

XALKOGENİD ŞÜŞƏVARI YARIMKEÇİRİCİ Se - Sb SİSTEMİNİN LOKAL QURULUŞU VƏ OPTİK XASSƏLƏRİ

R.F. SADIXLI, M.E. XALIQZADƏ

Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının H.M.Abdullayev adına Fizika İnstitutu

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

E-mail: ramida_sadikhli@mail.ru

XŞY Se-Sb təbəqələrinin lokal quruluşu və optik xassələri rentgen şüalarının difraksiyası, işığın raman səpilməsi, optik buraxma spektrləri metodları ilə tədqiq olunmuşdur. Orta nizam oblastının ölçüsü və həmin oblast daxilində sıxlığın fluktuasiyasının kvaziperiodu, qadağan zonanın optik eni hesablanmış, amorf matrisanı əmələ gətirən əsas kimyəvi rabitələr və quruluş elementləri təyin olunmuşdur. Yaxın və orta nizam parametrləri ilə makroskopik xassələr arasındakı korrelyasiyanın mövcudluğunu aşkar etmək üçün orta koordinasiya ədədi, kimyəvi rabitələrin nisbi miqdarı, kohesiv enerji və orta rabitə enerjisi hesablanmış və alınan nəticələr kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelinin prinsiplərinə əsaslanaraq izah olunmuşdur.

Açar sözlər: orta nizam, Raman səpilməsi, qadağan zonanın optik eni, orta rabitə enerjisi.

PACS: 81.05.Gc

Son onilliklər ərzində xalkogenid şüşəvari yarımkeçiricilərin (XŞY) həm quruluşu, həm də fiziki xassələrinin tədqiqinə həsr olunmuş elmi məqalələrin sayı sürətlə artmaqda davam edir [1-7]. Buna səbəb həmin qrupa daxil olan maddələrin tətbiq oblastlarının geniş olması və zaman keçdikcə yeni tətbiq oblastlarının meydana çıxmasıdır. Tətbiq oblastlarının geniş spektri XŞY maddələrin spektrin görünən və infraqırmızı oblastında şəffaflığı, optik sındırma əmsalının yüksək olması, optik xassələrinin qeyri-xətliliyi və onlarda fotoinduksiya proseslərinin, dönər və dönməz aşırma hadisələrinin müşahidə olunması, qeyd olunan xassə və proseslərin, kimyəvi tərkibi dəyişməklə, aşqarlanma ilə idarə oluna bilməsi və nəhayət, texnoloji proseslərin kifayət qədər sadə olması ilə əlaqədardır.

Kristal və qeyri-kristal maddələrin quruluşundakı mühüm fərqlilik birincilərdə mövcud olan translyasiya simmetriyasının ikincilərdə ödənilməməsidir. Qeyri-kristal yarımkeçiricilərdə yaxın qonşu atomlar arasında mövcud olan, birinci və ikinci koordinasiya sferalarını əhatə edən oblastlardakı nizam saxlanılır. Keçən əsrin 80-ci illərindən başlayaraq aparılan tədqiqatlar göstərdi ki, həmin maddələrdə bir neçə koordinasiya sferasını əhatə edən oblastlarda da quruluş elementlərinin düzülüşündə müəyyən nizam mövcuddur ki, bu da orta nizam oblastı adlanır. Qeyri-kristal yarımkeçiricilərin fiziki xassələri yaxın və orta nizam quruluşunun xüsusiyyətləri ilə təyin olunur. Qeyd etmək lazımdır ki, kristal maddələrdə mövcud olan yaxın nizam azacıq fərqlənmə ilə qeyri-kristallarda da saxlanılır. Lakin belə cüzi fərqlənmə qeyri-kristal yarımkeçiricilərin fiziki xassələrinin kəskin fərqlənməsinə səbəb olur. Amorf və şüşəvari maddələrdə baş verən fiziki proseslərin mexanizminin aydınlaşdırılması və praktika üçün yararlı olan materialların alınması müxtəlif tərkibli XŞY materiallar üçün lokal quruluş (yaxın və orta nizam) parametrləri ilə fiziki xassələr arasında əlaqənin öyrənilməsi vacibdir. Qeyd olunan problemin həlli uyğun tədqiqatların aparılmasını tələb edir. Təqdim olunan iş müxtəlif tərkibli amorf Se-Sb sisteminin lokal quruluş parametrlərinin, optik udulma əmsalının tədqiqinə və onlar arasındakı mümkün korrelyasiyanın

aşkar edilməsinə həsr olunmuşdur. Məhz buna görə də, müxtəlif tərkibli amorf Se-Sb sistemi sintez olunmuş, onların 1÷3 mkm qalınlıqlı nazik təbəqələri vakuumda buxarlanma üsulu ilə alınmış və alınan nümunələrdə rentgen şüalarının difraksiyası, raman səpilməsi və işığın optik udulma əmsalı tədqiq olunmuşdur. Tədqiqat obyektı olaraq amorf Se-Sb sisteminin seçilməsinə səbəb, tərkib elementlərinin koordinasiya ədədlərinin müxtəlifliyi hesabına orta koordinasiya ədədləri ilə bir-birindən fərqlənən kimyəvi tərkibli maddələr almağa imkan verməsidir. Bu da, öz növbəsində, fiziki xassələrin variyasiyasına səbəb olmalıdır. Digər tərəfdən məlumdur ki, selen kristallaşmaya qarşı davamlı olmadığı üçün, tətbiq oblastı məhdudlaşır (onun əsasında hazırlanan cihazların ömrü az olur). Sürmənin selenə əlavə edilməsi bu problemin aradan qaldırılmasına kömək edə bilər (Üç valentli Sb selen zəncirləri arasında əlaqə yaranmasına və quruluş elementlərinin böyük ölçülü, mütəhərrikiyinin zəif olmasına səbəb ola bilər.).

NÜMUNƏLƏRİN ALINMASI VƏ ÖLÇÜLMƏSİ METODLARI.

XŞY Se-Sb sisteminin alınma prosesi aşağıdakı ardıcılıqla aparılmışdır: xüsusi təmiz elementar maddələr tələb olunan miqdarda kvarts ampulaya doldurulmuş və içərisinin havası 10^{-4} mm civə sütunu təzyiqə qədər sorulduqdan sonra 3 saat ərzində $\sim 900^{\circ}\text{C}$ temperatura qədər qızdırılmış və nəhayət, həmin temperaturda 12 saat saxlanılmışdır. Alınan nümunələrin birincisliyini təmin etmək üçün sintez fırlanan sobada aparılmış, sobanı söndürməklə nümunələr otaq temperaturuna qədər soyudulmuşdur. Tədqiqatda istifadə olunan müxtəlif qalınlıqlı təbəqələr 10^{-4} mm civə sütunu təzyiqli vakuumda $0,2\pm 0,4$ mkm/san sürətlə buxarlandırma üsulu ilə şüşə altlıqlar üzərində alınmışdır.

Alınmış təbəqələrin aqreqat halı və lokal quruluşu Bruker (Almaniya) firmasının D8ADVANCE ovuntu difraktometrində rentgenquruluş analizi ilə 40kV, 40mA, $0 < 2\theta < 80^{\circ}$ rejimdə aparılmışdır. Difrak-

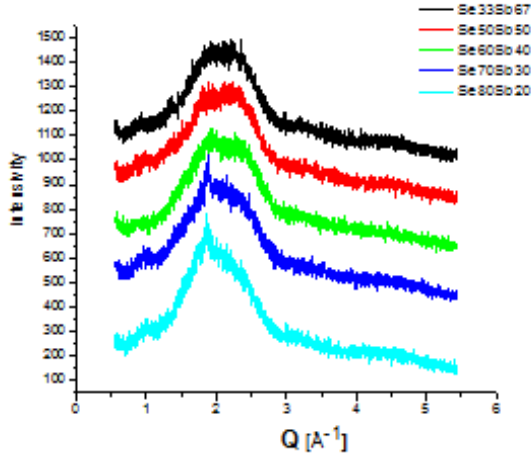
siya mənzərəsinin təhlili və difraksiya maksimumunun sahəsi, amplitudu, bucaq vəziyyəti (2θ), maksimumun yarısına uyğun olan eni (Full width at half maximum - $FWHM$) Evaluation xüsusi proqramına (Bruker, Almaniya) əsasən yerinə yetirilmişdir.

İşığın raman səpilmə spektri üçölçülü konfokal raman Nanofinder 30 (Tokyo Instr.) mikroskopunda tədqiq olunmuşdur. Həyəcanlaşdırıcı işığın dalğa uzunluğu 532 nm, təbəqənin üzərinə düşən işıq dəstəsinin en kəsiyinin radiusu ~4 mkm olmuşdur. Şüalanmanın qəbuledicisi kimi fotonları sayma rejimində işləyən, soyudulan CCD – kamerası (-70°C) istifadə olunmuşdur. Ekspozisiya müddəti 1 dəq. olmuşdur.

Təbəqələrin buraxma spektrləri SPECOL -1500 spektrofotometri ilə 190-1100 nm diapazonda tədqiq olunmuşdur. Spektrofotometrin yarığı 2 nm kimi tənzimlənmişdir.

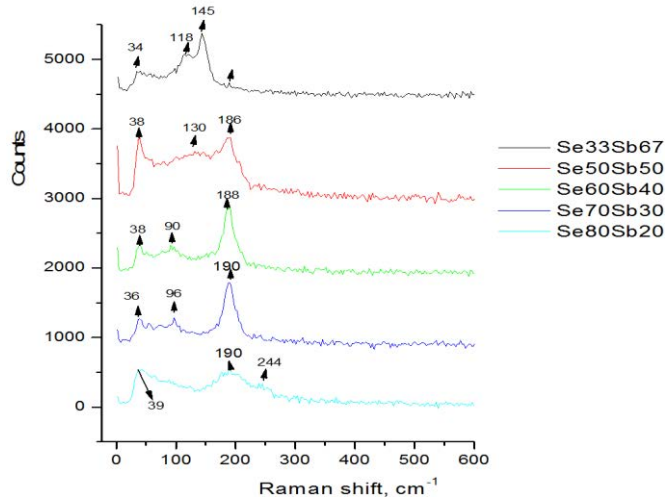
Bütün ölçmələr otaq temperaturunda aparılmışdır.

TƏCRÜBİ NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN İZAHİ.



Şəkil 1. XŞY Se-Sb sisteminin rentgen şüalarının difraksiyası zamanı intensivliyin paylanma mənzərəsi.

Şəkil 1-də müxtəlif kimyəvi tərkibli Se-Sb təbəqələrinin rentgen şüalarının difraksiyası mənzərəsində intensivliyin paylanma əyriləri göstərilmişdir. Difrak-



Şəkil 2. XŞY Se-Sb sisteminin raman səpilmə spektri.

siya mənzərəsində kristallara məxsus olan kəskin maksimumların olmaması onların amorfliyini sübut edir.

Qrafiklərdən görünür ki, tədqiq olunan nümunələrin difraksiya mənzərəsində XŞY maddələrə xas olan birinci kəskin difraksiya maksimumu (first sharp diffraction peak - FSDP) müşahidə olunmuşdur. Rentgen difraktoqrama əsasən FSDP-nin parametrləri $Q_0=4\pi \sin \theta/\lambda$ ($\lambda=1,54056\text{Å}$) düsturu ilə hesablanmış səpilmə vektoru, FSDP maksimumunun yarısına uyğun zolağın eni (ΔQ) və onlara əsasən hesablanmış ((1) və (2) düsturları) lokal quruluş parametrləri – sıxlığın fluktuasiyasının “kvaziperiod”u (d) və sıxlığın fluktuasiyasının periodikliyi ödənilən orta nizam oblastının ölçüsü – korrelyasiya məsafəsinin (L) qiymətləri [8, 9] 1-ci cədvəldə verilmişdir.

$$d = 2\pi/Q_0 \quad (1)$$

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

Cədvəldən görünür ki, d -nin qiymətində ciddi dəyişiklik olmadığı halda, L -in qiyməti Se atomlarının nisbi miqdarı böyük olan materiallarda daha böyükdür. Buradan belə nəticəyə gəlmək olar ki, tədqiq olunan XŞY maddənin quruluş elementləri arasında korrelyasiya Se-Se rabitələri hesabına yaranır.

Cədvəl 1.

XŞY Se-Sb sisteminin (1) və (2) düsturu ilə hesablanmış lokal quruluş parametrləri (d, L), qadağan zonanın optik eni (E_g) və orta koordinasiya ədədinin qiymətləri

Tərkiblər	$Q_0, \text{Å}^{-1}$	$\Delta Q, \text{Å}^{-1}$	$d, \text{Å}$	$L, \text{Å}$	E_g, eV
Se ₃₃ Sb ₆₇	0.99	0.72	6.34	7.72	0.7
Se ₅₀ Sb ₅₀	1.01	0.68	6.21	9.235	1.04
Se ₆₀ Sb ₄₀	1.002	0.61	6.267	10.3	1.29
Se ₇₀ Sb ₃₀	1	0.586	6.28	10.71	1.39
Se ₈₀ Sb ₂₀	1.009	0.55	6.224	11.418	1.5

XŞY Se-Sb sisteminin raman səpilmə spektri şəkil 2-də təsvir olunmuşdur. Qrafiklərdən görünür ki, kimyəvi tərkibin dəyişməsi ilə spektrlərdə ciddi dəyişikliklər baş verir. Se₈₀Sb₂₀ tərkibli təbəqənin spektrində 135÷230 sm⁻¹ və 230÷265 sm⁻¹ tezlik intervallarını əhatə edən iki zolaq müşahidə olunur. Qrafiklərdən görünür ki, tədqiq olunan sistemdə xalkogenin miqdarının azalması ilə ikinci zolaq tədricən itir, birinci zolağın eni kiçilir, amplitudu isə böyüyür. Sürmənin nisbi miqdarı daha çox olan tərkiblərdə aşağı tezlik oblastlarında yeni zolaqlar (90÷150sm⁻¹, 150÷225sm⁻¹) (Se₅₀Sb₅₀ nümunəsində), (90÷130sm⁻¹, 130÷186 sm⁻¹) (Se₃₃Sb₆₇ nümunəsində) və yeni maksimumlar (186,14sm⁻¹) yaranır.

Ən iti və daha böyük maksimum stexiometrik tərkibli maddədə (Se₆₀Sb₄₀) müşahidə olunur. Spekrtdə müşahidə olunan dəyişiklikləri izah etmək üçün kimyəvi əlaqə yaxınlaşmasının (Chemical bond approaches (CBA) model) əsas prinsiplərindən istifadə olunmuşdur [10]. Bu prinsiplərə görə, heteropolyar rabitələrin yaranma ehtimalı homopolyar rabitələrdən daha yüksəkdir və ilk olaraq daha möhkəm rabitələr (yüksək enerjiyə malik olan rabitələr) yaranır. Atomların mümkün valentliyi, CBA prinsiplərinin nəzərə alınması ilə müxtəlif tərkibli maddələrdə mümkün kimyəvi rabitələrin nisbi miqdarı, kohesiv enerjinin və orta rabitə enerjisinin qiymətləri 2-ci cədvəldə göstərilmişdir.

Cədvəl 2.

Tədqiq olunan tərkiblərdəki kimyəvi rabitələr, onların nisbi miqdarı və rabitə enerjisi, kohesiv enerjinin qiymətləri.

Kimyəvi tərkib	Se - Sb	Se - Se	Sb-Sb	CE, kC/mol	E _r , kC/mol		Z
Se ₃₃ Sb ₆₇	0,49		0,51	154,5	195	164,3	2,67
Se ₅₀ Sb ₅₀	0,8		0,2	172	210,6	183,8	2,5
Se ₆₀ Sb ₄₀	1,0			183,8	220,5	214,2	2,4
Se ₇₀ Sb ₃₀	0,78	0,22		183,9	211	212	2,3
Se ₈₀ Sb ₂₀	0,55	0,45		183,9	193	202	2,2
Rabitələrin enerjisi, kC/mol	183,8	184,1	126,4				

CBA-nın prinsiplərinə əsasən stexiometrik tərkibli 3-cü nümunənin amorf matrisası yalnız heteropolyar Se-Sb rabitələrindən (SbSe_{3/2} struktur elementlərindən) yaranmalıdır və raman spektrində 188 sm⁻¹-də müşahidə olunan maksimum (şəkil 2-də 3-cü qrafik) həmin rabitəyə məxsus olmalıdır. Həmin maksimum həm də başqa tədqiqatçılar tərəfindən müşahidə olunmuşdur və Sb-Se rabitələrinin rəqsi ilə əlaqələndirilmişdir [11-15]. 2-ci şəkiləki qrafiklərdən görünür ki, selen atomlarının nisbi miqdarı çox olan tərkiblərdə spektrin yüksək tezlik oblastındakı maksimumların intensivliyi artır və eyni zamanda yeni maksimumlar yaranır. Sürmənin nisbi miqdarı çox olan tərkiblərdə isə həmin maksimumlar tədricən aradan qalxır və alçaq tezlikli oblastda yeni maksimumlar yaranır. Buradan da belə qənaətə gəlmək olar ki, yaranan yeni maksimumlar birinci halda selen, ikinci halda isə sürmə atomlarının üstünlük təşkil etdiyi kimyəvi rabitələrlə və ya quruluş elementləri ilə əlaqədardır. 200÷265 sm⁻¹ tezlik intervalını əhatə edən və 208, 235, 250, 260 sm⁻¹ zəif maksimumlara malik zolaq müxtəlif ölçülü selen zəncirlərindəki, mürəkkəb tərkibli quruluş elementlərindəki və Se₈ həlqələrindəki Se-Se rabitələrinin rəqsləri ilə əlaqələndirilmişdir [16-19]. Sürmənin nisbi miqdarı çox olan Se₃₃Sb₆₇ tərkibli nümunədə müşahidə olunan 148sm⁻¹ tezlikli maksimum həm də [19] işində müşahidə olunmuşdur və Sb-Sb rabitəsi ilə əlaqələndirilmişdir. Fərz olunur ki, axırıncı iki nümunənin raman spektrin kiçik tezlik intervalında (90÷150sm⁻¹) müşahidə olunan zolaqlar Sb₃Se₄, Sb₄Se₅, SbSe kimi quruluş elementlərinin rəqsi ilə əlaqədardır.

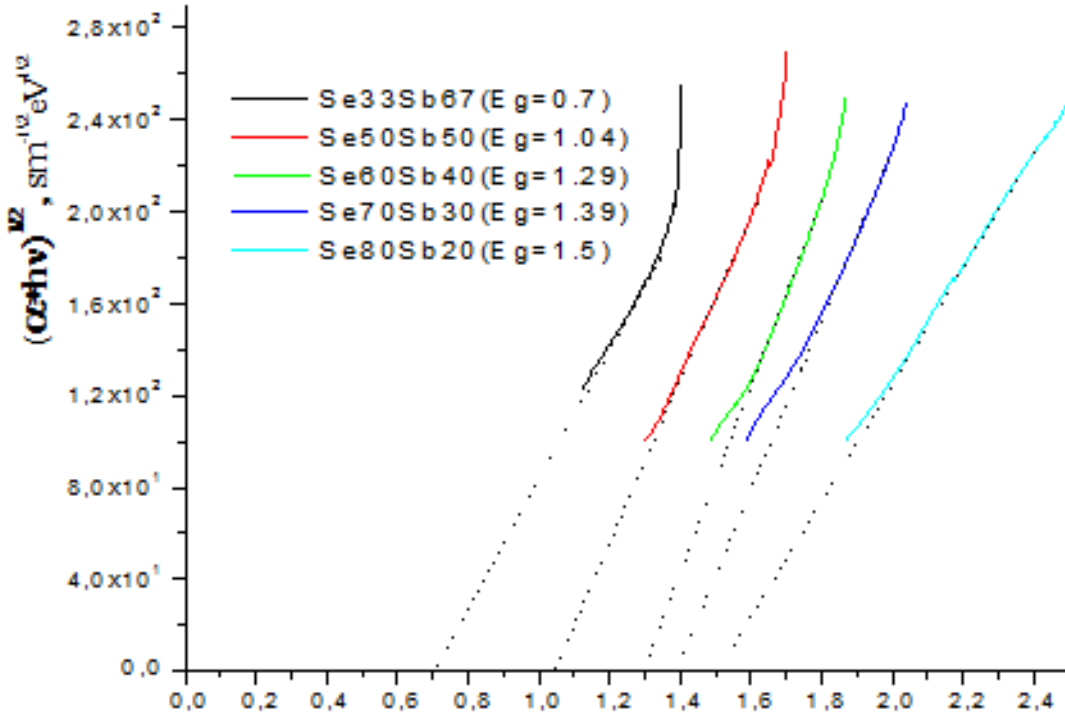
XŞY materialların optik udulma spektri udma əmsalının fotonun enerjisindən asılılığı ilə fərqlənən

üç hissədən ibarətdir: $\alpha < 1 \text{ sm}^{-1}$ və udma əmsalının fotonun enerjisindən asılılığının çox zəif olduğu oblast; udma əmsalının $\alpha = 1 \div 10^3 \text{ sm}^{-1}$ intervalında yerləşdiyi və Urbax qaydasına tabe olan oblast; fotonun enerjisinin yüksək olduğu ($\alpha \geq 10^4 \text{ sm}^{-1}$) və Taus qanununa [20-22] tabe olan oblast. İkinci oblastda (Urbax qaydasına tabe olan oblast) $\alpha = f(h\nu)$ asılılığı eksponensialdır və $\alpha(h\nu) \sim \exp[-(E_0 - h\nu)/\varphi]$ qanununa tabedir. α -ışığın udulma əmsalı, $h\nu$ – işıq fotonunun enerjisidir, E_0 – qadağan zonanın optik eni, φ udma kənarının dikliyini (yayıma dərəcəsinə) xarakterizə edən parametrdir. Taus qanununa [20-22] tabe olan oblastda udma əmsalının fotonun enerjisindən asılılığı

$$\alpha h\nu = A (h\nu - E_g)^2 \quad (3)$$

qanununa tabe olur. A – temperaturdan zəif asılı olan sabitdir.

Tədqiq olunan obyektlərin qadağan zonasının optik enini təyin etmək üçün buraxma spektrləri tədqiq olunmuş və Taus qanunu ödənilən oblastda $\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{(1-R)^2}{T}$ düsturu ilə udma əmsalı hesablanmış və alınan nəticələr $(\alpha h\nu)^{1/2}$ -in $h\nu$ -dən asılılığı şəklində 3-cü şəkilə təsvir olunmuşdur. R və T təbəqələrin əks-olma və buraxma əmsalı, d isə qalınlığıdır. Fotonun enerjisinin kifayət qədər geniş oblastında xətti asılılığın olması elektron keçidlərinin icazəli çəp keçidə uyğun olduğunu göstərir. Qrafikin xətti hissəsini udma əmsalının sıfır qiymətinə ekstrapolyasiya edərək qadağan zonanın optik eni təyin olunmuş və alınan nəticələr ikinci cədvəldə verilmişdir.



Şəkil 3. XŞY Se-Sb sisteminin optik udma spektrləri.

Optik udma əmsalı ilə amorf matrisanı xarakterizə edən yaxın nizam parametrləri və digər fiziki kəmiyyətlər arasındakı mümkün əlaqənin müəyyən edilməsi məqsədilə tədqiq olunan kimyəvi tərkiblərin orta koordinasiya ədədi (Z), kohesiv enerjisi (CE) (bütün rabitələrin qırılmasına sərf olunan enerjinin orta qiyməti) (4) və (5) düsturlarına əsasən hesablanmış və alınan nəticələr ikinci cədvəldə təsvir olunmuşdur.

$$Z = 3X_{Sb} + 2X_{Se} \quad (4)$$

$$CE = \sum_i c_i E_i \quad (5)$$

Burada X - maddədəki kimyəvi elementlərin molyar payı, c_i kimyəvi rabitələrin CBA-ya əsasən təyin olunmuş nisbi miqdarı, E_i – kimyəvi rabitənin enerjisidir.

Tədqiq olunan maddələrin orta rabitə enerjisinin (E_r) hesablanması üçün, iki müxtəlif metoddan [23-24] istifadə olunmuşdur. Kimyəvi tərkibləri fərqlənən XŞY maddələrdə kimyəvi rabitələrin nisbi miqdarı xalkogen atomları arasındakı mümkün kovalent rabitələrin sayının, xalkogen olmayan atomlar arasındakı kovalent rabitələrin sayına nisbəti ilə - R parametri ilə təyin olunur. $R=1$ qiyməti yalnız heteropolyar rabitələrdən ibarət stexiometrik tərkibə uyğundur ($Se_{60}Sb_{40}$). Xalkogen atomları ilə zəngin olan tərkiblərdə ($Se_{70}Sb_{30}$, $Se_{80}Sb_{20}$) R -in qiyməti 1-dən böyük, onların çatışmazlığı olan tərkiblərdə isə ($Se_{33}Sb_{67}$, $Se_{50}Sb_{50}$) 1-dən kiçik olur. [23] –ün müəllifi hər iki hal üçün orta rabitə enerjisini hesablamaq üçün metod təklif etmişdir. Hər iki halda orta rabitə enerjisi

$$E_r = E_c + E_{rm} \quad (6)$$

düsturu ilə təyin olunur. Burada E_c bir-biri ilə əlaqədə olan atomlar qrupunun orta rabitə enerjisidir. Onun ifadəsi:

$$E_c = P_r E_{hb} \quad R > 1 \quad (7)$$

$$E_c = P_p E_{hb} \quad R < 1 \quad (8)$$

P_r və P_p atomun rabitəlik dərəcəsinə (degree of cross-linking/atom) göstərən parametrdir. E_{hb} ortalama heteropolyar rabitə enerjisidir. Tədqiq olunan tərkiblərdə onun qiyməti Se-Sb rabitəsinin enerjisinə bərabərdir. P_r və P_p qiymətləri $P_r=x$ CN(A) və $P_p=y$ CN(C) ifadələri ilə təyin olunur. x , y maddədəki qeyri-xalkogen və xalkogen atomlarının molyar payı, CN(A) və CN(C) isə onların koordinasiya ədədləridir. Amorf matrisaya daxil olan digər atomların orta rabitə enerjisi aşağıdakı düsturlarla hesablanır:

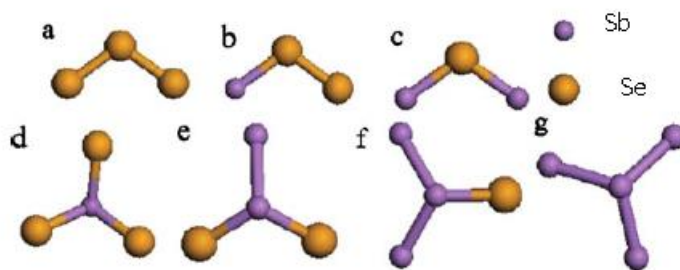
$$E_{rm} = 2\left(\frac{1}{2}Z - P_r\right) E_{c-c}/Z \quad R > 1 \quad (9)$$

$$E_{rm} = 2\left(\frac{1}{2}Z - P_p\right) \langle E \rangle / Z \quad R < 1 \quad (10)$$

Burada E_{c-c} - xalkogen atomları arasındakı rabitə enerjisi, $\langle E \rangle$ tərkibə daxil olan bütün rabitə enerjilərinin orta qiymətidir.

Şərh olunan metodla tədqiq olunan materialların orta rabitə enerjisi hesablanmış və alınan nəticələr 2-ci cədvəlin E_r sütunun sol tərəfində yerləşdirilmişdir.

Nəticələrin dəqiqliyinə əmin olmaq üçün, E_r parametrinin qiyməti [24] işinin müəllifləri tərəfindən təklif olunmuş metodla da hesablanmışdır. Qeyd olunan işdə maddədə mümkün rabitələrə (şəkil 4) əsasən orta rabitə enerjisi qiymətləndirilmiş və alınan nəticələr 2-ci cədvəlin E_r sütunun sağ tərəfində yerləşdirilmişdir.



Şəkil 4. XŞY Se-Sb sistemində Se və Sb atomlarının mümkün rabitələri.

Cədvəldən görünür ki, hər iki metoda əsasən alınan qiymətlər arasında qənaətbəxş uyğunluq mövcuddur. Hər iki halda orta rabitə enerjisinin ən böyük qiyməti stexiometrik tərkibli $Se_{60}Sb_{40}$ maddəsində alınmışdır. Həmin tərkibə uyğun amorf matrisanın daha təkmil olduğunu qəbul etsək, alınan nəticənin qanunauyğun olduğu təsdiqlənər. Lakin kimyəvi tərkibin dəyişməsi nəticəsində qadağan zonanın optik eninin qiymətləri ilə E_r arasında korrelyasiya müşahidə olunmur. Başqa $R > 1$ qiymətlərinə uyğun tərkiblərdə R -in artması ilə E_r azaldığı halda, qadağan zonanın optik eni artmaqda davam edir. Bu faktın mümkün interpretasiyası ondan ibarətdir ki, qeyd olunan tərkiblərdə icazəli zonaların sərhədləri əsasən selen atomunun orbitləri hesabına yaranır və ona görə də, E_g - nin qiyməti selenin qadağan zonasının eninə yaxınlaşır.

NƏTİCƏLƏR.

Müxtəlif tərkibli XŞY Se-Sb sistemi sintez olunmuş, vakuumda buxarlanma üsulu ilə onların qalınlıqlı təbəqələri alınmış və alınmış nümunələrdə rentgen şüalarının difraksiyası, işığın raman səpilməsi və optik buraxma spektrləri tədqiq olunmuşdur.

Rentgen şüalarının difraksiya ayrılırlarında müşahidə olunan FSDP orta nizam oblastının mövcudluğu ilə əlaqələndirilmiş, həmin oblastın ölçüsü (L) və kvazi-

periodun qiyməti (d) təyin edilmiş və göstərilmişdir ki, selen atomlarının nisbi miqdarı çox olan tərkiblərdə L -in qiyməti də yüksək olur. Qeyd olunan fakt quruluş elementlərinin düzülüşündəki korrelyasiyanın əsasən Se-Se rabitələri hesabına yarandığını göstərir.

Raman səpilməsinin tədqiqi göstərir ki, kimyəvi tərkibin dəyişməsi ilə raman spektrində ciddi dəyişikliklər baş verir. Stexiometrik tərkibli $Se_{60}Sb_{40}$ maddəsində 188 sm^{-1} -də müşahidə olunan kəskin maksimum Se-Sb rabitələri ilə əlaqələndirilmişdir. Selenin və sürmənin miqdarı yüksək olan tərkiblərdə müşahidə olunan maksimumların analizi birinci halda selen atomlarının, ikinci halda isə sürmə atomlarının üstünlük təşkil etdiyi struktur elementlərinin rəqsi ilə əlaqələndirilmişdir.

CBA modelinin prinsiplərinə əsaslanaraq yaxın nizam parametrləri - orta koordinasiya ədədi, maddədəki kimyəvi rabitələrin nisbi miqdarı, kohesiv enerji, orta rabitə enerjisi hesablanmışdır. Orta rabitə enerjisinin maksimal qiyməti ($220,5 \text{ kC/mol}$) stexiometrik tərkibli $Se_{60}Sb_{40}$ -a uyğun gəlməsi həmin tərkibli maddəyə xas olan amorf matrisanın daha təkmil olduğu ilə əlaqələndirilmişdir. Qadağan zonanın optik eninin ən böyük qiyməti selen atomlarının nisbi miqdarının çox olduğu tərkiblərdə müşahidə olunmuşdur. Qeyd olunan fakt icazəli zonanın sərhədinin əsasən Se atomunun orbitləri hesabına yarandığı ilə izah olunmuşdur.

- [1] K.Tanaka, K. Shimakawa. Amorphous Chalcogenide Semiconductors and Related Materials, Springer, Science-Bus. Media, LLC, 2011.
- [2] F. Verger, V. Nazabal, F. Colas et all. Optical Materials Express, 2013, v., 3, Iss. 12, pp. 2112-2131.
- [3] R.I. Alekberov, S.I. Mekhtiyeva, A.I. Isayev, M. Fábíán. Journal of Non-Crystalline Solids, 2017, v. 470, pp. 152-159.
- [4] Chalcogenide Glasses, Preparation, Properties and Applications, Ed. by: Adam J-l and Zhang X., ISBN: 978-0-85709-345-5, 2014.
- [5] J.S. Zakery and S. Elliott. Journal of Non-Crystalline Solids, v. 330, Iss. 1-3, pp. 1-12.
- [6] J. S. Sanghera and I.D. Aggarwal. Journal of Non-Crystalline Solids, 1999, v. 256-257(0), pp. 6-16.
- [7] J.M. Harbold, F.O. Ilday, F.W. Wise and B.G. Aitken. IEEE Photonics Technology Letters, 2002, v. 14(6), p.822-824.
- [8] J.H. Lee, S.R. Elliott. Journal of Non-Crystalline Solids, 1999, v. 192-193, pp. 133-136.
- [9] S.R. Elliott. Physical Review, B 51, 1995, pp. 8599, 1995.
- [10] A.S. Hassanien, A.A. Akl. Journal of Non-Crystalline Solids, 2015, v.428, pp. 112-120.
- [11] Y. Zhou, M. Leng, Z. Xia et all. Solution-Processed Antimony Selenide Heterojunction Solar Cells Adv. Energy Mater., 2014, 4, 1301846.
- [12] M. Kamruzzaman, Chaoping Liu, A.K.M. Farid Ul Islam, J.A. Zapien. A comparative study on the electronic and optical properties of Sb₂Se₃ thin film, ФТИИ, том 51, вып. 12, 1673, 2017.
- [13] Abdallah Belal Adam. J. of King Saud University - Science, v. 21, Issue 2, 2009, p. 93-97.
- [14] J. Holubova, Z. Černošek, E. Černoškova. Optoelectron. Adv. Mat., 2007, 1(12) 663-666.
- [15] V. Nazabal, P. Nemeč, A. M. Jurdyc. Thin Solid Films, 2010, 518(17), 4941-4947.

- [16] *A.H. Golden, C. Li, S. J.Pennycook et all.* J. of Appl. Phys., 2016, 120135101.
- [17] *S. El-Sayed.* Semicond. Sci. Technol. 2003, 18(4), 337.
- [18] *D. Goyal, A. Maan.* J. Non-Cryst. Solids, 1995, 183(1), 182-185.
- [19] *Chen Jiang, Xunsi Wang, Qingde Zhu, et all.* Improvements on the optical properties of Ge-Sb-Se chalcogenide glasses with iodine incorporation, HAL Id: hal-01198729, 09, 2015.
- [20] *J. Tauc, A. Menth.* J. Non-Cryst. Solids 8-10, 1972, 569.
- [21] *J. Tauc, in: J. Tauc (Ed.), Amorphous and Liquid Semiconductors,* Plenum Press, New York, 1974, p. 171.
- [22] *Tauc, R. Grigorovici, A. Vanauh,* Phys. Status Solidi (b), 1966. 15,627.
- [23] *L. Tichy, H. Ticha.* J. Non-Cryst. Sol., 1995, 189,141-146.
- [24] *G. Yang, B. Bureau, T. Rouxel et all.* Physical Review B 82, 195206,2010.

R.F. Sadikhli, M.E. Khaligzadeh

LOCAL STRUCTURE AND OPTICAL PROPERTIES OF Se - Sb CHALCOGENIDE GLASSY SEMICONDUCTOR SYSTEM

The local structure and optical properties of ChSS Se-Sb layers are studied by X-ray diffraction, Raman scattering and optical transmission spectra. The geometric sizes of medium-range order and the “quasi-period” of fluctuation density in the given regions, the optical width of forbidden band and also the chemical bonds and structural elements forming the amorphous matrix, are defined. The values of average coordination number, the relative quantity of chemical bonds, the cohesive energy and the average bond energy are calculated in order to determine the correlation between short-range order and medium- range order parameters and macroscopic properties. The obtained results are explained based on the principles of the chemical bond model.

Р.Ф. Садыхлы, М.Э. Халыгзаде

ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ СТЕКЛООБРАЗНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ СИСТЕМЫ Se-Sb

Измерением дифракции рентгеновских лучей, рамановской спектроскопии, спектра оптического пропускания исследованы локальная структура и оптические свойства слоев халькогенидной стеклообразной полупроводниковой системы Se-Sb. Определены геометрические размеры областей среднего порядка, “квазипериод” флуктуации плотности в указанных областях, оптическая ширина запрещенной зоны, а также химические связи и структурные элементы, образующие аморфную матрицу. С целью установления корреляции между параметрами ближнего и среднего порядков и макроскопических свойств вычислены значения среднего координационного числа, процентной доли существующих химических связей, когезионной энергии, средней энергии связи. Полученные результаты объяснены, основываясь на принципах метода химической связи.

Qəbul olunma tarixi: 24.12.2019