişdir.

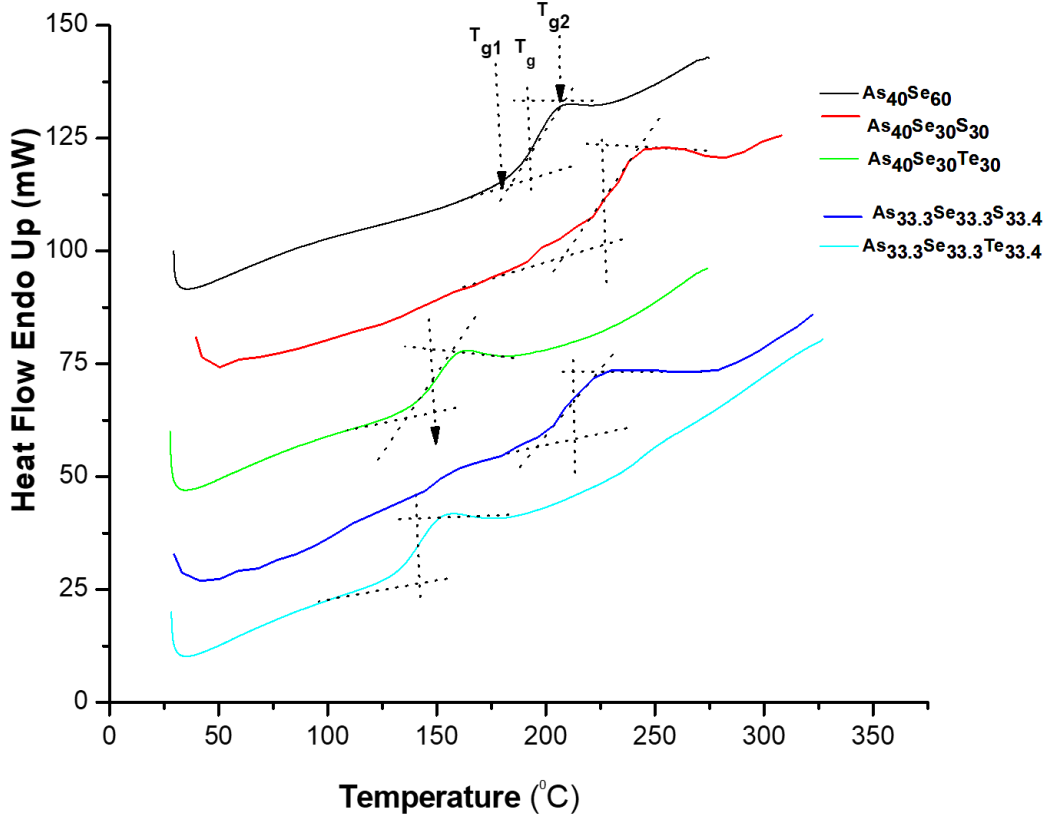
2. TƏCRÜBƏNİN METODİKASI VƏ NÜMUNƏLƏRİN ALINMASI

$As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ halkogenid şüşəvari tərkiblərinin sintezi ortasından tilinə perpendikulyar istiqamətdə yerləşən ox ətrafında fırlanan silindrik soba üsulu ilə yerinə yetirilmişdir. Sintez üçün tərkibə daxil olan xüsusi təmiz (99.9999%) elementlərdən müvafiq miqdarda elektor tərzidə çəkib götürməklə, daxili diametri 14÷16 mm və havası 10^{-4} tor təzyiqə qədər sorulmuş kvarts ampulalara doldurulmuşdur. Fırlanan soba üsulunun seçilməsi alınmış məhlulun homogenliyini artırmaq məqsədi ilə nəzərdə tutulmuş və sintez prosesi $950^{\circ}C$ -dən yuxarı temperaturda edilməklə bu temperaturda 12 saat ərzində saxlanılmışdır.

$As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$ halkogenid şüşələrinin şüşələşmənin təbiəti diferensial skanedici kalorimetriya (DSC) metodu ilə tədqiq olunmuşdur. Təcrübələr STA-6000 markalı sinxron termik analizatorda kütləsi təqribən $m=15$ mq seçilmiş nümunələrə verilən istilik axınının sürəti $30^{\circ}C/dəq$ olmaqla temperaturun $T_0=25\div300^{\circ}C$ intervalında yerinə yetirilmişdir. İstinad olunan nümunə olaraq boş alüminium küveytdən istifadə olunmuşdur.

3. NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil 1-də tədqiq olunan As_2Se_3 , $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$, $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ halkogenid şüşələrin qızdırılma sürəti 20 K/dəq olduğu halda diferensial skanedici kalorimetriya ayriləri təsvir olunmuşdur.



Şəkil 1. As_2Se_3 , $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$, $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ halkogenid şüşələrin diferensial skanedici kalorimetriya əyriyələri.

Cədvəl 1.

Şüşəvari tərkiblər	$T_{g(Ex)}$ [k]	$T_g[k](em)$	ρ , q/sm ³	δ , q/sm ³	Z	Qablaşma sıxlığı ($\chi \times 10^{22}$ atom/sm ³),	V_m (sm ³ mol ⁻¹)
$As_{40}Se_{60}$	465.5	388.75	4.59	-0.0075	2.4	3.57	16.85
$As_{40}Se_{30}Te_{30}$	421	319.9568	5.132	-0.0102	2.4	3.36	17.914
$As_{40}Se_{30}S_{30}$	498	421.094	3.86	-0.0118	2.4	3.67	16.392
$As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$	485	410.52	3.254	-0.143	2.33	3.16	19.038
$As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$	411	306.646	5.07	-0.02	2.33	3.249	17.9989

Təsvir olunan qrafiklərdən tədqiq olunan maddələrin şüşələşmə temperaturları təyin olunmuş və nəticələr cədvəl 1-də verilmişdir. Cədvəl 1-dən görüldüyü kimi, selen atomlarının müəyyən hissəsinin kükürd və ya tellurla əvəz olunması nəticəsində $As_{40}Se_{60}$ -şüşəvari tərkibinin şüşələşmə temperaturu nəzərə çarpacaq dərəcədə dəyişməyə məruz qalır. Məlum olur ki, selenin kükürdlə əvəz olunması şüşələşmə temperaturunu artırdığı halda tellurla əvəzləmə azalmaya gətirir.

Tədqiq olunan bütün nümunələr üçün təcrübi olaraq maddələrin sıxlıqları ölçülmüş və həmin nümunələrə daxil olan elementlərin məlum sıxlıqları, koordinasiya ədədləri, Mendeleev cədvəlindən və tədqiq olunan tərkiblərin sıxlıqlarının təcrübi qiymətlərindən istifadə edərək şüşələşmə prosesi ilə bağlı olan fiziki parametrlər təyin olunmuşdur. Beləliklə, aşağıda təsvir olunan (1-3) düsturlarına əsasən atomar həcmnin orta qiyməti (V_a), qablaşma sıxlığı (χ), o cümlədən koordinasiya ədədinin orta qiyməti (Z) hesablanmış və alınan nəticələr cədvəl 1-də verilmişdir.

$$Z = \sum_i Z_i X_i A_i \quad (1)$$

$$\chi = \frac{\rho N_A}{\sum_i X_i A_i} \quad (2)$$

$$V_a = \frac{1}{\rho} \sum_i x_i A_i \quad (3)$$

Tədqiq olunan maddələrə məxsus sərbəst həcmənin nisbi payı əsasən kompaktlıq (δ) adlanan parametrlə xarakterizə olunub, aşağıda təsvir olunan düsturla [6] təyin olunur.

$$\delta = \frac{\sum_i (x_i A_i) / \rho_i - \sum_i (x_i A_i) / \rho}{\sum_i (x_i A_i) / \rho} \quad (4)$$

Burada, Z_i , x_i , A_i və ρ_i , uyğun olaraq koordinasiya ədədi, molyar pay, atomar kütlə, HŞM-ə daxil olan elementlərin sıxlıqları, ρ – isə tədqiq olunan maddələrin təcrübi təyin olunan sıxlıqlarının qiymətləridir. (4)-düsturundan alınan nəticələr cədvəl 1-də verilmişdir.

Tədqiq olunan tərkiblərə daxil olan heterogen rabitələrin enerjisi, onların kovalentlik dərəcəsi (5) və (6) düsturlarına [7, 8] əsasən təyin olunmuş və alınan nəticələr cədvəl 2-də verilmişdir.

$$E_{A-B} = (E_{A-A} E_{B-B})^{1/2} + 30(\chi_A - \chi_B)^2 \quad (5)$$

$$DC = 100 \exp[-(\chi_A - \chi_B)^2 / 4] \quad (6)$$

burada, E_{A-A} və E_{B-B} A və B atomlarının homopolyar rabitələrinin enerjisi, χ_A və χ_B isə onların elektromənfilikləridir. Cədvəl 2-dən görüldüyü kimi, tədqiq olu-

nan HŞY materiallara daxil olan bütün kimyəvi rabitələrin kovalentlik dərəcəsi (degree of covalency -DC) kifayət qədər yüksəkdir. Buna görə də, alınan nəticələr kovalent rabitəli materiallar üçün tətbiq olunan nəzəriyyə ilə tədqiq oluna bilər. Odur ki, [9]-işinin müəllifləri tərəfindən təklif olunan metodu tətbiq edərək atomlararası rabitə enerjisinin məlum qiymətlərindən istifadə edib stexiometrik nisbəti nəzərə alaraq $As_x Se_{1-x}$ şüşəvari sistemində sadə quruluş fərziyyəsinə əsaslanaraq məqalədə tədqiq olunan bütün tərkiblərin orta rabitə enerjisinin qiymətləri hesablanmış və alınan nəticələr cədvəl 2-də verilmişdir. Kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelinin (Chemical bond approaches (CBA) model)[10] əsas prinsiplərindən istifadə etməklə baxılan tərkiblərin kohesiv enerjiləri (cohesive energy - CE) hesablanmışdır. Kohesiv enerji dedikdə -materialın sonsuz böyük klasterinin stabilləşmə enerjisi olub, həm də kimyəvi əlaqələrin orta möhkəmliyini xarakterizə edir. Kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelinə əsasən heteropolyar rabitələrin yaranma ehtimalı homopolyardan üstün olduğundan, əvvəlcə daha möhkəm rabitələr formalaşır (yüksək enerjili rabitələr).

Cədvəl 2.

Şüşəvari tərkiblər	Orta rabitə enerjisi (E), [kcal/mol]	Kohesiv enerji (CE), [kcal/mol]	Rabitə enerjisi, [kcal/mol]	Rabitə enerjisi, [kcal/mol]	Kovalentlik dərəcəsi (DC, %)		Elektromənfilik, (χ)	
					As-Se	Se-Te	As	Te
As ₄₀ Se ₆₀	49.44	41.2	As-S (45.18)	Se-Te(40.8)	As-Se	96.635		
As ₄₀ Se ₃₀ Te ₃₀	44.34	36.95	As-Se (41.2)	Se-Se(44)	As-Te	99.84	As	2.18
As ₄₀ Se ₃₀ S ₃₀	51.828	43.15	As-Te(32.7)	Te-Te(33)	As-S	96.07	Se	2.55
As _{33.3} Se _{33.3} S _{33.4}	51.094685	39.95	Te-S (47.25)	S-S(50.9)	Se-Te	95.06	Te	2.1
As _{33.3} Se _{33.3} Te _{33.4}	43.3618	34.19	Se-S(47.47)	As-As(32.1)	Se-S	99.977	S	2.58

Odur ki, göstərilən rabitələrin yaranma ardıcılığı atomların mümkün valentlik tələbləri ödənilənədək rabitə enerjisinin azalma ardıcılığı ilə uyğun şəkildə baş verir. Nəticədə, ilkin yaxınlaşma ilə digər valent defektleri və qırılmış rabitələrin varlığı nəzərə alınmadıqda, hər bir tərkib atomu xarici elektron bulundakı elektronlarının sayı N-olaraq 8-N sayda atomla əhatə olunur. Bu halda, həmçinin enerjisi adi kovalent rabitələrdən zəif olan Van-der Vals qarşılıqlı təsirlərin maddənin stabilləşmə prosesində nəzərə çarpan rol oynaya bilməsi nəzərə alınmır. Digər tərəfdən, kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelində rabitə enerjisinin additiv olması fərz olunur. Beləliklə, tədqiq olunan maddələrdə gözlənilən bütün rabitələr üzrə rabitə enerjilərinin cəmlənməsi yolu ilə kohesiv enerjilər hesablanaraq alınan nəticələr cədvəl 2-də təsvir olunmuşdur.

Şüşələşmə temperaturu (T_g) elə termik halı xarakterizə edir ki, temperaturun qiyməti ondan yüksək olduqda amorf matrisa müxtəlif quruluş konfigurasiyalarına malik olduğu halda, aşağı olduqda nisbətən tarazlıq halına doğru məhdudlaşır. Odur ki, konkret olaraq şüşələşmə temperaturunun (T_g) amorf quruluşa məxsus stabilliyi təmin edən elementlər arasında əlaqəni yaradan qüvvələr və amorf matrisanı xarakterizə edən parametrlərlə bağlı olmasını fərz etmək mümkündür. Bu parametrlərə orta koordinasiya ədədini, rabitə enerjisinin orta qiymətini, kohesiv enerjini və s. aid etmək olar. Rabitələrin növü və enerjilərinin, koor-

dinasiya ədədinin, əlaqəlilik dərəcəsinin funksiyası olan kohesiv enerji və orta rabitə enerjisinin qiymətinin yüksək olması quruluş elementlərinin parçalanması və mobil obyektlərin yaranmasına mane olur. Tədqiq olunan maddələrin kimyəvi tərkibinin dəyişməsi zamanı göstərilən kəmiyyətlərin qiymətlərində və şüşələşmə temperaturunda (T_g) dəyişmələrin paralel olaraq müşahidə olunması HŞY materialların xassələrini məqsədyönlü dəyişməyin mümkünlüyü haqqında dolğun mühakimə yürütməyə imkan verir.

İlk dəfə olaraq müəlliflərin [11] tədqiqatları nəticəsində binar və üçqat halkogenid şüşələrdə rabitə enerjisinin orta qiyməti və şüşələşmə temperaturu arasındakı empirik əlaqəni müəyyənləşdirən aşağıdakı münasibət təklif olunmuşdur.

$$T_g = 311[\langle E \rangle - 0,9] \quad (7)$$

Burada, $\langle E \rangle$ -rabitə enerjisinin orta qiymətidir.

Cədvəl 2-də təsvir olunan rabitə enerjisinin orta qiymətinin ($\langle E \rangle$) qiymətlərini (7)-düsturunda nəzərə alaraq şüşələşmə temperaturunun hesablanan və təcrübi müəyyən olunan qiymətləri cədvəl 1-də təsvir olunmuşdur. Cədvəldən görüldüyü kimi, şüşələşmə temperaturunun empirik və təcrübi qiymətləri arasında mükəmməl korrelyasiya mövcuddur. Məlum olur ki, selenin kükürd atomları ($As_{40}Se_{30}S_{30}$ və

As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}) ilə əvəz olunması şüşələşmə temperaturunu artırır, tellurla əvəzləmə (As₄₀Se₃₀Te₃₀ və As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}) isə azaldır. Kohesiv enerjinin, rabitə enerjisinin orta qiymətinin, şüşələşmə temperaturunun qiymətlərində müşahidə olunan belə dəyişikliklər amorf matrisanı yaradan kimyəvi rabitələrdə baş verən dəyişikliklərlə əlaqədardır. Belə ki, As₄₀Se₆₀-tərkibində As-Se və Se-Se kimyəvi rabitələrinin müəyyən hissəsi ilkin olaraq böyük enerjili As-S, S-S, Se-S rabitələri ilə əvəz olunduğu halda, daha sonra aşağı enerjili As-Te, Te-Te və Se-Te (cədvəl 2) rabitələri ilə əvəz olunur. Nəzərə almaq lazımdır ki, ikinci halda sözü gedən kəmiyyətlərin qiymətlərində daha böyük dəyişikliklərin müşahidə olunması tellur (Te) atomlarının iştirakı olan rabitələrin daha aşağı enerjiyə malik olması ilə əlaqədardır. Cədvəllərdən aydın olur ki, qeyri-stexiometrik As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.3} və As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4} tərkibli nümunələrdə T_g-nin qiyməti stexiometriyaya uyğun olan As₄₀Se₃₀S₃₀ və As₄₀Se₃₀Te₃₀-dən aşağıdır. Bu nəticə qeyri-stexiometrik tərkibli nümunələrdə orta koordinasiya ədədinin qiymətinin (Z=2,33) aşağı olması ilə əlaqələndirilir. Topoloji məhdudiyətlər nəzəriyyəsinə [12, 13] əsasən halkogenid şüşələrin şüşələşmə temperaturu amorf matrisanın səltliyi, yəni polimer zəncirlərin əlaqəlilik dərəcəsiindən asılıdır. Orta

koordinasiya ədədinin qiymətinin Z=2.4 olan kritik qiymətində amorf matrisa elastik haldan (floppy state) səlt hala keçir (rigid state). Bunun nəticəsində stexiometriyaya uyğun olan tərkiblərin şüşələşmə temperaturu (T_g) qeyri-stexiometrikdən yüksək qiymətlərə malik olur (cədvəl 1).

4. NƏTİCƏ.

Diferensial skanedici kalorimetriya (DSC) metodu ilə As₂Se₃, As₄₀Se₃₀S₃₀, As₄₀Se₃₀Te₃₀, As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}, As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4} halkogenid şüşəvari tərkiblərində şüşələşmə prosesi tədqiq edilərək şüşələşmə temperaturunun hesablanan və təcrübi qiymətləri arasında korrelyasiyanın mövcudluğu müəyyən olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, As₂Se₃ birləşməsində selen atomlarının yarısının kükürd atomları (As₄₀Se₃₀S₃₀ və As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}) ilə əvəz olunması şüşələşmə temperaturunu, orta rabitə enerjisini və kohesiv enerjinin qiymətlərini artırır, tellurla əvəzləmə (As₄₀Se₃₀Te₃₀ və As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}) isə azaldır. Alınmış nəticələr kükürd (S) atomlarının iştirakı olan rabitələrin daha böyük, tellurla bağlı rabitələrin isə aşağı enerjiyə malik olması ilə izah olunur.

- | | |
|---|---|
| <p>[1] <i>Zakery, S.R. Elliott.</i> Optical Nonlinearities in Chalcogenide Glasses and their Applications, 2007, IX, 202 p., Harcover, ISBN: 978-3-540-71066-0.</p> <p>[2] <i>Chalcogenide Glasses.</i> Preparation, Properties and Applications, 2014, Ed. by: Adam J-I and Zhang X., ISBN: 978-0-85709-345-5.</p> <p>[3] <i>K. Tanaka, K. Shimakawa.</i> Amorphous Chalcogenide Semiconductors and Related Materials, 2011, Springer, Science-Bus. Media, LLC.</p> <p>[4] <i>S. A. Dembovskii.</i> Phys.Chem. Classes, 1969, 10, 73.</p> <p>[5] <i>K. Tanaka.</i> Solid State Commun. 1985, 54, 807.</p> <p>[6] <i>V. Pamukchieva, A. Szekeres, K. Todorova, M.Fabian, E. Svab, Zs. Revay, L. Szentmiklosi.</i> J. Non-Cryst. Solids, 2009, 325, 2485-2490.</p> | <p>[7] <i>L. Pauling.</i> The Nature of the Chemical Bond, Cornell University Press, Ithaca, NY, 1960.</p> <p>[8] <i>Tauc, R. Grigorovici, A. Vanou.</i> Phys. Status Solidi, 1966, 15, 627.</p> <p>[9] <i>G.Yang, B.Bureau, T.Rouxel, Y.Gueguen, O.Gulbitten, C. Roiland, E. Soignard, J.L. Yarger, J.Troles, J.C. Sangleboeuf and P. Lucas.</i> Phys. Rev. 2010, B 82, 195206.</p> <p>[10] <i>J. Bicerano and S.R. Ovshinsky.</i> J. Non-Cryst. Solid, 1985, 74, p.75.</p> <p>[11] <i>L. Tich, H. Tichd.</i> Journal of Non-Crystalline Solids, 1995, 189, 141-146.</p> <p>[12] <i>C.Phillips.</i> J. Non-Crystal. Solids, 1979, 34,153.</p> <p>[13] <i>M.F. Thorpa.</i> J. Non-Crystal. Solids, 1983, 57, 355.</p> |
|---|---|

R.I. Alekberov

THE CORRELATION BETWEEN PHYSICAL PARAMETERS (V_a , κ , Z , E) AND GLASS TRANSITION TEMPERATURE OF As-Se, As-Se-S AND As-Se-Te CHALCOGENIDE GLASSY SEMICONDUCTOR SYSTEMS

In this work the glass transition temperature of As₄₀Se₆₀, As₄₀Se₃₀S₃₀, As₄₀Se₃₀Te₃₀, As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4} As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4} chalcogenide glasses by differential scanning calorimetry (DSC) method are measured and the values of densities are measured by picnometric method. Using the experimental values of the densities of the studied compositions the physical parameters, such as the average value of the atomic volume (V_a), packing density (κ), as well as the average coordination number (Z) and average bond energy are calculated. It is shown that the substitution of selenium atoms in As₂Se₃ by sulfur atoms (As₄₀Se₃₀S₃₀ and As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}) increases the glass transition temperature, the average bond energy and cohesive energy, but substitution by tellurium atoms (As₄₀Se₃₀Te₃₀ and As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}) decreases their values. The obtained results are explained by the changes occurring in the chemical bonds forming the amorphous matrices.

Р.И. Алекберов

КОРРЕЛЯЦИЯ МЕЖДУ ФИЗИЧЕСКИМИ ПАРАМЕТРАМИ (V_a , κ , Z , E) И ТЕМПЕРАТУРОЙ СТЕКЛОВАНИЯ ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ СТЕКЛООБРАЗНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СИСТЕМ As-Se, As-Se-S И As-Se-Te

В данной работе была измерена температура стеклования халькогенидных стекол As_40Se_{60} , $As_40Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$, $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$, $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$ методом дифференциальной сканирующей калориметрии (DSC) и измерены значения плотностей пикнометрическим методом. Используя экспериментальные значения плотности были рассчитаны физические параметры, такие как среднее значение атомного объема (V_a), плотность упаковки (κ), а также среднее координационное число (Z) и средняя энергия связи. Показано что, замена атомов селена в As_2Se_3 атомами серы ($As_{40}Se_{30}S_{30}$ и $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$) повышает температуру стеклования, среднюю энергию связи и энергию когезии, а замещение атомами теллура ($As_{40}Se_{30}Te_{30}$ и $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$) уменьшает их. Полученные результаты объясняются изменениями, происходящими в химических связях создающих аморфные матрицы.

Qəbul olunma tarixi: 04.04.2019