

**НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК АЗЕРБАЙДЖАНА
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ имени академика Г.М. АБДУЛЛАЕВА**

На правах рукописи

СЕВИНДЖ УРФАН ГЫЗЫ АТАЕВА

**СТРУКТУРА, ПЕРЕНОС ЗАРЯДА И ОПТИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА ХАЛЬКОГЕНИДНОГО СТЕКЛООБРАЗНОГО
ПОЛУПРОВОДНИКА $Se_{95}Te_5$, ЛЕГИРОВАННОГО САМАРИЕМ**

2220.01 – физика полупроводников

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени доктора
философии по физике

БАКУ– 2015

Работа выполнена в Институте Физики им. Г.М. Абдуллаева
Национальной Академии Наук Азербайджана

Научные руководители:

доктор физико-математических наук, профессор **Мехтиева С.И.**

доктор физико-математических наук **Исаев А.И.**

Официальные оппоненты:

Академик, доктор физико-математических наук, профессор **Гашымзаде Ф.М.**

доктор физико-математических наук, профессор **Мехтиев Н.М.**

Ведущая организация: Бакинский Государственный Университет
(кафедра «Физическая электроника»)

Защита диссертации состоится « 13 » 01 _____ 2016 г в
« _____ » часов на заседании Диссертационного Совета Д 01.011 при
Институте Физики Национальной Академии Наук Азербайджана по
адресу: Az-1143, г. Баку, просп. Г. Джавида, 131; Факс: (+99412) 5 37-
22-92;

E-mail: director@physics.ab.az

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института
физики имени академика Г.М. Абдуллаева НАН Азербайджана.

Автореферат разослан « _____ » _____ 2015 г.

Учёный секретарь Совета
Доктор физико-математических наук,
профессор

Араслы Д.Г.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Некристаллические вещества, к которым относятся халькогенидные стеклообразные полупроводники (ХСП), являются одними из наиболее исследуемых функциональных материалов, причем современный этап их исследований характеризуется не только поиском новых возможностей их применения, но и управления их откликом на внешние воздействия. Современные исследования ХСП фокусируются на изучении структурных превращений, применении свойств ХСП в области голографии, технологий записи, сохранения и передачи информации с сверхвысокой плотностью. На слоях ХСП, легированных серебром, методами атомно-силовой микроскопии (АСМ) уже получены наноразмерные изображения, что соответствует плотности записи информации порядка 1Тбит/см². Слои и системы ХСП-металл чувствительны в ультрафиолетовой, видимой, ближней инфракрасной (ИК) областях к синхротронному излучению, а эффект температурного изменения фазы уже используется в технологиях создания ячеек памяти. Заметим, что в сравнении с аморфным, поликристаллическое состояние ХСП существенно отличается по проводимости. Уже созданы низковольтные ячейки памяти, имеющие два состояния проводимости, переход между которыми осуществляется изменением полярности напряжения. Фоточувствительность ХСП в сочетании с нелинейными свойствами делает их перспективными для применения в устройствах интегральной оптики, элементах регенерации, волновой конверсии, усиления, сжатия импульсов и т.д.

Таким образом, актуальность исследований стеклообразного селена, соединений селена с изоэлектронным аналогом теллуром, а также модифицированных редкоземельными элементами (РЗЭ), обладающими ярко выраженным свойством переменной валентности, не подлежит сомнению, несмотря на то, что изучение этих материалов были начаты, например, в Институте Физики НАН Азербайджана еще в шестидесятых годах прошлого века. Большой вклад в эти исследования внесли сотрудники школы академика Г.М. Абдуллаева (академики М.И. Алиев, Дж.Ш. Абдинов, проф. С.И. Мехтиева и др.). Уже тогда было показано, что добавление в аморфный селен

изоэлектронных (сера, теллур) и разветвляющих (мышьяк) элементов, улучшает кристаллизационную устойчивость и электронные характеристики, что цепочечная структура с Ван-Дер-Ваальсовскими связями между цепочками дает возможность, изменяя технологические процессы, создавать элементы с заданными оптическими, электрическими и др. параметрами. Однако, необходимо учитывать тот факт, что материалы ХСП не обладают трансляционной симметрией и только наличие ближнего и среднего порядков в атомной структуре определяет их полупроводниковые свойства.

Последние годы возрос интерес к ХСП материалам, легированных РЗЭ в связи с возможностью широкого применения их в ИК-лазерах, интегральной волоконной оптике, медицине и т.д. При легировании РЗЭ как химически активный элемент, проявляя переменную валентность, может образовывать новые структурные элементы, а также состояния в запрещенной зоне ХСП, обусловленные 4f состояниями ионов РЗЭ. В этом случае ширина запрещенной зоны ХСП будет перекрывать по энергии максимально возможное число переходов, разрешенных для иона РЗЭ, что приведет к существенному изменению оптических, фотоэлектрических и электрических свойств. При этом изменения в электронных свойствах будут связаны как с появлением новых дефектных состояний, так и с изменением структуры материала в пределах ближнего и среднего порядков.

Выбор состава $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ легированного примесью самария в качестве объекта исследования обусловлен следующими результатами предварительных исследований:

- параметры области среднего порядка менялись в результате изменения химического состава и легированием данного объекта исследований;
- в спектрах комбинационного рассеяния света (КРС) данного состава обнаружены низкочастотные колебательные возбуждения, соответствующие терагерцовому диапазону. Многочисленные структурные исследования привели исследователей к единой мысли, что низкочастотные колебательные возбуждения ответственные за избыточную плотность колебательных состояний, локализованы на

неоднородностях структуры и несут информацию о структуре материала на уровне среднего порядка;

- замещение части селена изоэлектронным аналогом теллуrom приводило к частичному разрушению колец Se_8 и, соответственно, длин цепочек. При этом наблюдались сильные, по сравнению с аморфным селеном изменения оптических, фотоэлектрических и других свойств;
- хорошо известно, что в электронных структурах соединений $SmSe$ и $SmTe$ наблюдаются локализованные зоны с высокой концентрацией носителей, природа которых объясняется переменной валентностью самария. Естественно предположить наличие таких же уровней в составе $Se_{95}Te_5$ активированном самарием, что должно существенно отразиться на электрических свойствах состава.

Изучение халькогенидных стекол показало, что их электронные свойства зависят от концентрации заряженных дефектов, имеющих отрицательную корреляционную энергию, получивших объяснение в Андерсоновской модели, высказанной для аморфных полупроводников. Изменением химического состава и легированием удается добиться изменения концентрации заряженных дефектов D^+ и D^- (U-центров), а значит и изменения электронных свойств халькогенидных стекол.

Таким образом, использование в качестве добавки теллура и легирующего элемента самария должно приводить к изменению структуры и концентрации заряженных дефектов (D^+ , D^-) в аморфном селене, что позволит воздействовать на его электронные свойства.

Цель настоящей работы заключается в выяснении механизмов влияния легирования атомами самария на локальную структуру на уровне ближнего и среднего порядков, оптические и транспортные свойства аморфных пленок ХСП состава $Se_{95}Te_5$, а также в установлении энергетического спектра локальных состояний, влияющих на указанные свойства.

Для достижения поставленной цели были проделаны следующие работы:

- Синтез и получение тонких пленок чистого и легированного примесью самария ХСП состава $Se_{95}Te_5$;

- Исследование структуры тонких пленок чистого и легированного самарием состава $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ методом рентгеновской дифракции;
- Изучение морфологии поверхности тонких пленок чистого и легированного самарием состава $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ методом АСМ;
- Изучение КРС спектров чистого и легированного самарием состава $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$.
- Изучение оптических спектров тонких пленок чистого и легированного самарием состава $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ в области от 190-1100 нм;
- Изучение вольт-амперных характеристик трехслойного пакета – сэндвич: $\text{Al}-\text{Se}_{95}\text{Te}_5\langle\text{Sm}_x\rangle-\text{Te}$ ($x=0,05\div 1$ ат.%).

Научная новизна работы.

- Для аморфных пленок состава $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ в рамках пустотно-кластерной модели Эллиота определены значения квазипериода структуры R , длины корреляции L и диаметра нано-пустот D , которые уменьшаются с ростом уровня легирования, что объясняется уменьшением размеров макромолекул;
- Установлено, что изменения параметров, характеризующих амплитуды шероховатости поверхности (R_a – средняя арифметическая шероховатость, R_q – средняя квадратичная шероховатость, Rz_{max} – максимум шероховатости, Rz_{av} – наиболее часто встречающаяся высота) и размеры морфологических неоднородностей пленок состава $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ с ростом уровня легирования связаны с накоплением ионов самария вокруг D^- -центров и образованием новых структурных элементов с их участием;
- Установлено, что добавка теллура к аморфному селену приводит к изменению в атомной структуре в пределах как ближнего, так и среднего порядков, а легирование самарием приводит к изменению в пределе только среднего порядка, причем

увеличивает степень неупорядоченности. Оценены размеры среднего порядка и получены значения 13–15 Å;

- Установлено, что немонотонное изменение дисперсионных и оптических параметров (E_0 –энергия осциллятора, E_g – ширина запрещенной зоны, E_d –дисперсионная энергия, n – линейный и n_2 – нелинейный показатели преломления, k – коэффициент экстинкции) состава $Se_{95}Te_5$ в зависимости от уровня легирования самарием связаны с особенностями распределения примесных атомов, модификацией локальной структуры и изменением концентрации дефектных состояний, вызванных легированием;
- Установлено, что перенос носителей заряда (дырок) в указанной структуре осуществляется по механизму токов монополярной инжекции, ограниченных объемными зарядами при участии мелких и глубоких ловушек захвата для дырок. Примесь самария сложно влияет на механизм прохождения тока, что объясняется изменениями, происходящими в энергетическом спектре локализованных состояний, влияющих на токопрохождение.

Практическая значимость работы. Установление взаимосвязи между изменениями структуры, рельефа поверхности и электронных свойств важно для выяснения механизма влияния примесей с целью определения способов получения качественных пленок с заданными свойствами.

Аморфный селен применяется в ксерографии и различных копировальных установках. Однако со временем происходит изменение структуры аморфного селена, что сопровождается сокращением срока службы соответствующего элемента аппарата и ухудшением качества изображения. С целью предотвращения указанных недостатков в аморфный селен добавляют различные элементы (As, S, Te и т.д.). Добавка теллура в селен приводит к расширению спектральной области и повышению фоточувствительности, поэтому их применение позволит расширить

возможности копировальных аппаратов, в частности, улучшить качества изображений и охватить широкую область длин волн.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Численные значения параметров структуры (квазипериод структуры R , длина корреляции L и диаметр нано-пустот D) аморфных пленок состава $Se_{95}Te_5$ и их зависимости от уровня легирования атомами самария, объясняемые изменением размеров макромолекул.
2. Изменения параметров шероховатости поверхности тонких пленок состава $Se_{95}Te_5$ в зависимости от уровня легирования, связанные с особенностями распределения атомов самария.
3. Существование корреляции между атомной структурой и морфологией поверхности исследуемых пленок. Увеличение процентного содержания примеси самария приводит как к разупорядочению на уровне среднего порядка в атомной структуре, так и к увеличению неоднородностей на поверхности пленок.
4. Немонотонный характер влияния атомов примеси самария на оптические постоянные, объясняемый модификацией локальной структуры и изменением концентрации дефектных состояний в результате легирования.
5. Влияние примеси самария на механизм переноса электрического заряда через структуру $Al-Se_{95}Te_5-Te$.
6. Роль атомов самария в модификации локальной структуры, изменении концентрации собственных заряженных дефектов, приводящих к изменению энергетического спектра локальных состояний, контролирующими оптические свойства и перенос электрического заряда.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на научных конференциях: X Международная конференция «Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы» (Ульяновск 2008); VII Республиканская конференция «Опто-, наноэлектроника, физика конденсированного состояния и высоких энергий» (Баку 2013); IX Международная конференция «Аморфные и микрокристаллические полупроводники» (Санкт-Петербург 2014); I Международная научная

конференция молодых ученых и специалистов «Роль междисциплинарного подхода в решении актуальных проблем фундаментальной и прикладной науки» (Баку 2014).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 12 научных работ в республиканских и зарубежных журналах (4 в зарубежных и 4 в республиканских журналах, 4 докладывались на научных конференциях).

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, выводов и 206 числа использованного списка литератур, включая 30 рисунков, 5 таблиц. Общий объем работы составляет 164 компьютерных печатных страниц.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы, формулируются цель и задачи исследования, научная новизна, практическая значимость и основные положения, выносимые на защиту, и кратко изложено основное содержание диссертационной работы.

В первой главе диссертации приводятся современные представления об атомной структуре, в частности о природе ближнего и среднего порядков, особенностях строения энергетического спектра электронных состояний и оптических свойствах некристаллических полупроводников на основе селена. Рассматривается модификация структуры ХСП материалов в зависимости от химического состава и легирования, приводящая к изменениям электронных свойств.

Халькогенидными являются некристаллические полупроводники, в состав которых входят атомы халькогена (S, Se, Te) и характерной особенностью является наличие на их внешней электронной оболочке р-электронов. Два внешних р-электрона образуют ковалентные связи с двумя соседними атомами, а два других формируют неподеленную пару электронов. Из-за наличия таких неподеленных пар электронов (LP-электронов) ХСП характеризуется большой стеклообразующей способностью. Важнейшей структурной чертой стеклообразных полупроводниковых сплавов, как и стекол всех других классов, является их полимерное строение. Согласно

представлениям Мюллера и Тарасова, идеальные стекла— это ковалентно-увязанные полимеры, состоящие из статистически равномерно распределенных полиэдров с полностью насыщенными валентными связями при наличии связей, легко меняющих свое положение в пространстве, что приводит к отсутствию дальнего порядка.

Энергетический спектр электронных состояний некристаллических полупроводников подобен зонной структуре их кристаллических аналогов. Внешние, валентные электроны образуют систему насыщенных ковалентных связей между ближайшими соседними атомами. Электронные состояния, как и в кристаллах, расположены в зонах, разделенных запрещенными зонами, а состояния в запрещенной зоне являются следствием дефектов. Это сходство энергетического спектра электронных состояний некристаллических полупроводников и их кристаллических аналогов объясняется сходством параметров их ближних порядков. Однако, наличие разупорядоченности в некристаллических полупроводниках, в частности отсутствие дальнего порядка, вызывает ряд специфических особенностей в энергетическом спектре электронных состояний. Исходя из теории Андерсона о локализации электронов, Мотт предположил, что флуктуации потенциала, вызванные разными плотностями состояний в связи с беспорядком структуры, приводят к образованию хвостов, в которых состояния локализованы в пространстве. Согласно Моозеру и Пирсону, в халькогенидах верх валентной зоны сформирован из состояний неподеленных электронных пар, а валентная зона и зона проводимости из связывающих и антисвязывающих состояний валентных электронов. Возникновение плотности локализованных состояний вблизи потолка валентной зоны в некристаллических полупроводниках, Овшинский связывает с нарушением периодической повторяемости ориентации орбиталей LP-электронов, вследствие потери дальнего порядка. Существует несколько моделей зонной структуры некристаллических полупроводников и все они основаны на представлении о локализации состояний в хвостах.

В настоящее время считается установленным, что преобладающим типом собственных дефектов в ХСП являются собственные заряженные дефекты (U^- -центры) с отрицательной корреляционной энергией. В основном состоянии U^- -центры, согласно

законам электронейтральности, существуют в виде заряженных точечных дефектов D^+ и D^- . Благодаря этому, изменением химического состава, а также легированием можно изменять концентрацию заряженных дефектов (U^- -центров), а значит, и изменять электронные свойства халькогенидных стекол. Следовательно, можно найти пути эффективного управления электрическими, оптическими и фотоэлектрическими свойствами, что важно для практического применения.

Во второй главе описываются методы получения тонкопленочных образцов из синтезируемых материалов чистого состава $Se_{95}Te_5$ и легированного самарием по стандартной методике. Синтезируемые компоненты были помещены в кварцевые ампулы внутренним диаметром 10–15 мм, которые закупоривались при остаточном давлении 0,133 Па. Ампула помещалась в печь качающегося типа, обеспечивающая интенсивное перемешивание компонентов в процессе синтеза. После этого ампула охлаждалась на воздухе до комнатной температуры. Тонкопленочные образцы получены в вакуумном устройстве АВП–0.5 методом термического напыления на стеклянные подложки комнатной температуры. Для электрических измерений напыление контактов из алюминия и теллура на образцы с толщиной 3 мкм были проведены в вакуумной установке ВУП–2. Напыление контактов и вещества производилось на разных вакуумных установках для предотвращения возможного загрязнения исследуемого материала.

Во второй главе также описываются методы исследования структуры и морфологии поверхности исследуемых образцов, включающие в себя дифракцию рентгеновских лучей, комбинационное рассеяние света и атомно-силовую микроскопию. Рентгеноструктурные исследования полученных плёнок проводились на рентгеновском дифрактометре Bruker D8 Advance. С помощью рентгеновского дифрактометра Bruker D8 Advance производится автоматический режим сбора данных и дальнейшая обработка результатов с помощью пакета программных средств DIFFRAC. Исследования рельефа поверхности плёнок были проведены на атомно-силовом микроскопе марки AIST–NT (Tokyo Instr., Japan). Исследования спектров КРС напыленных пленок проводились в 3D конфокальном лазерном микроспектрометре Nanofinder 30 (Tokyo Instr., Japan).

Спектры оптического пропускания полученных пленок исследованы методом однолучевой спектроскопии в спектральном интервале $\lambda=190\div 1100$ нм. Измерения проводились на однолучевом кюветном УФ-спектрофотометре Spekol-1500.

Вольт-амперные характеристики исследуемых пленок были получены измерениями стационарных значений силы тока при заданных значениях напряжения.

В третьей главе изложены результаты исследований структуры методом рентгеновской дифракции и КРС спектров тонких пленок чистого и легированного самарием состава $Se_{95}Te_5$. Также приведены результаты АСМ- исследования морфологии поверхности тонких пленок чистого и легированного самарием состава $Se_{95}Te_5$.

Известно, что в ХСП материалах немаловажную роль в управлении электронными свойствами играют области среднего порядка атомной структуры. Изменяя параметры этих областей можно направленно управлять их электронными свойствами. Многочисленные исследования показали, что параметры областей среднего порядка удается изменить в результате изменения химического состава и легирования атомами редкоземельных элементов.

Для пленок как чистого состава $Se_{95}Te_5$, так и легированных самарием, в спектрах дифракции рентгеновских лучей наблюдается первый резкий дифракционный максимум (FSDP). Как правило, связывают FSDP с существованием упорядочения в пределах среднего порядка. Влияние примеси самария на поведение FSDP объясняется в рамках пустотно-кластерной модели Эллиота. Возникновение FSDP в спектре некристаллических материалов связывают с различием в атомной плотности между коррелированно упакованными кластерами и пустотами. Предполагается, что атомы самария в малых концентрациях, в основном, заполняют существующие пустоты, и как активный элемент образует химические связи со всеми элементами, входящими в аморфную матрицу, что приводит к снижению контрастности по атомной или электронной плотности и, следовательно, подавлению FSDP. А часть атомов самария в аморфной матрице проявляется в виде положительных ионов и накапливается вокруг D-центров. Таким образом, в результате легирования, особенно в больших концентрациях, увеличивается степень неупорядоченности, что также способствует

уменьшению FSDP. Такое поведение действительно наблюдается в данном исследовании для ХСП системы $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ при легировании атомами РЗЭ самария. Определены FSDP параметры (квазипериод структуры R , длина корреляции L и диаметр пустот D), свидетельствующие об уменьшении размеров областей среднего порядка с легированием, что указывает на увеличение разупорядочения в структуре этих пленок по сравнению со структурой нелегированной пленки. Такое изменение структуры можно заметить и на АСМ изображениях поверхности (рис. 1.) и по значениям параметров, характеризующих морфологию поверхности. С легированием ХСП системы $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ значения параметров, характеризующих амплитуды шероховатости поверхности пленок (R_a – средняя арифметическая шероховатость, R_q – средняя квадратичная шероховатость, Rz_{\max} – максимум шероховатости) резко увеличиваются.

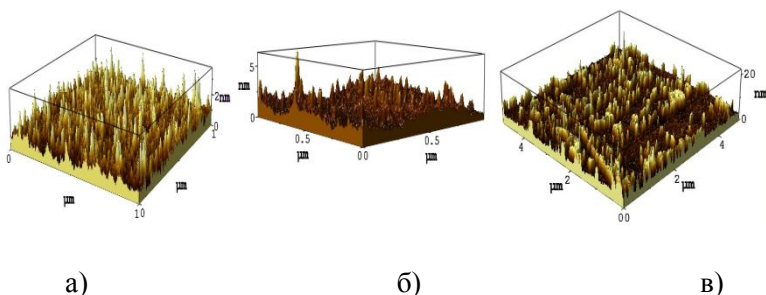


Рис. 1. Трехмерные 3D АСМ изображения рельефа поверхности пленок $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ (а); $\text{Se}_{95}\text{Te}_5\text{Sm}_{0.25}$ (б); $\text{Se}_{95}\text{Te}_5\text{Sm}_1$ (в).

В спектре КРС аморфного селена (рис. 2) наблюдается хорошо выраженный широкий пик с максимумом $40,5 \text{ см}^{-1}$ и относительно узкий пик с максимумом 254 см^{-1} , который приписывается колебательной моде ковалентной связи $\text{Se}-\text{Se}$ с длиной $2,35 \text{ \AA}$. При частичной замене атомов селена атомами теллура ($\text{Se}_{95}\text{Te}_5$), интенсивность указанного пика уменьшается и появляется полоса с максимумом $211,7 \text{ см}^{-1}$. Уменьшение интенсивности пика 254 см^{-1} в спектре КРС рассматривается как разрыв ковалентных связей $\text{Se}-\text{Se}$, а появление полосы с максимумом $211,7 \text{ см}^{-1}$ соответствует колебаниям

связи Se–Te. По-видимому, добавка теллура к аморфному селену приводит к частичному разрушению кольцевых молекул и укорачиванию полимерных цепей. В результате этого, число связей Se–Se уменьшается, и образуются связи Se–Te, сопровождающиеся появлением полосы при $211,7 \text{ см}^{-1}$. Легирование самарием изменяет форму и интенсивность пиков в спектре КРС, по-видимому, это связано с химической активностью атомов самария, образующих связи, как с селеном, так и с теллуrom (Sm–Se , Sm–Te , Se–Sm–Te , а также пирамидальные структурные элементы с участием атомов самария $\text{SmSe}_x\text{Te}_{3-x}$).

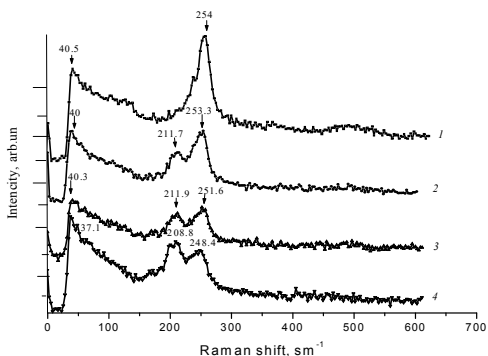


Рис. 2. Спектры КРС пленок аморфного селена Se (кривая 1), составов $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ (кривая 2), $\text{Se}_{95}\text{Te}_5\langle\text{Sm}\rangle_{0.05}$ (кривая 3) и $\text{Se}_{95}\text{Te}_5\langle\text{Sm}\rangle_1$ (кривая 4) при мощности лазерного излучения 4 мВт.

Проследивая за изменениями отношения интенсивностей, соответствующих максимумам бозонного пика и пика, обусловленного колебанием ковалентной связи Se–Se, а так же полуширины бозонного пика различных образцов, принимающихся как характеристики среднего и ближнего порядков, соответственно, можно заключить, что добавка теллура приводит к изменению в атомной структуре в пределах как ближнего, так и среднего порядков, а легирование самарием приводит к изменению в пределе только среднего порядка, причем увеличивает степень неупорядоченности.

Исследование изменения структуры и морфологии поверхности пленок ХСП материала $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ при введении модифицирующей примеси самария, позволило установить

корреляцию между атомной структурой и морфологией поверхности. Как видно, с увеличением процентного содержания примеси наблюдается рост разупорядочения в атомной структуре, приводящий к росту неоднородностей на поверхности исследуемых пленок.

В четвертой главе рассматривается влияние изменения локальной структуры системы $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$, с легированием самарием, на оптические свойства ХСП состава $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$, в частности, на оптическую ширину запрещенной зоны, линейные и нелинейные показатели преломления, коэффициент экстинкции, а также, на дисперсионные параметры, которые тесно связаны с атомной, электронной структурой материала и с энергетическим спектром электронных состояний. В том числе, рассмотрены изменения параметров локальных уровней (концентрация и энергетическое положение), контролирующие перенос электрического заряда.

Применением метода Сванпоела и одноосцилляторной модели из экспериментальных спектров пропускания состава $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$, легированного самарием, определены энергия осциллятора E_0 , дисперсионная энергия E_d , оптическая ширина запрещенной зоны E_g , а также линейный n и нелинейный n_2 показатели преломления и коэффициент экстинкции. В результате исследования влияния примеси самария на оптические константы можно заключить, что значения вышеуказанных линейных и нелинейных показателей преломления, а также дисперсионных параметров немонотонно зависят от концентрации примесных атомов: с увеличением концентрации примесей (до 0,25 ат.%) E_0 , E_g и E_d растут, а n , n_2 и k уменьшаются. При дальнейшем увеличении концентрации примесей наоборот значения E_0 , E_g и E_d уменьшаются, а n , n_2 и k растут. Такие изменения в оптических параметрах объяснены особенностями распределения примесных атомов в аморфной матрице, приводящих к модификации локальной структуры и изменению концентрации дефектных состояний.

Было установлено, что прохождение тока через структуры $\text{Al}-\text{Se}_{95}\text{Te}_5\langle\text{Sm}_x\rangle-\text{Te}$ ($x=0,05\div 1$ ат.%) осуществляется по механизму монополярной инжекции, при участии ловушек для дырок. Показано, что легирование самарием сильно влияет на механизм токопрохождения в исследованной структуре, что объясняется изменением, происходящем в энергетическом спектре локальных состояний. В чистом $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ перенос электрического заряда

контролируется моно-энергетическими уровнями, расположенными выше уровня Ферми. В $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$, содержащем малые концентрации примеси самария (до 0,1 ат.%), механизм токопрохождения контролируется двумя группами локальных уровней, расположенных по обе стороны уровня Ферми. В $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$, легированном высокими концентрациями самария (0,5; 1 ат.%), в управлении токопрохождения также участвуют две группы локальных уровней, расположенных ниже уровня Ферми (обе уровни мелкие). Предполагается, что локальные уровни связаны с оборванными связями: глубокие – с атомами теллура (D^- -центр), а мелкие – с атомами селена.

Использованием существующих теорий инжекционных токов определены параметры локальных уровней (концентрация и энергетическое положение), значения которых приведены в таблице. Полученные результаты связывались с особенностями распределения атомов самария и их химической активностью.

Таблица.

Численные значения параметров, характеризующих перенос электрического заряда в чистом и легированном самарием ХСП составе $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$.

	$\text{Se}_{95}\text{Te}_5$	$\text{Se}_{95}\text{Te}_{5+}$ <Sm> _{0.05}	$\text{Se}_{95}\text{Te}_{5+}$ <Sm> _{0.1}	$\text{Se}_{95}\text{Te}_{5+}$ <Sm> _{0.5}	$\text{Se}_{95}\text{Te}_{5+}$ <Sm> ₁
ρ , Ом*см	$2.67 \cdot 10^{12}$	$7.1 \cdot 10^{12}$	$1.98 \cdot 10^{12}$	$1.3 \cdot 10^{12}$	$9.1 \cdot 10^{12}$
p_0 , см ⁻³	$4.68 \cdot 10^9$	$1.7 \cdot 10^9$	$6.3 \cdot 10^9$	$9.6 \cdot 10^9$	$1.38 \cdot 10^9$
F_0-E_v , эВ	0.62	0.64	0.61	0.6	0.65
p_{102} , см ⁻³	$9.2 \cdot 10^{14}$	$2.1 \cdot 10^{14}$	$2.5 \cdot 10^{15}$	$1.8 \cdot 10^{14}$	$6.1 \cdot 10^{14}$
$E_{12}-F_0$, эВ	0.16	0.2	0.14	–	–
p_1 , см ⁻³	–	$1.8 \cdot 10^{15}$	$6 \cdot 10^{15}$	–	$2.15 \cdot 10^{15}$
$E_{11}-E_v$, эВ	–	0.55	0.51	–	0.51
$E_{12}-E_v$, эВ	0.78	0.84	0.75	0.58	0.57

Здесь, ρ – удельное сопротивление пленок, p_0 – концентрация равновесных свободных дырок, F_0-E_v – энергетическое положение уровня Ферми, p_{102} – концентрация незанятых дырками ловушек с энергией E_{12} , $E_{12}-E_v$ – энергетическое положение ловушек с энергией E_{12} , p_1 – концентрация незанятых дырками ловушек с энергией E_{11} ,

E_{11} - E_v – энергетическое положение ловушек с энергией E_{11} , E_{12} - F_0 – энергетическое расстояние между уровнем Ферми и ловушками с энергией E_{12} .

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Влияние самария на распределение интенсивности дифракции рентгеновских лучей аморфных пленок $Se_{95}Te_5$, и на численные значения параметров локальной структуры (уменьшение квазипериода структуры R , длины корреляции L и диаметра нано-пустот D) объяснено в рамках пустотно-кластерной модели Эллиота и модели заряженных дефектов. Считается, что часть атомов самария наполняют существующие пустоты, а часть из них участвуя в виде положительно заряженных центров накапливается вокруг D^- -центров, приводя к снижению контрастности по атомной плотности и подавлению FSDP.

2. Показано, что с ростом содержания самария увеличиваются значения параметров, характеризующих амплитуды шероховатости поверхности пленок состава $Se_{95}Te_5$, что связывается с образованием новых структурных элементов с участием атомов самария и накоплением ионов самария вокруг D^- -центров. Рост разупорядочения в атомной структуре приводит к росту неоднородностей на поверхности исследуемых пленок.

3. Легирование самарием изменяет форму и интенсивность пиков в спектре КРС, что связывается с химической активностью атомов самария, образующих связи, как с селеном, так и теллуром ($Sm-Se$, $Sm-Te$, $Se-Sm-Te$, а также пирамидальные структурные элементы с участием атомов самария $SmSe_xTe_{3-x}$). Добавка теллура приводит к изменению в атомной структуре в пределах как ближнего, так и среднего порядков, а легирование самарием приводит к изменению в пределах только среднего порядка, увеличивая степень неупорядоченности.

4. Применением метода Сванпоела и одноосцилляторной модели из спектров пропускания состава $Se_{95}Te_5$, легированного самарием, определены энергия осциллятора E_0 , дисперсионная энергия E_d ,

оптическая ширина запрещенной зоны E_g , а также линейный n и нелинейный n_2 показатели преломления и коэффициент экстинкции k . Немонотонное изменение оптических параметров в зависимости от уровня легирования объяснены особенностями распределения примесных атомов в образцах, модификацией локальной структуры и изменением концентрации дефектных состояний, вызванных легированием.

5. Установлено, что прохождение тока через структуры $Al-Se_{95}Te_5<Sm_x>-Te$ ($x=0,05\div 1$ ат.%) осуществляется по механизму монополярной инжекции, при участии двух групп ловушек для дырок в запрещенной зоне энергетического спектра, расположенных выше и ниже уровня Ферми. Определены численные значения параметров локальных уровней.

6. Самарий как химически активный элемент, образует новые структурные элементы с атомами селена и теллура, приводящие к модификации локальной структуры, а также выступая как положительный ион изменяет концентрацию собственных заряженных дефектов (U -центров), т.е. изменяет параметры локализованных состояний в энергетическом спектре, влияя на механизм переноса заряда и оптические постоянные.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. А.И. Исаев, С.И. Мехтиева, Н.З. Джалилов, Р.И. Алекперов, С.Н. Гарибова, С.У. Мамедова. Оптические свойства халькогенидных стеклообразных полупроводников системы $Se-As$ и $Se-Te$ с примесями самария и европия// АМЕА Хəбərləр, 2008, с. XXVIII, N 5, s. 63-71.
2. А.И. Исаев, С.И. Мехтиева, Н.З. Джалилов, С.Н. Гарибова, С.У. Мамедова. Коэффициент оптического поглощения ХСП систем $Se-As$ и $Se-Te$ с примесями Sm и Eu / Труды X Международной Конференции, «Опто-, Нанoeлектроника, Нанотехнологии и Микросистемы», Ульяновск, 2008, с. 68.
3. С.У. Атаева, А.И. Исаев, С.И. Мехтиева. Влияние легирования самарием на структуру халькогенидного стеклообразного

полупроводника $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ / Fizikanın Müasir Problemləri VII Respublika Konfransı Materiallar, «Opto, nanoelektronika, kondensə olunmuş mühit və yüksək enerjilər fizikası», Bakı, 2013, s. 74-78.

4. С.И. Мехтиева, А.И. Исаев, С.У. Атаева, В.З. Зейналов. Особенности локальной структуры халькогенидного стеклообразного полупроводника $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$, легированного самарием // ФТП, 2014, т. 48, в. 9, с. 1182-1185.
5. С.У. Атаева, А.И. Исаев, С.И. Мехтиева, С.Н. Гарибова. Комбинационное рассеяние света в халькогенидном стеклообразном полупроводнике $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$, легированном самарием // АМЕА Хəбərləг, 2014, с. XXXIV, № 2, s. 67-73.
6. С.У. Атаева, А.И. Исаев, С.И. Мехтиева, С.Н. Гарибова. Влияние примеси редкоземельного элемента Sm на оптические свойства халькогенидного стеклообразного полупроводника $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ / Труды IX Международной конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники», Санкт-Петербург, 2014, с. 228-229.
7. С.У. Атаева, С.И. Мехтиева, А.И. Исаев. Определение оптических параметров и параметров дисперсии халькогенидного стеклообразного полупроводника $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$, легированного самарием / 1 st International Scientific Conference of young scientists and specialists «The Role of Multidisciplinary Approach in Solution of Actual Problems of Fundamental and Applied Sciences (Earth, Technical and Chemical)», Baku, 2014, p. 173-175.
8. A.I. Isayev, S.U. Atayeva, S.I. Mehdiyeva, V.Z. Zeynalov. Optical properties of chalcogenide glassy Semiconductor $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ doped by Samarium // Fizika, 2014, v. XX, № 3, sec.: En, p. 25-29.
9. С.У. Атаева, С.И. Мехтиева, А.И. Исаев. Дисперсия показателя преломления халькогенидного стеклообразного полупроводника $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$, легированного самарием // ФТП, 2015, т. 49, в. 7, с. 971-974.

10. С.У. Атаева, А.И. Исаев, С.И. Мехтиева. Низкочастотное комбинационное рассеяние света в халькогенидном стеклообразном полупроводнике $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$, легированном самарием // Физика и химия стекла, 2015, т. 41, №3, с. 366-369.
11. S.U. Atayeva, S.I. Mehdiyeva, A.I. Isayev, V.Z. Zeynalov, Q.M. Demirov. The influence of samarium impurity on mechanism of current passing through Al– $\text{Se}_{95}\text{Te}_5\langle\text{Sm}\rangle$ –Te structures // Fizika, 2015, v. XXI, № 1, sec.: En, p. 23-26.
12. S.U. Atayeva, S.I. Mehdiyeva, A.I. Isayev, S.N. Qaribova and P.B. Asilbeyli. Transfer of electric charge through Al– $\text{Se}_{95}\text{Te}_5\langle\text{Sm}\rangle$ –Te structure. // Journal of Advances in Physics (JAP), 2015, v. 10, № 1, p. 2605-2609.

SEVİNC URFAN qızı ATAYEVA

**SAMARIUMLA LEGİRƏLƏNMİŞ $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ XALKOGENİD
ŞÜŞƏVARI YARIMKEÇİRİCİSİNİN QURULUŞU, OPTİK VƏ YÜK
DAŞINMA XASSƏLƏRİ**

XÜLASƏ

Dissertasiya işi şüşəvari xalkogenid $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ yarımkeçiricisinin yaxın və orta nizam tərtibli lokal quruluşuna, optik və yük daşınma xassələrinə nadir torpaq elementi atomları ilə legirələnmənin təsir mexanizminin aydınlaşdırılmasına və həmin xassələri idarə edən lokal halların enerji spektrinin təyininə həsr olunmuşdur.

Bu məqsədlə samariumla legirələnməmiş $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ sistemi sintez edilmiş, alınan maddələrin termik buxarlandırma üsulu ilə amorf təbəqələri hazırlanmış və onların quruluşu, optik və yük daşınma xassələri tədqiq edilmişdir.

Samariumla legirələnmədən sonra $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ sisteminin rentgen difraksiya və raman səpilməsi üsulları ilə lokal quruluşunun və atom qüvvə mikroskopu üsulu ilə səthin morfologiyasının tədqiqi nəticəsində atom quruluşu və səth morfologiyası arasında korrelyasiyanın mövcudluğu aşkar edilmişdir. Legirələnmə faizinin artması ilə tədqiq olunan təbəqələrin strukturunda nizamsızlığın və səthin qeyri-bircinsliliyinin artması müşahidə edilmişdir.

Sm ilə legirələnməmiş $\text{Se}_{95}\text{Te}_5$ xalkogenid şüşəvari yarımkeçiricisində optik buraxma spektrinin tədqiqi əsasında, qadağan olunmuş zonanın optik eni, ossilyator enerjisi, dispersiya enerjisi, xətti və qeyri-xətti sındırma əmsalları, həmçinin ekstinksiya əmsalı təyin edilmişdir. Samariumla legirələnmənin optik və dispersiya parametrlərinə təsirinin monoton olmayan xarakteri samarium atomlarının paylanma xüsusiyyəti, kimyəvi əlaqələrin və koordinasiya ədədinin dəyişməsi ilə əlaqələndirilmişdir.

Müəyyən edilmişdir ki, Al-Se₉₅Te₅<Sm>-Te strukturundan elektrik yükünün daşınması monopolyar-injeksiya mexanizminə uyğun olaraq dəşiklər üçün tələlərin iştiraki ilə baş verir. Elektrik yüklərinin daşınmasını tənzimləyən lokal səviyyələrin parametrləri (konsentrasiya və enerji halı) injeksiya cərəyanlarının mövcud nəzəriyyəsi əsasında hesablanmışdır.

SEVİNÇ URFAN qızı ATAYEVA

**STRUCTURE, OPTICAL PROPERTIES AND CHARGE
TRANSFER OF CHALCOGENIDE GLASS-LIKE
SEMICONDUCTORS Se₉₅Te₅, DOPED BY SAMARIUM**

SUMMARY

The scientific work is devoted to clarification for mechanism of influence of doping by rare-earth atoms on local structure at near and average orders level, on optical properties and charge transfer of amorphous films of Se₉₅Te₅ HGS structure, and also the energy spectrum of the local states controlling the specified properties.

For achievement of a goal the synthesis of Se₉₅Te₅ HGS structure have been carried out by thermal evaporation method in vacuum, amorphous films of synthesized materials are received and investigation of samarium influence on structure, optical properties and charge transfer mechanism of the received samples have been carried out.

The study of the local structure and morphology of Se₉₅Te₅ HGS material films surface with samarium impurity by the X-ray diffraction, Raman scattering of light and atom-force microscope methods allowed to establish the correlation between atom structure and morphology of the surface. As shown, increase the percentage of impurity leads to growth of non-regularity in atomic structure, leading to growth of non-uniformities on a surface of the investigated films.

By investigation of optical transmission spectrum of Se₉₅Te₅ HGS doped by samarium the optical width of band gap, energy of oscillator, dispersive energy, linear and non-linear refraction indices, and also extinction coefficient have been determined. Influence of samarium impurity on optical and dispersive parameters has nonmonotonic character

that it is possible to connect with feature of impurity atoms distribution, change of chemical bonds and coordination number.

It was established that passing of current through Al–Se₉₅Te₅<Sm>–Te structures are carried out on the mechanism of monopolar injection with the holes traps participation. The parameters of local levels (concentration and energy state) have been determined by use of injection currents theories.

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASI
akademik H.M. ABDULLAYEV adına FİZİKA İNSTİTUTU

Əlyazma hüququnda

SEVİNÇ URFAN QIZI ATAYEVA

**SAMARIUMLA LEGİRƏLƏNMİŞ SE₉₅TE₅ XALKOGENİD
ŞÜŞƏVARI YARIMKEÇİRİCİSİNİN QURULUŞU, OPTİK VƏ YÜK
DAŞINMA XASSƏLƏRİ**

2220.01- yarımkeçiricilər fizikası

Fizika üzrə fəlsəfə doktoru elmi dərəcəsi almaq üçün
təqdim edilmiş dissertasiyanın

A V T O R E F E R A T I

BAKI - 2015