

Ge-As-Se-S XALKOGENİD ŞÜŞƏVARI SİSTEMİNDƏ OPTİK UDULMANIN SPEKTRAL ASILILIĞININ RİYAZİ UZLAŞDIRMA ÜSULU İLƏ TƏDQIQI

S.M. MƏMMƏDOV

*Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu
Azərbaycan, Bakı, AZ-1073, H. Cavid prospekti, 131*

İşdə Ge-As-Se-S xalkogenid şüşəvari sisteminin müxtəlif tərkiblərində optik udulma əmsalının (α) spektral asılılığı ölçülmüş və Belehradek funksional asılılığı ilə təcrübi asılılıq arasında müqayisəli riyazi uzlaşdırma edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, Taus asılılığında $[(\alpha \cdot hv)^{1/n} \sim f(hv)]$ n -qüvvət üstünün tərs qiymətinin $m=0.5$ -dən fərqli olması hal sıxlığının enerji-dən asılılığının sərbəst elektron hallarının sıxlığından kənar çıxması ilə bağlı olub, tədqiq olunan maddələrin fraktal xüsusiyyətləri ilə izah olunur.

Açar sözlər: xalkogenid şüşə, amorf, fraktal

DOI:10.70784/azip.2.2025310

1. Giriş

Məlumdur ki, kristal quruluşa malik yarımkəçirici maddələrdən fərqli olaraq amorf maddələrdə cəlbədicə və səciyyəvi optik xüsusiyyətlərin meydana gəlməsi onların yürlük aralığında sıfırdan fərqli hal sıxlığının mövcudluğudur. Çoxsaylı tədqiqatlar göstərir ki, amorf yarımkəçiricilərin optik xassələrinin və hal sıxlığının fərqli xüsusiyyətlərinin əmələ gəlməsi onlarda kristallara məxsus kəskin zona sərhədlərinin olmaması və həmin sərhədlərin ətrafında lokal və ya əlavə halların mövcudluğu hesabındadır [1-5]. Başqa sözlə desək, qeyd olunan məqalələrdə müəyyən olunmuşdur ki, amorf maddələrdə yürlük kənarına yaxın enerjilərdə və eyni zamanda yürlük aralığı daxilində sıfırdan fərqli hal sıxlığının mövcudluğuna səbəb olan lokal hallar əsasən quruluşun nizamsızlığı hesabına yaranır. Yürlük kənarının yaxın ətrafında hal sıxlığının qiymətinə və enerjiyə görə paylanmasına Frans–Keldış effektiyin təsir payı olduğunu göstərən ciddi elmi tədqiqatların [1, 6] mövcud olmasına baxmayaraq istər yürlük kənarına yaxın enerjilərdə, istərsədə yürlük aralığı daxilində hal sıxlığının enerjiyə görə paylanmasını mükəmməl təsvir edən nəzəriyyə hələlik mövcud deyildir və bu yeni ciddi eksperimentlərin aparılmasını tələb edir. Tərkibində selen olan $Ge_{18}Bi_4Se_{78}$ və $Ge_{17}Ga_4Sb_{10}S_{69-x}Se_x$ ($x=0, 15, 30, 45, 60$ və 69) xalkogenid şüşələrinin optik xassələrinin tədqiqi göstərir ki, güclü udulma oblastında ($\alpha > 10^4 \text{ sm}^{-1}$) Taus asılılığının $[(\alpha hv) = B(hv - E_{op})^n]$ qüvvət üstü n -nin müxtəlif qiymətlər ($n=1/2; n=2; 3/2; 3$) alması mümkündür. Qeyd olunan nəticə düz icazəli, çəp icazəli, düz qadağan və çəp qadağan optik keçidlərin mövcudluğu ilə izah olunmuşdur [7, 8, 9]. Lakin müasir tədqiqatlar göstərir ki, Taus düsturunda nəzəri olaraq $1/(d(\ln \alpha hv)/dhv)$ –nin fotonun enerjisindən (hv) asılılığı qurularsa, həmin düzxətli asılılığın meyli $1/m$ -ə bərabər olur [10]. Nəticədə, müəyyən olunmuşdur ki, Taus asılılığının qüvvət üstü $m=1.8 \div 2.2$ intervalında dəyişir. Müəyyən edilmişdir ki, şüşələşmə temperaturundan (T_g) yüksək temperaturlarda termik işlənmə temperaturunun artırılması nəticəsində Taus asılılığının qüvvət üstünün (m) artması ilə bərabər optik qadağan zonanın eni də (E_g) azalır. Bu nəticə termik işlənmənin hesabına rabitələrin qırılması nəticəsində keçirici və valent zonaların sərhədləri

ətrafında lokal halların konsentrasiyasının artması ilə izah edilmişdir [10]. Se-Te-Sn xalkogenid şüşələrinin tərkibində germaniumun (Ge) atom faiz miqdarının artması nəticəsində optik qadağan zonanın eninin (E_g) azalması isə elektromənfiliyin qiymətinin azalması və yürlük aralığında lokal halların sıxlığının artması ilə izah olunur [9]. Beləliklə müxtəlif tədqiqatlardan alınan nəticələrin ümumiləşmiş analizi göstərir ki, amorf quruluşa malik xalkogenid şüşələrdə kəskin zona sərhədləri olmadığından genişlənmiş valent və keçiricilik halları arasında elektronların optik həyəcanlanma ilə keçidləri xüsusi olaraq, güclü udulma ($\alpha > 10^4 \text{ sm}^{-1}$) oblastını əhatə edən enerji intervalında araşdırılmalıdır [5]. Əlavə valent hallarından genişlənmiş keçiricilik hallarına, genişlənmiş valent hallarından əlavə keçiricilik hallarına və eləcə də əlavə valent hallarından əlavə keçiricilik hallarına keçidlər isə optik udulmanın qiymətlərinin $\alpha < (10^3 \div 10^4) \text{ sm}^{-1}$ şərtini ödəyən enerji intervallarında analiz olunmalıdır [5].

İşin məqsədi Ge-As-Se-S xalkogenid şüşəvari sisteminin müxtəlif tərkiblərinin üstlü asılılıq oblastlarında optik udulma əmsalının spektral asılılıq xüsusiyyətlərinin Taus qanunauyğunluğundan kənar çıxmalarının fiziki mexanizmlərini araşdırmaqdır.

2. Təcrübənin metodikası və nümunələrin alınması

$Ge_4As_{14}Se_{82}$, $Ge_4As_{14}S_2Se_{80}$, $Ge_7As_{16}S_5Se_{72}$, $Ge_{10}As_{20}S_{10}Se_{60}$, $Ge_{17.5}As_{15}S_{15}Se_{52.5}$, $Ge_{24}As_{19}S_{20}Se_{37}$, $Ge_{25}As_{10}S_{25}Se_{40}$, $Ge_{26}As_{18}S_{30}Se_{26}$, $Ge_{33}As_{17}S_{35}Se_{15}$ xalkogenid şüşəvari yarımkəçirici (XŞY) tərkiblərinin sintezi fırlanan silindrik soba üsulu ilə yerinə yetirilmişdir. Bunun üçün göstərilən mürəkkəbkomponentli şüşəvari tərkiblərə məxsus xüsusi təmizlikli (təmizlik dərəcəsi 99,9999%) elementlərdən seçilmiş stexiometrik və qeyri-stexiometrik tərkib nisbətlərinə uyğun elekton tərəzidə çəkilərək, daxili diametri $12 \div 17$ mm olan və havası 10^{-4} tor təzyiqə qədər sorulmuş kvarts ampulalara doldurulmuşdur. Tədqiqat üçün seçilmiş mürəkkəb komponentli maddələrin sintezi 950°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 nix-

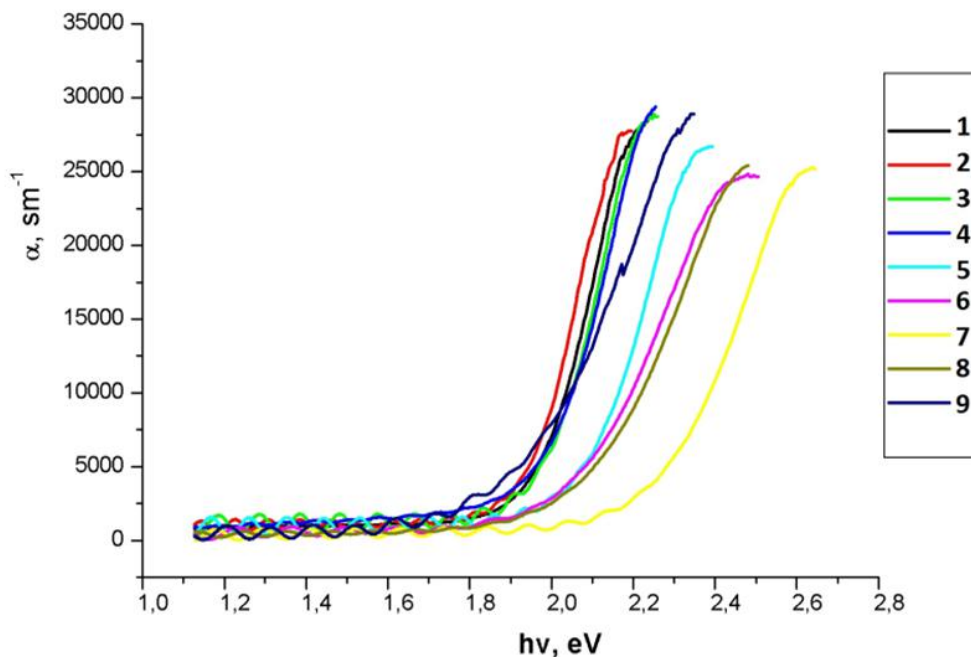
rom spirali ilə, temperaturun ölçülməsi isə xromel-alümel termocütü vasitəsilə edilmişdir. Sintez olunacaq mürəkkəb komponentli tərkiblərin bircinsliliyini təmin etmək üçün ampulalar 950°C temperaturda 11 saat ərzində saxlanılmış, sintez prosesinin sonu söndürülmüş fırlanan soba rejimində həyata keçirilmişdir.

Sintez prosesi ilə alınan Ge-As-Se-S tərkiblərinin bir neçə santimetr ölçülü nümunələrinin nazik təbəqələri vakuumba şüşə altlıqlar üzərində termik buxarlandırma üsulu ilə alınmışdır. Buxarlandırma prosesi üçün xüsusi formalı və çətinəriyən (tantal) metal qayıqçıqdan buxarlandırıcı kimi istifadə olunmuşdur. Raman spektroskopiyası, həmçinin optik tədqiqatların aparılması üçün Ge-As-Se-S tərkibləri əsasında nazik

təbəqələrin alınması ABPI-0.5 markalı vakuüm qurğusunda 10–5 tor təzyiqli vakuümdə və otaq temperaturunda şüşə altlıqlar üzərinə termik buxarlandırma üsulu ilə həyata keçirilmişdir. Nazik təbəqələrin alınması 6÷10 nm/san buxarlandırılma sürəti ilə həyata keçirilmişdir. Tərkibdən asılı olaraq buxarlama prosesi buxarlandırıcının 450-510°C temperaturunda aparılmışdır.

3. NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil 1-də Ge-As-Se-S xalkogenid şüşəvari yarımkeçirici sisteminə məxsus müxtəlif tərkiblər üçün optik udulma əmsalının fotonun enerjisindən asılılığı təsvir edilmişdir.



Şəkil 1. Optik udulma əmsalının (α) fotonun enerjisindən ($h\nu$) asılılığı: 1 - $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$, 2 - $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, 3 - $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, 4 - $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, 5 - $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, 6 - $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, 7 - $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, 8 - $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, 9 - $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$

Amorf maddələrdə və o cümlədən amorf quruluşa malik xalkogenid şüşələrdə genişlənmiş keçiricilik və valent hallarının sıxlığının $g_c(E_c) = G_c(E - E_c)^s$ və $g_v(E_v) = G_v(E_v - E)^p$ – düsturları ilə ifadə olunduğunu nəzərə alsaq, şəkil 1-də təsvir edilən optik udulma əmsalının (α) fotonun enerjisindən ($h\nu$) asılılığı ümumi şəkildə aşağıdakı kimi yazıla bilər [5, 11, 12].

$$\alpha \hbar \omega = C' (\hbar \omega - E)^{p+s+1}, \quad (1)$$

burada C' – optik keçidlərin ehtimallılığını xarakterizə edən p_{cv} -matris elementindən asılıdır. Tədqiqatlar göstərir ki, [5, 11, 12] $s=p=1/2$ olduqda, yəni valent və keçirici zona kənarında hal sıxlığının energetik paylanması parabolikdirsə [$g_c(E_c) = G_c(E - E_c)^{1/2}$ və $g_v(E_v) = G_v(E_v - E)^{1/2}$], udulma əmsalının fotonun enerjisindən asılılığı Taus düsturu (2) ilə ifadə edilir [13].

$$\alpha = B \frac{[\hbar \omega - E_0]^2}{\hbar \omega} \quad (2)$$

Qeyd edək ki, ölçüləri d -olan fəzada genişlənmiş halların sıxlığı üçün $N(E)dE \sim \rho^{d-1} d\rho$ [14, 15] – münasibətini nəzərə alsaq, (1) – düsturunda $p + s + 1 = d - 1$ mütənəşib əvəzləmə edərək valent və keçirici zona kənarında hal sıxlığının energetik paylanmasının parabolik halı üçün ($s=p=1/2$) $d=3$ alınır ki, bu da 3D-ölçülü sistemlər halına uyğundur [5]. (2) düsturunda $[\omega \alpha(\omega)]^{1/2}$ hasilinin fotonun enerjisindən xətti asılılığının ekstrapolyasiyası qadağan zonanın enini verir.

Kimyəvi nizamlı şəbəkə modelinə əsasən hesab edilir ki, əvvəlcə Ge-S, sonra Ge-Se rabitələri, daha sonra heteropolyar (As-S, As-Se), homopolyar (Ge-Ge, As-As) rabitələri enerjinin azalması sırası ilə əmələ gəlir və matrisin qurulması tamamlanır (cədvəl 1).

Kimyəvi nizamlı şəbəkə modelinin tələbləri nəzərə alınmaqla
tərkiblər üçün yazılan formulalar

| |
|--|
| 1. $Ge_{0.04}As_{0.14}S_{0.82} = [2(Ge_{0.02}Se_{0.04})] \cdot [7(As_{0.02}Se_{0.03})] \cdot [53Se]$ |
| 2. $Ge_{0.04}As_{0.14}S_{0.02}Se_{0.80} = [0.5(Ge_{0.02}S_{0.04})] \cdot [1.5(Ge_{0.02}Se_{0.04})] \cdot [7(As_{0.02}Se_{0.03})] \cdot [53Se]$ |
| 3. $Ge_{0.07}As_{0.16}S_{0.05}Se_{0.72} = [1.25(Ge_{0.02}S_{0.04})] \cdot [2.25(Ge_{0.02}Se_{0.04})] \cdot [8(As_{0.02}Se_{0.03})] \cdot [31Se]$ |
| 4. $Ge_{0.10}As_{0.20}S_{0.10}Se_{0.60} = [2.5(Ge_{0.02}S_{0.04})] \cdot [2.5(Ge_{0.02}Se_{0.04})] \cdot [10(As_{0.02}Se_{0.03})] \cdot [10Se]$ |
| 5. $Ge_{0.175}As_{0.15}S_{0.15}Se_{0.525} = [3.75(Ge_{0.02}S_{0.04})] \cdot [5(Ge_{0.02}Se_{0.04})] \cdot [7.5(As_{0.02}Se_{0.03})] \cdot [10Se]$ |
| 6. $Ge_{0.24}As_{0.19}S_{0.20}Se_{0.37} = [5(Ge_{0.02}S_{0.04})] \cdot [7(Ge_{0.02}Se_{0.04})] \cdot [3(As_{0.02}Se_{0.03})] \cdot [13Se]$ |
| 7. $Ge_{0.25}As_{0.10}S_{0.25}Se_{0.40} = [6.25(Ge_{0.02}S_{0.04})] \cdot [6.25(Ge_{0.02}Se_{0.04})] \cdot [5(As_{0.02}Se_{0.03})]$ |
| 8. $Ge_{0.26}As_{0.18}S_{0.30}Se_{0.26} = [7.5(Ge_{0.02}S_{0.04})] \cdot [5.5(Ge_{0.02}Se_{0.04})] \cdot [1.33(As_{0.02}Se_{0.03})] \cdot [15.33As]$ |
| 9. $Ge_{0.33}As_{0.17}S_{0.35}Se_{0.15} = [8.75(Ge_{0.02}S_{0.04})] \cdot [3.75(Ge_{0.02}Se_{0.04})] \cdot [8Ge] \cdot [17As]$ |

Tədqiqatlar göstərir ki, istər bəsit, istərsə də mü-rəkkəbkomponentli xalkogenid şüşələrdə (2)-düsturu ilə ifadə edilən sadə Taus münasibətindən kənarəçix-malar müşahidə edilir. Yəni, müxtəlif xalkogenid şü-şələrdə Taus asılılığında $[(\alpha \cdot hv)^{1/n} \sim f(hv)]$ n -qüvvət üstünün tərs qiyməti $m=1/n=0.5$ -dən fərqli qiymətlər ala bilər. Məsələn bəsit amorf seləndə (Se), eləcə də ar-senin (As) və germaniumun (Ge) binar xalkogenid şü-şələrində (a-Se, a-As₂S₃, a-As₂Se₃, a-GeS₂) optik udul-manın spektral asılılığının tədqiqi göstərir ki, şüşələş-mə temperaturundan (T_g) aşağı temperaturda termik iş-ləmədən əvvəl və sonra Taus münasibətindən (2) kəna-raçixmalar müşahidə edilərək $m = 1; 0.7; 0.73; 0.38$ və $m = 1; 0.59; 0.58; 0.44$ qiymətlərinə malik olur [16]. Müəyyən olunmuşdur ki, yuxarıda qeyd olunan təcrübi faktlar hal sıxlığının enerjiden asılılığının sərbəst elek-tron halları sıxlığından kənarəçixması ilə bağlı olub, əsasən amorf maddələrin müxtəlif fiziki xassələrində həlledici rol oynayan fraktalların mövcudluğu ilə təsvir edilməlidir [17]. [14, 15]- işlərində təsvir edilən d -öl-çülü fəza əvəzinə fraktal fəza ölçüləri (D) anlayışı daxil edildiyini [18] və amorf maddələr üçün ölçüləri D -olan fraktal fəzada genişlənmiş halların sıxlığının He [19] düsturu (3) ilə təsvir olunduğunu nəzərə alsaq, optik udulma əmsalının (α) fotonun enerjisindən (hv) asılı-lığında $p + s + 1 = \frac{D_p + D_c + 1}{2}$ əvəzləməsini edərək (1)-düsturunu fraktal ölçülər vasitəsi ilə (4) – münasibəti ilə yazmaq mümkündür [15].

$$N(E) dE \propto \rho^{D-1} d\rho \propto E^{(D-2)/2} dE \quad (3)$$

$$\alpha \cdot hv = C' (hv - E) \frac{D_p + D_c + 1}{2} \quad (4)$$

Müəlliflər [17, 18] tərəfindən təklif olunan yanaşmalar-dan və müxtəlif ciddi nəticələrdən [15] belə qənaətə gə-linir ki, (3) və (4) düsturlarını cədvəl 2-də təsvir olunan təcrübi və riyazi uzlaşdırmanın nəticələrinə tətbiq olu-narsa, tədqiq olunan maddələrdə optik udulmanın yeni xüsusiyyətlərinin aşkar edilməsi mümkün olacaqdır. Riyazi uzlaşdırma nəticəsində alınan $\alpha \cdot hv \sim A \cdot (hv - E_g)^n$ –asılılığının qüvvət üstünü (n) (3) düsturunda [19] gös-tərilən $n = (D-2)/2 = (D_v + D_c - 2)/2$ ifadəsində nəzərə alaraq tədqiq olunan şüşəvari maddələrə məxsus fraktal ölçülər (D) hesablanmış və alınan nəticələr cədvəl 2-də təsvir edilmişdir. Cədvəl 1 və cədvəl 2-də təsvir edilən nəticələrin müqayisəli analizindən məlum olur ki, kim-yəvi nizamlı şəbəkə modelinin (CON) tələblərini ödə-yən və şüşəvari matrisin formalaşmasında mühüm rol oynayan tetraedrik quruluş elementlərinin ($GeS_{4/2}$, $GeSe_{4/2}$) ümumi nisbi payı piramidal quruluş element-lərinin ($AsSe_{3/2}$) nisbi payından yüksək olan tərkiblərdə ($Ge_{0.175}As_{0.15}S_{0.15}Se_{0.525}$, $Ge_{0.24}As_{0.19}S_{0.20}Se_{0.37}$, $Ge_{0.25}As_{0.10}S_{0.25}Se_{0.40}$, $Ge_{0.26}As_{0.18}S_{0.30}Se_{0.26}$) fraktal fə-za ölçüləri ($D=3,54; 3,35; 3,587; 3,1$) daha yüksək olur. Bu nəticə tədqiq olunan tərkiblərdə məhdudiyətlər miqdarının (N_{co}), orta rabitə enerjisinin ($\langle E \rangle$) qiymət-lərinin yüksək olması, yəni yüksək topoloji şəbəkə və kimyəvi əlaqələliyin varlığı ilə öz təsdiqini tapır [20]. $Ge_{0.33}As_{0.17}S_{0.35}Se_{0.15}$ xalkogenid şüşəvari tərkibində isə yuxarıda qeyd olunan nəticədən kənarəçixma müşahidə olunur (cədvəl 2). Fraktal fəza ölçülərini (D) Porod asılı-lığının qüvvət üstünün $n_p = 6 - D$ –düsturunda nəzərə al-saq n_p -nin $1 < n_p < 3$ intervalında dəyişdiyi aşkar olunur [21]. Bu isə n_p -nin qiymətinin $1 < n_p < 3$ intervalında də-yişdiyi halda nahamar səthli səpici mərkəzlərin fəza (həcmi) ölçülü fraktallara çevrildiyini sübut edir. La-kin, bundan fərqli olaraq fraktal ölçüləri $D=2,37; 2,852; 2,86; 2,9$ olan (cədvəl 2) nümunələrdə n_p -nin

qiyməti $3 < n_p < 4$ intervalında dəyişir ki, bu da uyğun tərkibli nümunələrdə səpici mərkəzlərin nahamar səthə malik D -ölçülü fraktallar olduğunu sübut edir

Cədvəl 2.

Optik eksperimentlərin nəticələrindən alınan təcrübi və riyazi uzlaşdırmanın nəticələri

| <i>Tərkiblər</i> | <i>Z</i> | <i>R</i> | <i>A</i> | <i>E_{gfi}</i> | $\frac{n}{p+s+1}$ | <i>D_v+D_c</i> | <i>m=1/n</i> | <i>D=(D_v+D_c)/2</i> |
|--|----------|----------|----------|------------------------|-------------------|------------------------------------|--------------|--|
| 1 Ge ₄ As ₁₄ Se ₈₂ | 2,22 | 2,83 | 497482 | 1,85 | 1,86 | 5,72 | 0,537 | 2,86 |
| 2 Ge ₄ As ₁₄ S ₂ Se ₈₀ | 2,22 | 2,83 | 339057 | 1,86 | 1,59 | 5,18 | 0,628 | 2,59 |
| 3 Ge ₇ As ₁₆ S ₅ Se ₇₂ | 2,3 | 2,03 | 620888 | 1,847 | 1,852 | 5,704 | 0,539 | 2,852 |
| 4 Ge ₁₀ As ₂₀ S ₁₀ Se ₆₀ | 2,4 | 1,4 | 511748 | 1,826 | 1,9 | 5,8 | 0,556 | 2,9 |
| 5 Ge _{17,5} As ₁₅ S ₁₅ Se _{52,5} | 2,5 | 1,17 | 474963 | 1,834 | 2,54 | 7,08 | 0,393 | 3,54 |
| 6 Ge ₂₄ As ₁₉ S ₂₀ Se ₃₇ | 2,67 | 0,75 | 199965 | 1,786 | 2,35 | 6,7 | 0,425 | 3,35 |
| 7 Ge ₂₅ As ₁₀ S ₂₅ Se ₄₀ | 2,6 | 1 | 286200 | 1,879 | 3,175 | 7,175 | 0,315 | 3,587 |
| 8 Ge ₂₆ As ₁₈ S ₃₀ Se ₂₆ | 2,7 | 0,71 | 229019 | 1,845 | 2,1 | 6,2 | 0,476 | 3,1 |
| 9 Ge ₃₃ As ₁₇ S ₃₅ Se ₁₅ | 2,83 | 0,55 | 171075 | 1,828 | 1,37 | 4,74 | 0,729 | 2,37 |

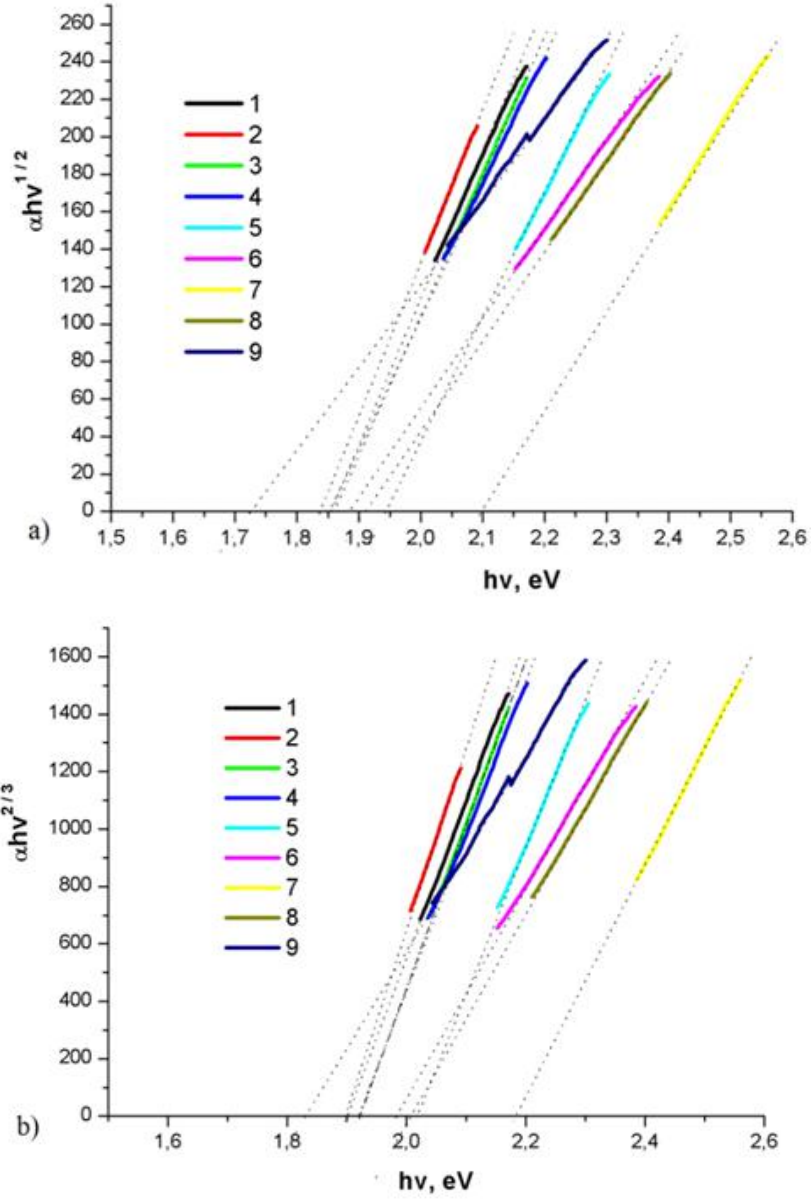
Beləliklə, tetraedrik quruluş elementlərindən (GeS_{4/2}, GeSe_{4/2}) və qalıq Ge, As atomlarından ibarət olan Ge_{0.33}As_{0.17}S_{0.35}Se_{0.15} –tərkibində fraktal fəza ölçülərinin daha çox kiçilməsi ($D=2,37$) 3-ölçülü şüşəvari şəbəkənin tərkibində 1-ölçülü etana bənzər [(CH₃)Ge-Ge(CH₃)] quruluş elementlərinin yaranması ilə əlaqədardır. Bu halda konsentrasiyası yüksək olan germanium atomları arasında homopolyar əlaqələr (Ge-Ge) yuxarıda təsvir olunan quruluş elementləri hesabına mümkün olur. Bunun nəticəsində cədvəl 1-də qeyd olunan Ge_{0.33}As_{0.17}S_{0.35}Se_{0.15} tərkibi üçün kimyəvi nizamlı şəbəkə modelinin (CON) tələbləri nisbətən pozularaq tetraedrik quruluş elementlərinin (GeS_{4/2}, GeSe_{4/2}) formalaşması ilə müqayisədə daha yüksək ehtimallı GeSe_{3/2} quruluş elementlərinin yaranması icazəli olur. Nəticədə, yuxarıda qeyd olunan fraktal fəza ölçülərinin ($D=2,37$) yenidən kiçilməsi baş verir. Güclü udulma ($\alpha > 10^4 \text{sm}^{-1}$) oblastına uyğun enerji intervalında (1)-asililiğinin qüvvət üstünü ($n=p+s+1$), E -yürlük aralığı zonasının enini və C' -əmsalını dəqiq təyin etmək üçün, Belehradek funksional (5) asılılığı və təcrübi asılılıq (şəkil 1) arasında müqayisəli riyazi uzlaşdırma edilmiş və alınan nəticələr cədvəl 2-də təsvir edilmişdir.

$$y = a \cdot (x - b)^c \quad (5)$$

Belehradek funksional (5) asılılığı və təcrübi asılılıq (şəkil 1) arasında müqayisəli riyazi uzlaşdırmanın nəticələri göstərir ki, Ge₄As₁₄S₂Se₈₀, Ge₃₃As₁₇S₃₅Se₁₅

xalkogenid şüşəvari tərkiblərində $\alpha \cdot hv \sim A \cdot (hv - E_g)^{p+s+1}$ –asililiğinin qüvvət üstü $n=1.59$ və $n=1.37$ qiymətlərinə malik olur. Qeyd olunan qiymətlər müəyyən xəta tərtibində $n \sim 3/2$ -ə yaxın olub, düz qadağan optik keçidlərin mövcudluğu ilə izah olunur [7-9]. Bundan fərqli olaraq Ge₁₀As₂₀S₁₀Se₆₀, Ge₂₆As₁₈S₃₀Se₂₆ tərkiblərində, riyazi uzlaşdırmanın nəticələri uyğun olaraq (1)-asililiyinə məxsus qüvvət üstünün $n=1,9$ və $n=2,1$ qiymətləri ilə xarakterizə olunduğunu təsdiq edir. Alınan nəticə $n \sim 2$ - qiymətinə daha uyğun olub, tədqiq olunan tərkiblərdə optik udulmanın əsasən çəp icazəli optik keçidlərin iştirakı ilə baş verdiyini sübut edir [7-9]. Buradan belə nəticəyə gəlinir ki, Ge₁₀As₂₀S₁₀Se₆₀, Ge₂₆As₁₈S₃₀Se₂₆ xalkogenid şüşələrində (1)-asililiğinin qüvvət üstü $p+s+1=d-1=n \sim 2$ olduğundan, $p=s=1/2$ və $d=3$ şərti ödənilməlidir.

Yəni, alınan sistemlərdə genişlənmiş keçiricilik və valent zona halları sıxlığının enerjiden asılılığı parabolik olmaqla yanaşı, sistemlər 3D-ölçülərinə malikdir. Riyazi uzlaşdırmanın nəticələrinin doğru və ya doğru olmadığını sübut etmək üçün güclü udulma ($\alpha > 10^4 \text{sm}^{-1}$) oblastından Taus düsturuna (2) əsasən $(\alpha \cdot hv)^{1/2} \sim f(hv)$ asılılığı və düz qadağan olunmuş optik keçidlərlə bağlı olan $(\alpha \cdot hv)^{2/3} \sim f(hv)$ asılılığı (şəkil 2(a,b)) qurulmaqla optik udulmanın $\alpha=0$ qiymətinə ekstrapolyasiya edilərək yürlük aralığının enləri (E_{g1e}, E_{g2e}) (və ya optik qadağan zonanın eni) təyin edilmiş və alınan nəticələr cədvəl 3-də təsvir edilmişdir.

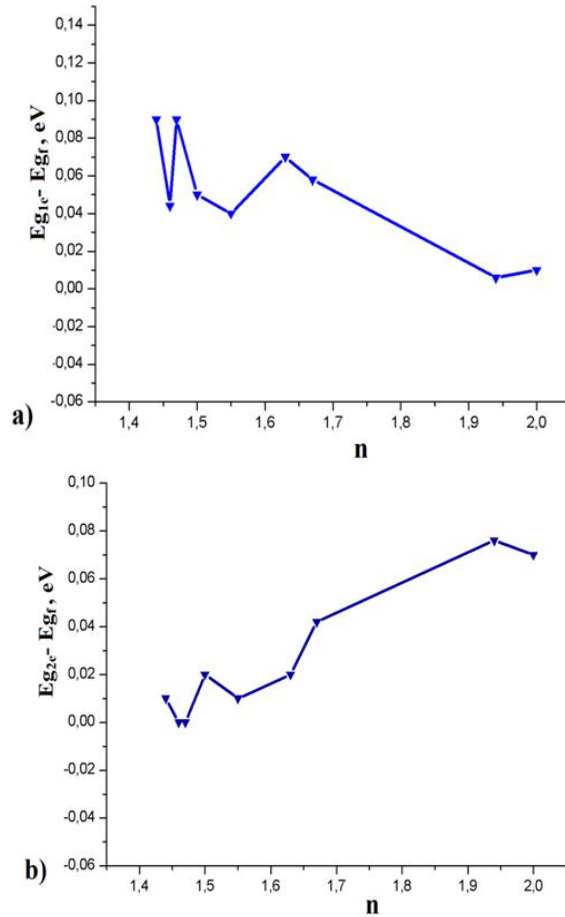


Şəkil 2. Güclü udulma oblastında $(ah\nu)^{1/2}$ və $(ah\nu)^{2/3}$ - qüvvət üstlü hasilərinin fotonun enerjisindən ($h\nu$) asılılıqları

Cədvəl 3.

Riyazi uzlaşdırmanın nəticələri ilə təcrübi nəticələr arasında uyğunluğu və zəif kənarçıxmaları sübut edən nəticələr.

| | Tərkiqlər | Z | R | A | E_{gnt} | $Taus(1/2)$ | $Taus(2/3)$ | $n= p+s+1$ | $m=1/n$ |
|---|-----------------------------------|------|------|--------|-----------|-------------|-------------|------------|---------|
| 1 | $Ge_4As_{14}Se_{82}$ | 2,22 | 2,83 | 497482 | 1,9 | 1,856 | 1,9 | 1,46 | 0.6849 |
| 2 | $Ge_4As_{14}S_2Se_{80}$ | 2,22 | 2,83 | 339057 | 1,88 | 1,84 | 1,89 | 1,55 | 0.6451 |
| 3 | $Ge_7As_{16}S_5Se_{72}$ | 2,3 | 2,03 | 620888 | 1,85 | 1,86 | 1,92 | 2 | 0.5 |
| 4 | $Ge_{10}As_{20}S_{10}Se_{60}$ | 2,4 | 1,4 | 511748 | 1,844 | 1,85 | 1,92 | 1,94 | 0.5154 |
| 5 | $Ge_{17,5}As_{15}S_{15}Se_{52,5}$ | 2,5 | 1,17 | 474963 | 2 | 1,95 | 2,02 | 1,5 | 0.6667 |
| 6 | $Ge_{24}As_{19}S_{20}Se_{37}$ | 2,67 | 0,75 | 199965 | 1,97 | 1,88 | 1,98 | 1,44 | 0.6944 |
| 7 | $Ge_{25}As_{10}S_{25}Se_{40}$ | 2,6 | 1 | 286200 | 2,18 | 2,09 | 2,18 | 1,47 | 0.6802 |
| 8 | $Ge_{26}As_{18}S_{30}Se_{26}$ | 2,7 | 0,71 | 229019 | 1,98 | 1,91 | 2 | 1,63 | 0.6134 |
| 9 | $Ge_{33}As_{17}S_{35}Se_{15}$ | 2,83 | 0,55 | 171075 | 1,788 | 1,73 | 1,83 | 1,67 | 0.5988 |



Şəkil 3. Riyazi uzlaşdırmadan alınan yürlüklük aralığı eninin (E_{gf}) - qiymətləri ilə təcrübədən alınan qiymətlər (E_{g1e} , E_{g2e}) arasındakı fərqlərin $(\alpha \cdot hv)^{1/n} \sim f(hv)$ -un qüvvət üstündən asılılığı.

Cədvəl 4.

Optik keçidlərin növü və həmçinin valent və keçirici zona kənarında hal sıxlığının paylanması

| | Tərkiblər | $n = p+s+1$ | p | s | $g_v(E_v)$ | $g_c(E_c)$ |
|---|--|-------------|-------|-------|------------------------|------------------------|
| 1 | Ge ₄ As ₁₄ Se ₈₂ | 1.46 | 0.23 | 0.23 | $G_v(E_v - E)^{0.23}$ | $G_c(E - E_c)^{0.23}$ |
| 2 | Ge ₄ As ₁₄ S ₂ Se ₈₀ | 1.55 | 0.275 | 0.275 | $G_v(E_v - E)^{0.275}$ | $G_c(E - E_c)^{0.275}$ |
| 3 | Ge ₇ As ₁₆ S ₅ Se ₇₂ | 2 | 0.5 | 0.5 | $G_v(E_v - E)^{0.5}$ | $G_c(E - E_c)^{0.5}$ |
| 4 | Ge ₁₀ As ₂₀ S ₁₀ Se ₆₀ | 1.94 | 0.47 | 0.47 | $G_v(E_v - E)^{0.47}$ | $G_c(E - E_c)^{0.47}$ |
| 5 | Ge _{17.5} As ₁₅ S ₁₅ Se _{52.5} | 1.5 | 0.25 | 0.25 | $G_v(E_v - E)^{0.25}$ | $G_c(E - E_c)^{0.25}$ |
| 6 | Ge ₂₄ As ₁₉ S ₂₀ Se ₃₇ | 1.44 | 0.22 | 0.22 | $G_v(E_v - E)^{0.22}$ | $G_c(E - E_c)^{0.22}$ |
| 7 | Ge ₂₅ As ₁₀ S ₂₅ Se ₄₀ | 1.47 | 0.235 | 0.235 | $G_v(E_v - E)^{0.235}$ | $G_c(E - E_c)^{0.235}$ |
| 8 | Ge ₂₆ As ₁₈ S ₃₀ Se ₂₆ | 1.63 | 0.315 | 0.315 | $G_v(E_v - E)^{0.315}$ | $G_c(E - E_c)^{0.315}$ |
| 9 | Ge ₃₃ As ₁₇ S ₃₅ Se ₁₅ | 1.67 | 0.335 | 0.335 | $G_v(E_v - E)^{0.335}$ | $G_c(E - E_c)^{0.335}$ |

Şəkil 3-dən görüldüyü kimi riyazi uzlaşdırmadan alınan yürlüklük aralığı eninin (E_{gf}) - qiymətləri ilə təcrübədən alınan qiymətlər (E_{g1e} , E_{g2e}) arasındakı fərq əhəmiyyətli yəni yanaşmadan fərqli olaraq optik udulma keçidlərinin növü və o cümlədən, valent və keçirici zona kənarındakı hal sıxlığının energetik paylanması [$g_c(E_c) = G_c(E - E_c)^s$ və $g_v(E_v) = G_v(E_v - E)^p$] haqqında daha dəqiq məlumatlar əldə etməyə imkan verir.

Digər tərəfdən şəkil 3a-dən belə nəticəyə gəlmək olur ki, Belehradək funksional (3) asılılığı və təcrübə asılılığı (şəkil 1) arasındakı riyazi uzlaşdırmanın nəticəsində $(\alpha \cdot hv)^{1/n} \sim f(hv)$ -asılılığının qüvvət üstünün $n=2$ və 1.94 qiymətlərinə uyğun olaraq E_{gf} -nin təyin olunan qiymətləri ilə $(\alpha \cdot hv)^{1/2} \sim f(hv)$ təcrübə asılılığından alı-

nan E_{g1e} -in qiymətləri arasındakı fərqlər olduqca kiçikdir. Lakin bundan fərqli olaraq $(\alpha \cdot hv)^{1/n} \sim f(hv)$ -asılılığının qüvvət üstünün $n=1.46$; 1.55; 1.5; 1.44; 1.47; 1.63 və 1.67 qiymətlərinə uyğun olaraq E_{gf} -nin təyin olunan qiymətləri ilə $(\alpha \cdot hv)^{2/3} \sim f(hv)$ təcrübə asılılığından alınan E_{g2e} -in qiymətləri arasındakı fərq olduqca kiçikdir (şəkil 3b). Yuxarıda qeyd olunan hər iki fərqli nəticə birmənalı olaraq bizə optik keçidlərin növü və həmçinin valent və keçirici zona kənarında hal sıxlığının paylanma mənzərəsini təsvir etməyə zəmin yaradacaqdır.

Beləliklə müəyyən olunmuşdur ki, yuxarıda alınan təcrübə nəticələrdə hal sıxlığının enerjiden asılılığının sərbəst elektron halları sıxlığından kənar çıxması

əsasən amorf maddələrin müxtəlif fiziki xassələrində həlledici rol oynayan fraktalların mövcudluğu ilə əlaqədardır.

4. XÜLASƏ

Optik udulma əmsalının (α) spektral asılılığı ilə Belehradek funksional (5) asılılığı arasında aparılan

müqayisəli riyazi uzlaşdırma nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, orta koordinasiya ədədi (Z) və R -parametri $Z=2,5-2,7$ və $R=1,17-0,71$ qiymətlərinə malik olan $\text{Ge}_{0.175}\text{As}_{0.15}\text{S}_{0.15}\text{Se}_{0.525}$, $\text{Ge}_{0.24}\text{As}_{0.19}\text{S}_{0.20}\text{Se}_{0.37}$, $\text{Ge}_{0.25}\text{As}_{0.10}\text{S}_{0.25}\text{Se}_{0.40}$, $\text{Ge}_{0.26}\text{As}_{0.18}\text{S}_{0.30}\text{Se}_{0.26}$ tərkiblərində Porod asılılığının qüvvət üstünün (n_p) $1 < n_p < 3$ intervalında dəyişməsi nahamar səthli səpici mərkəzlərin fəza (həcmi) ölçülü fraktallara çevrilməsi ilə bağlıdır.

- [1] *N.F. Mott and E.A. Davis*. Electronic Processes in Non-Crystalline Materials, Clarendon Press, Oxford, 1979.
- [2] *G.D. Cody*. In: Pankov, J.I (ed.), Hydrogenated Amorphous Silicon, Vol. 21, part B, Academic Press, New York, 1989, p. 11.
- [3] *S. Adachi*. Optical Properties of Crystalline and Amorphous Semiconductors: Materials and Fundamental Principles. Kluwer Academic, Boston, 1999.
- [4] *K. Morigaki*. Physics of Amorphous Semiconductors, World Scientific, Singapore, 1999.
- [5] *Jai Singh and Koichi Shimakawa*. Advances in Amorphous Semiconductors, 2003, Taylor Francis, p.324
- [6] *J.D. Dow and D. Redfield*. Electro absorption in Semiconductors: The Excitonic Absorption Edge. Phys. Rev. B 1, 1, 1970, p.3358
- [7] *S.K. Mohamed, M.M. Abd El-Raheem, M.M. Wakkad, A.M. Abdel Hakeem, H.F. Mohamed*. Structural, optical, and electrical characteristics of $\text{Ge}_{18}\text{Bi}_4\text{Se}_{78}$ chalcogenide glass for optoelectronic applications. Memories - Materials, Devices, Circuits and Systems 6, 2023, 100085.
- [8] *Bin Ye, Shixun Dai, Wang, Guangming Tao, Peiqing Zhang, Xunsi Wang, Xiang Shen*. Influence of the Selenium content on thermomechanical and optical properties of Ge-Ga-Sb-S chalcogenide glasses. Infrared Physics Technology <http://dx.doi.org/10.1016/j.infrared.2016.05.013>
- [9] *Shiv Kumar Pal, Neeraj Mehta, H.E. Atyia, S.S.Fouad*. Investigation of optical band-gap and related optical properties in thin-films of Ge containing Se-Te-Sn alloys// Journal of Non-Crystalline Solids 551,120399(2021),
- [10] *M.I. Abd-Elrahman, A.A. Abu-Sehly, Sherouk Sh. El-sonbaty, M.M. Hafiz*. Optical and electrical properties of thermally evaporated $\text{Se}_{90}\text{Sb}_{10}$ thin film. Materials Science and Engineering B,
- [11] *S.R. Elliott*. Physics of Amorphous Materials/ S.R. Elliott– New York: Longman Inc, 1984, 401p.
- [12] *Richard Zallen*. Physics of Amorphous Solids/John Wiley Sons Inc, 1998, 304p.
- [13] *J. Tauc*. Mat. Res. Bull. 3,37, 1968.
- [14] *J. Singh*. J. Non-Cryst. Solids, 2002a, 299–302, 444.
- [15] *J. Singh*. Nonlinear Optics. 2002b, 29, 115.
- [16] *Mehern-Nessa, K. Shimakawa, A. Ganjoo and J. Singh*. J. Optoelect. Adv. Mater., 2000, 2, 133.
- [17] *R. Zallen*. The Physics of Amorphous Solids. John Wiley & Sons, New York, 1983.
- [18] *B.B. Mandelbrot*. The Fractal Geometry of Nature. Freeman, New York, 1982.
- [19] *X.F. He*. Phys. Rev. B 42, 1990, 11751.
- [20] *Rahim Alekberov, Salima Mekhtiyeva, Samir Mammadov*. Study of correlations between glass-transition temperature and local structure of Ge-As-Se, Ge-As-Se-S chalcogenide glasses. Philosophical Magazine. Part A: Materials Science, vol.103, 2023, Iss.19. p.1828-1841
- [21] *B. Hammouda*. Probing nanoscale structures-the SANS toolbox / B. Hammouda,- USA: National Institute of Standards and Technology Center for Neutron Research Gaithersburg, MD 20899-6102, 2010, 692p.

S.M. Mammadov

INVESTIGATION OF THE SPECTRAL DEPENDENCE OF OPTICAL ABSORPTION IN A GLASSY Ge-As-Se-S CHALCOGENIDE SYSTEM BY MATHEMATICAL CONSISTENCY METHOD

In this work, the spectral dependence of the optical absorption coefficient (α) was measured for various compositions of the Ge-As-Se-S glassy system, and a comparative mathematical fitting of the experimental dependence with the Belehradek functional relation was carried out. It was established that deviations of the inverse value of the power exponent n in the Tauc relation $[(\alpha \cdot hv)^{1/m} \sim f(hv)]$ from $m = 0.5$ are associated with the departure of the energy dependence of the density of states from that of free-electron states, which is explained by the fractal characteristics of the investigated materials.

Qəbul olunma tarixi: 04.09.2025