

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI

Əlyazması hüququnda

Bi₂Te₃, Bi₂Se₃, Sb₂Te₃ BİRLƏŞMƏLƏRİNDƏ STRUKTUR VƏ RADİASİYA DEFEKTLƏRİ, ONLARIN TERMODİNAMİK XASSƏLƏRƏ TƏSİRİ

İxtissas: **2220.01 – Yarımqeçiricilər fizikası**

Elmi sahəsi: **Fizika**

İddiaçı: **Sevinc Ramazan qızı Əzimova**

Fizika üzrə fəlsəfə doktoru elmi dərəcəsi almaq üçün
təqdim edilmiş dissertasiyanın

AVTOREFERATI

Bakı-2022

Dissertasiya işi Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutu "Akustooptika" laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir.

Elmi rəhbərlər: Fizika elmləri doktoru, dosent
Nadir Məmməd oğlu Abdullayev

Fizika üzrə fəlsəfə doktoru, dosent
Yusif İmrayıl oğlu Ahiyev

Rəsmi opponentlər: Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Eldar Mehralı oğlu Qocayev

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Qüdrət İsaq oğlu İsaqov

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Yusif Quşu oğlu Nurullayev

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Ali Attestasiya Komissiyasının AMEA Fizika İnstitutu nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya Şurası

Dissertasiya şurasının sədri:

AMEA-nın həqiqi üzvü,
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Nazim Timur oğlu Məmmədov

Dissertasiya şurasının elmi katibi:

Fizika elmləri doktoru, dosent
Rəfiqə Zabil qızı Mehdiyeva

Elmi seminarın sədri:

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, dosent
Tələt Rzaqulu oğlu Mehdiyev

İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI

Mövzunun aktualığı və işlənmə dərəcəsi. Təqdim edilən dissertasiya işi maraqlı fiziki xassələrin müşahidə edildiyi yarımkeçirici birləşmələrin sintez edilməsinə, alınmış tədqiqat nümunələrinin termodinamik xassələrinin tədqiqinə və bu xassələrə ağır ion şüalarının təsirinə həsr edilmişdir. Yarımkeçirici xassələrə malik olan Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 və Sb_2Te_3 binar birləşmələri müasir elektronikada geniş tətbiq edilən funksional materiallardır. Eyni zamanda bismut tellurid əsaslı materialların laylarında dənəciklər arasında nanometrik ölçülər əldə etməklə istilikkeçirmə və elektrikkeçirmənin qismən dəyişdirilməsi yüksək effektivli ekoloji termoelektrik soyuducuların hazırlanması texnologiyasında olduqca aktualdır.

Məlumdur ki, xarici təsirlər altında (elektrik sahəsi, maqnit sahəsi, təzyiq, temperatur və s.) yarımkeçiricilərin fiziki xassələrində müxtəlif dəyişikliklər müşahidə edilir. Ona görə də xarici təsirlər altında müxtəlif fiziki xassələrin tədqiq edilməsi, bu materialların tətbiq edilmə imkanlarını müəyyən edir.

$\text{A}_2^{\text{V}}\text{B}_3^{\text{VI}}$ binar birləşmələrinin əsasında alınmış çeviricilərin kosmik texnologiyalarda, nüvə reaktorlarında, sürətləndiricilərdə tətbiq edilməsi üçün bu birləşmələrin radiasiyanın təsiri altında tədqiq edilməsi vacibdir. Son dövrlərdə müxtəlif xassələrə malik funksional materiallara yüksək enerjili ağır ionların təsirinin öyrənilməsi yalnız yarımkeçiricilər fizikasında deyil, ümumilikdə materialşünaslıqda əsas tədqiqat istiqamətlərindən hesab edilir. Müəyyən edilmişdir ki, ağır ionlarla implantasiya edilmiş birləşmələrin yalnız səth xassələrində deyil, həm də nüfuz etmə dərinliyindən asılı olaraq digər fiziki xassələrində də əsaslı dəyişikliklər baş verir. Ona görə də ağır ionlarla şüalandırılmış nümunələrin fiziki xassələrinin şüalanmanın dozəsindən asılı olaraq dəyişməsinin öyrənilməsi, bu birləşmələr üçün yeni tətbiq imkanları yaradır.

Ağır ionlarla yarımkeçirici materialların müxtəlif xassələrinin tədqiqatları arasında 167 MeV-lik Xe^{+26} ionlaşdırıcı şüaların təsiri xüsusi yer tutur. Yüksək enerjili bu ionlar nümunələrdə qalınlıq boyu

qeyri bircins radiasiya defektlərinin formalaşmasına səbəb olur. Bu defektlər yalnız quruluş xassələrinə deyil, həm də birləşmələrin termodinamik xassələrinə təsir edir. Təqdim edilən dissertasiya işində Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 və Sb_2Te_3 yarımkeçirici binar birləşmələrin və müşahidə edilmiş termik keçidlərə 167 MeV-lik Xe^{+26} ionlaşdırıcı şüaların təsiri tədqiq edilmişdir. Şüalanmanın təsiri ilə termodinamik parametrlərin dəyişmə mexanizmi müəyyənləşdirilmişdir. A_2B_3 binar birləşmələrində quruluş defektlərinin daha ətraflı öyrənmək məqsədi ilə $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ birləşməsi Ni atomları ilə interkalyasiya edilmiş, materialın kristal və səth quruluşu tədqiq edilmişdir.

Tədqiqatın obyektı və predmeti:

Tədqiqatın obyektı Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 , $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ və Sb_2Te_3 birləşmələri, predmeti isə bu birləşmələrdə defektlərin termodinamik xassələrə və Ni ionlarının $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ birləşmələrinin elektrofiziki xassələrinə təsirinin tədqiqidir.

Tədqiqatın məqsədi və vəzifələri:

Dissertasiya işinin məqsədi $\text{A}_2\text{V}\text{B}_3\text{VI}$ qrup Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 , Sb_2Te_3 birləşmələrində defektlərin termodinamik və $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ birləşmələrində Ni ionlarının elektrofiziki xassələrinə təsirinin müəyyənləşdirilməsidir.

Dissertasiya işində qarşıya qoyulmuş məqsədə uyğun olaraq, aşağıdakı məsələlər həll edilmişdir:

- Maddənin tərkibindən asılı olaraq ağır ionla şüalandırıldıqdan sonra onların termodinamik parametrlərinin dəyişməsi qanuna uyğunluğunun araşdırılması;
- Geniş temperaturlar oblastında Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 binar yarımkeçirici birləşmələrinin termodinamik xassələrinin tədqiq edilməsi, termodinamik parametrlərinin araşdırılması;
- Bi_2Se_3 birləşməsinin termodinamik xassələrinə ağır ionların təsirinin öyrənilməsi, müxtəlif dozalarda 167 MeV-lik Xe^{+26} ionları ilə şüalandırılmış bismut selenin termodinamik xassələrinin və termodinamik parametrlərinin dəyişməsinin müəyyən edilməsi;
- Diferensial termik analiz metodu ilə Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 birləşmələrinin termodinamik xassələrinin tədqiq edilməsi, ərimə

temperaturunda baş verən proseslərin sərbəst enerjisinin və entalpiyanın hesablanması;

- Xe^{+26} ionları ilə implantasiya zamanı bismut tellurda sərbəst enerjinin və entalpiyanın təyin edilməsi, ağır ionların təsiri ilə bu birləşmədə termodinamik parametrlərin dəyişmə mexanizminin müəyyənləşdirilməsi;
- Sb_2Te_3 birləşməsinin termodinamik xassələrinin tədqiq edilməsi, bu termodinamik parametrlərə Xe^{+26} ionlarının təsirinin öyrənilməsi, ərimə temperaturunda baş verən proseslərin termodinamik parametrlərinin hesablanması;
- $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$ birləşməsinin Ni atomları ilə interkalyasiyası, müstəvi kristal quruluşda və kristalın laylarında, Van-der-Vaals səthində Ni ionlarının təsiri ilə formalaşan birləşmələrin tədqiqi.

Tədqiqat metodları:

Tədqiqat obyektləri standart metodla vakuum şəraitində sintez edilmişdir. Alınmış birləşmələrin quruluş faza analizləri və qəfəs parametrlərinin təyin edilməsi otaq temperaturunda və normal şəraitdə rentgen difraksiyası metodu ilə D8 Advance (Bruker) rentgen difraktometrində aparılmışdır. Birləşmələrin atom dinamikası otaq temperaturunda və normal şəraitdə Raman spektroskopiyası metodu ilə Nanofinder 30 Raman spektrometrində tədqiq edilmişdir. Alınmış Raman spektrləri Origin proqramının son versiyasında Gauss funksiyası ilə analiz edilmişdir. Şüalanmadan öncə və müxtəlif flüenslərdə ağır ionlarla şüalandırılmış tədqiqat obyektlərinin termodinamik parametrləri Diferensial Termik Analiz metodu ilə “Perkin Elmer” STA 6000 cihazında yerinə yetirilmişdir.

Ağır ionların Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3 birləşmələrinə düffuziya dərinliyini tədqiq etmək üçün SRIM analiz metodundan istifadə edilmişdir. Ağır ionlarla şüalandırılma təcrübələri Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutunun (Dubna, Rusiya) Filyorov adına Nüvə Reaksiyaları Laboratoriyasında IC-100 siklotronunda vakuum şəraitində yerinə yetirilmişdir.

Birləşmələrin səthində və laylararasıda dəyişikliklərin tədqiqi üçün Atom Qüvvə Mikroskopu və Skanedicci Elektron Mikroskopu analiz metodlarından istifadə edilmişdir.

Müdafiyyə çıxarılan əsas müddəalar:

1. 167 MeV-lik ağır Xe^{+26} ionlaşma nəticəsində $30^\circ\text{C} \leq T \leq 800^\circ\text{C}$ temperaturalar intervalında Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 kristalları üçün termodinamik xassələrin dəyişməsinin müşahidə olunması;

2. 167 MeV-lik ağır Xe^{+26} ionları ilə $3.83 \times 10^{14} \text{ sm}^{-2}$ flüensədək şüalandırılma zamanı Bi_2Se_3 -də əriməyə sərf olunan istilik enerjisinin, aktivləşmə enerjisinin müəyyənləşdirilməsi;

3. Bi_2Te_3 birləşməsində $85^\circ\text{C} \leq T \leq 556^\circ\text{C}$ temperaturalar intervalında Vigner entalpiyasının qiyməti, termodinamik parametrləri: sərbəst enerjisi və aktivləşmə enerjisinin müəyyən olunması;

4. 167 MeV-lik Xe^{+26} ionları ilə $3.83 \times 10^{14} \text{ sm}^{-2}$ flüensədək şüalandırılma zamanı bismut tellurda yaranmış defektlər səbəbindən ərimə temperaturu, əriməyə sərf olunan istilik enerjisi, aktivləşmə enerjisinin müəyyən olunması;

5. 167 MeV-lik Xe^{+26} ionların bismut selen birləşməsinə nüfuz etmə dərinliyinin hesablanması. Nüfuz etmə dərinliyinin ağır ionların enerjisindən asılılığının müəyyən edilməsi;

6. 167 MeV-lik Xe^{+26} ionları ilə $3.83 \times 10^{14} \text{ sm}^{-2}$ flüensədək şüalandırılma zamanı Sb_2Te_3 birləşməsində ərimə temperaturu, əriməyə sərf olunan istilik enerjisi və aktivləşmə enerjisinin müəyyən edilməsi;

7. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ birləşməsinin Ni ionları ilə interkalyasiyası zamanı Van- der -Vaals səthində eynicinsli fazaların və nanoquruluşların formalaşmasının tədqiq edilməsi.

Tədqiqatın elmi yeniliyi:

- Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 kristallarının 167 MeV-lik ağır Xe^{+26} ionları ilə şüalandırılması zamanı defektlər yaranır. $500^\circ\text{C} \leq T \leq 720^\circ\text{C}$ temperaturalar intervalında ərimə temperaturunun azalması baş verir.

- 167 MeV-lik ağır Xe^{+26} ionları ilə $3.83 \times 10^{14} \text{ sm}^{-2}$ flüensədək şüalandırılma zamanı termodinamik parametrlərin qiymətlərində Bi_2Se_3 -də quruluş defektlərinin yaranması hesabına müxtəlif dəyişikliklər yaranmışdır. Ərimə temperaturu $T=705^\circ\text{C}$ -dən $T=636^\circ\text{C}$ -dək, əriməyə sərf olunan istilik enerjisi: $E_s = 7.87 \text{ mkC}$ -dan

5.66 mkC-a qədər, aktivləşmə enerjisi isə $E_{Akt} = 0.086$ C/mol-dan 0.042 C/mol-a qədər azalır.

- Bi_2Te_3 birləşməsində $85 \text{ }^\circ\text{C} \leq T \leq 556 \text{ }^\circ\text{C}$ temperatur aralığında Vigner entalpiyasının qiyməti $V_E = 16.7$ C/q, $T = 585 \text{ }^\circ\text{C}$ temperatura uyğun pikin termodinamik parametrləri: sərbəst enerjisi - $E_s = 7.25$ mkC, aktivləşmə enerji - $E_{Akt} = 0.092$ C/mol-a bərabədir.

-167 MeV-lik Xe^{+26} ionları ilə $3.83 \times 10^{14} \text{ sm}^{-2}$ flüensədək şüalandırılma zamanı bismut tellurda yaranmış defektlər səbəbindən ərimə temperaturu $T = 585 \text{ }^\circ\text{C}$ -dən $T = 555 \text{ }^\circ\text{C}$ -dək azalır, buna uyğun pikin enerjisi: $E_s = 7.25$ mkC-dan 4.4 mkC-a qədər, aktivləşmə enerjisi isə $E_{Akt} = 0.092$ C/mol-dan 0.041 C/mol-a qədər azalır.

-167 MeV-lik ağır Xe^{+26} ionların bismut selen birləşməsinə nüfuz etmə dərinliyi hesablanmışdır.

-167 MeV-lik Xe^{+26} ionları ilə $3.83 \times 10^{14} \text{ sm}^{-2}$ flüensədək şüalandırılma zamanı Sb_2Te_3 birləşməsində yaranmış defektlər hesabına ərimə temperaturu: $T = 626 \text{ }^\circ\text{C}$ -dən $T = 528 \text{ }^\circ\text{C}$ -dək, uyğun enerjisi: $E_s = 7.26$ mkC-dan 3.8 mkC-a qədər, aktivləşmə enerjisi isə $E_{Akt} = 0.07$ C/mol-dan 0.036 C/mol-a qədər azalmışdır.

- $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ birləşməsinin Ni ionları ilə interkalyasiyası zamanı Van- der -Vaals səthində nanokristal hissəciklər (dənəciklər) və nanoməfillər yaranmışdır.

Tədqiqatın nəzəri və praktiki əhəmiyyəti:

Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 , $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ və Sb_2Te_3 birləşmələri yarımkeçirici birləşmələr arasında xüsusi yer tuturlar. Bu birləşmələrdə topoloji izolyatorluğun aşkar edilməsi müasir elektronikada yeni tətbiq imkanları yaratmışdır. Ona görə də bu birləşmələrin müxtəlif fiziki xassələrinin araşdırılması, onların müxtəlif sahələrdə tətbiq edilməsi və onların əsasında yeni funksional kompozit materialların sintez edilməsi üçün mühüm elmi və praktiki əhəmiyyətə malikdirlər.

Geniş temperaturlar oblastında aparılan tədqiqatlar mühüm əhəmiyyətə malikdir. Belə ki, müxtəlif tətbiq sahələrində, o cümlədən də elektronikada istifadə zamanı qızma baş verir. Bu zaman qızmanın temperaturundan asılı olaraq işçi materiallar öz funksiyasını yerinə yetirməyə bilirlər. Ona görə də hər bir materialın

temperaturun təsiri altında öyrənilməsi və işçi oblastın müəyyən edilməsi çox vacibdir.

Ağır ionların funksional materialların müxtəlif fiziki xassələrinə təsirinin tədqiq edilməsi, həmin materialların tətbiq sahələrini artırır. Məlumdur ki, yarımkeçirici birləşmələr elektronikanın müxtəlif sahələrində geniş tədqiq edirlər. O cümlədən də sürətləndiricilərdə, aviasiya texnologiyalarında, kosmik aparatlarda tətbiq edilə bilirlər. Məlumdur ki, göstərilən sahələrdə müxtəlif xarici təsirlər baş verir və həmin təsirlər nəticəsində yarımkeçirici material öz işçi oblastını dəyişə bilər. Ona görə də ağır ionlarla Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 və Sb_2Te_3 birləşmələrinin şüalandırılması və şüalanmanın təsirinin tədqiq edilməsi çox vacibdir.

Bu işdə alınmış nəticələr tətbiqi xarakter daşmasına baxmayaraq, həm də fundamental fizika baxımından mühüm əhəmiyyətə malikdirlər. Ərimə temperaturuna uyğun faza keçidlərinin, sistemin halının dəyişməsinin təyin edilməsi və bu faza keçidlərinin termodinamik parametrlərinin tapılması, kristal quruluşda toplanan enerjinin – Vigner entalpiyasının qiymətinin hesablanması həmin sistemlər üzərində nəzəri hesablamaların aparılması üçün çox əhəmiyyətlidir.

Aprobasiyası və tətbiqi:

Dissertasiya işində alınmış əsas tədqiqat nəticələri, respublika və beynəlxalq səviyyəli konfranslarda müzakirə edilmişdir:

- 15th International Conference on “Technical and Physical Problems of Electrical Engineering” (ICTPE), 14-15 October 2019, Istanbul, Turkey;
- “Maqnitiumşaq ərintilərin informasiya texnologiyalarında və hərbi sənayedə tətbiqi perspektivləri” beynəlxalq elmi-praktik konfransı. Azərbaycan Memarlıq və İnşaat Universiteti, 9-11 oktyabr 2019-cu il, Bakı, Azərbaycan;
- Second International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists Multidisciplinary approaches in solving modern problems of fundamental and applied sciences (Natural sciences), 3-6 March 2020, Baku, Azerbaijan;

- 9th Rostocker International Conference: “Technical Thermodynamics: Thermophysical Properties and Energy Systems”, October, 2020, Rostock, Germany.
- “Аморфные и микрокристаллические полупроводники, Сборник трудов Международной конференции”, 05-07 июля 2021, Санкт-Петербург, Россия;

Dissertasiya işinin yerinə yetirilməsi zamanı alınmış nəticələr 15 elmi işdə dərc edilmişdir ki, onlardan 10-u məqalə (o cümlədən 3-ü Web of Sciences bazasına daxil olan xarici jurnal) və 5-i konfrans tezisidir.

Dissertasiya işinin yerinə yetirildiyi təşkilatın adı:

Dissertasiya işi, Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutunun “Akustooptika” laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir.

Tədqiqatın strukturu və həcmi:

Dissertasiya işi girişdən, beş fəsildən, əsas nəticələrdən, 2 cədvəl, 17 şəkildən, 22 qrafikdən və 123 adda istinad olunmuş ədəbiyyat daxil olmaqla, ümumilikdə 241058 işarədən ibarətdir.

İŞİN MƏZMUNU

Girişdə, dissertasiya işinin mövzusunun aktuallığı və perspektivləri, işinin məqsədi, elmi yenilikləri, elmi və praktiki əhəmiyyəti, qarşıya qoyulmuş məqsəd və müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar öz əksini tapmışdır.

Dissertasiya işinin **birinci fəsl**i, tədqiqat obyektləri olan Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 və Sb_2Te_3 binar yarımqeçirici birləşmələrin əvvəlki tədqiqatlarda alınmış nəticələrə aid ədəbiyyat icmalına həsr edilmişdir. Bu birləşmələrin kristal quruluşları: qəfəs parametrləri, simmetriyaları, atom koordinatları verilmişdir. Hər bir tərkib üçün quruluş çevrilmələri və ərimə temperaturuna uyğun faza keçidləri analiz edilmiş, müxtəlif fazaların quruluş xassələri göstərilmişdir. Müxtəlif difraksiya metodları vasitəsilə alınmış tədqiqat nəticələri araşdırılmışdır. Qəfəs parametrləri, atom koordinatları, atomlararası rabitələrin uzunluqları və rabitələrarası bucaqlar göstərilmişdir. Bu fəsildə həmçinin ikiqat yarımqeçiricilərdə termodinamik xassələr və

termodinamik parametrlər araşdırılmışdır. Bu birləşmələrdə baş verən termodinamik proseslər, faza keçidləri zamanı termodinamik parametrlərin dəyişməsi, yarımkeçiricilərdə Diferensial Termik Analiz tədqiqatlarının əhəmiyyəti, alınmış təcrübi nəticələrin nəzəri olaraq analiz edilməsi göstərilmişdir. Diferensial Termik Analiz və Termografiyometrik analiz metodları ilə bərk cisimlərdə, o cümlədən də yarımkeçiricilərdə baş verən faza keçidlərinin müəyyən edilməsi, bərk-maye faza keçidlərinin termodinamik parametrlərinin hesablanması göstərilmişdir.

Şüalanmanın yarımkeçiricilərə və xüsusilə də $A_2^V B_3^{VI}$ binar yarımkeçirici birləşmələrinə təsiri öyrənilmiş, ionlaşdırıcı şüaların təsiri ilə yarımkeçiricilərdə baş verən dəyişikliklər araşdırılmışdır. Bərk cisimlərdə ağır ionlarla şüalandırılmalar və onların müxtəlif fiziki xassələrə təsiri şərh edilmişdir. Yarımkeçiricilərdə əvvəlki tədqiqatlar zamanı 167 MeV-lik Xe^{+26} ionlarının təsiri ilə defektlərin yaranması və bu defektlərin müxtəlif fiziki xassələrə təsiri haqqında geniş məlumat verilmişdir.

İkinci fəsil, dissertasiya işində qarşıya qoyulmuş məqsədə çatmaq üçün nəzərdə tutulmuş təcrübi metodlara, tədqiqat nəticələrinin analiz edilməsi üçün istifadə edilən müxtəlif analiz metodlarına, proqram təminatlarına və cihazlara həsr edilmişdir. Tədqiqatlar zamanı rentgen difraksiyası, Raman spektroskopiyası, Diferensial Termik Analiz, ion implantasiya, SRIM analiz metodlarından istifadə edilmişdir.

Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 və Sb_2Te_3 tərkiblərinin yüksək temperaturlu sobalarda sintez edilməsi, standart metod ilə bu tərkiblərin kristallarının alınması, sintez prosesi zamanı optimal rejimin seçilməsi və yüksək temperaturlu sobalarda tədqiqat prosesi göstərilmişdir.

Alınmış rentgen difraksiyası spektrləri analiz edilərək quruluş məlumatları təyin edilmişdir¹.

Tədqiqat obyektlərində kristal quruluşda mövcud olan müxtəliflikləri müəyyən etmək üçün Raman spektroskopiyası metodu ilə atom dinamikası tədqiqatları aparılmış, şüalanmadan öncə

¹ Хайкер Д.М. Рентгеновская дифрактометрия /-М: Физмат. 1963. - 380 с.

və müxtəlif flüenslərdə ağır ionlarla şüalandırılmış tədqiqat obyektlərinin termodinamik xassələri isə Diferensial Termik Analiz metodu ilə tədqiq edilmişdir. Nümunələr Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutunda (Dubna, Rusiya) Flyorov adına Nüvə Reaksiyaları Laboratoriyasında şüalandırılmışdır.

Üçüncü fəsildə rentgen difraksiyası, Raman spektroskopiyası və Diferensial Termik Analiz metodları² ilə aparılmış tədqiqatların nəticələri təqdim edilmişdir.

Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3 birləşmələrinin kristal quruluşu, atom dinamikası, termik xassələri və termodinamik parametrləri haqqında tədqiqat nəticələri verilmişdir.

Müxtəlif tərkiblərin hər biri üçün otaq temperaturunda və normal şəraitdə rentgen difraksiyası metodu ilə quruluş faza analizləri aparılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmələrin hər biri yüksək simmetriyalı romboedrik sinqoniyada kristallaşırlar. Qəfəs parametrlərində yaranan kiçik fərqlər birləşmələrə daxil olan elementlərin ion radiusları arasındakı fərqlə izah edilmişdir. Belə ki, kristal quruluşda baş verən fərqlər Bi-Sb və Se-Te atomlarının ion radiusları arasındakı fərq ilə izah edilmişdir. Bu müxtəliflik yalnız quruluş tədqiqatlarında deyil, həm də Raman spektroskopiyası metodu ilə aparılmış atom dinamikası tədqiqatları zamanı müşahidə edilmişdir. Bi_2Se_3 birləşməsinin Raman spektrində 3 əsas rəqs modası müşahidə edilmişdi: $\nu_1 = 56.22 \text{ sm}^{-1}$, $\nu_2 = 98.73 \text{ sm}^{-1}$ və $\nu_3 = 133.84 \text{ sm}^{-1}$ təyin edilmişdir.

Müəyyən edilmişdir ki, təcrübi olaraq Raman spektroskopiyası metodu ilə müşahidə edilə bilən bu rəqs modaları Bi – Se və Se – Se rabitələrinə uyğun gəlir. Bi – Bi rabitələrinə uyğun gələn rəqs modaları isə təcrübi olaraq müşahidə edilməmişdir. Bismit tellurid birləşməsinin Raman spektrində də bismut selenid birləşməsinin Raman spektrində müşahidə edilən rəqs modalarına uyğunluq alınmışdır. 3 Raman modası: $\nu_1 = 59.19 \text{ sm}^{-1}$, $\nu_2 = 100.52 \text{ sm}^{-1}$ və $\nu_3 = 135.34 \text{ sm}^{-1}$ müşahidə edilmişdir ki, bu rəqs modaları Bi – Te və Te – Te rabitələrinə uyğun gələn aşağı tezliklər oblastına düşür.

² Smykatz-Kloss, W. Differential Thermal Analysis /- Berlin: Springer, 1974.-185 p.

Sb_2Te_3 birləşməsinin atom dinamikasında Bi_2Se_3 və Bi_2Te_3 birləşmələrinin atom dinamikalarına nəzərən bir qədər mürəkkəb xarakter müşahidə edilmişdir. Normal şəraitdə alınmış Raman spektrində 4 rəqs modası: $\nu_1 = 43.31 \text{ sm}^{-1}$, $\nu_2 = 66.32 \text{ sm}^{-1}$, $\nu_3 = 97.27 \text{ sm}^{-1}$ və $\nu_4 = 131.08 \text{ sm}^{-1}$ müşahidə edilmişdir ki, bu da əvvəlki tədqiqatların nəticələrinə uyğun gəlir. Bu rəqs modaları Sb – Te və Te – Te rabitələrinin rəqslərinə uyğun gəlir.

Beləliklə, rentgen difraksiyası və Raman spektroskopiyası metodları ilə otaq temperaturunda və normal şəraitdə Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3 kristallarının quruluş xassələri kompleks şəkildə öyrənilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, $\text{Bi} \rightarrow \text{Sb}$ və $\text{Se} \rightarrow \text{Te}$ atomlarının ion radiuslarındakı kiçik fərq istər kristal quruluşda istərsə də kristalların atom dinamikasında ciddi fərqlər yaradır. Bu fərq, $\text{Bi} \rightarrow \text{Sb}$ kation əvəzləmələri zamanı daha kəskin müşahidə edilir. Belə ki, Bi_2Se_3 və Bi_2Te_3 birləşmələrinin kristal quruluşları və atom dinamikası daha oxşar olur. Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3 birləşmələrində isə həm Raman modalarının sayında həm də kristal quruluşun interpretasiyasında müxtəliflik müşahidə edilmişdir.

Müəyyən edilmişdir ki, tərkiblərə daxil olan atomların ion radiusları böyük olduqda Raman modalarının tezlikləri azalır ki, bu da atomlararası rabitələrin uzunluqlarının artması ilə izah edilir. Atomların ion radiusları kiçik olduğu zaman isə atomlararası rabitələrin uzunluqlarında azalma baş verir ki, bunun nəticəsində Raman modalarının tezlikləri artır.

Üçüncü fəslə həmçinin DTA (Diferensial Termik Analiz) tədqiqatları aparılmışdır. “Perkin Elmer” STA 6000 cihazında Diferensial Termik Analiz metodu ilə aparılmış tədqiqatlar zamanı müəyyən edilmişdir ki, Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3 birləşmələrində $30^\circ\text{C} \leq T \leq 800^\circ\text{C}$ temperatur intervalında bir neçə termik oblast müşahidə edilir. Bu termik oblastlar birləşmələrin tərkibindəki zəif rabitələrin qırılması, ərimənin baş verməsi ilə izah edilmişdir. Geniş temperaturlarda ərimə temperaturuna uyğun gələn faza keçidinin termodinamik parametrləri: sərbəst enerjisi, entalpiyası hesablanmışdır.

Geniş temperaturlar oblastında baş verən reaksiyaların mexanizmi atomlar arası qarşılıqlı təsir kinetikasından və kristal

qurluşda toplanan enerjiden asılıdır. Müəyyən temperatur intervalı vardır ki, kristallarda faza keçidi baş vermir, yalnız enerji toplanması baş verir. Bu enerji termodinamikada Vigner entalpiyası adlanır. Hər bir sistemi öyrənərkən Vigner entalpiyasının təyin edilməsi, həmin sistemin başa düşülməsi üçün vacibdir. Bu fəsildə geniş temperaturlar oblastında Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3 binar yarımkəçiriciləri üçün sistemin Vigner entalpiyası təyin edilmişdir. Fəslin sonunda alınmış əsas nəticələr göstərilmiş və izah edilmişdir.

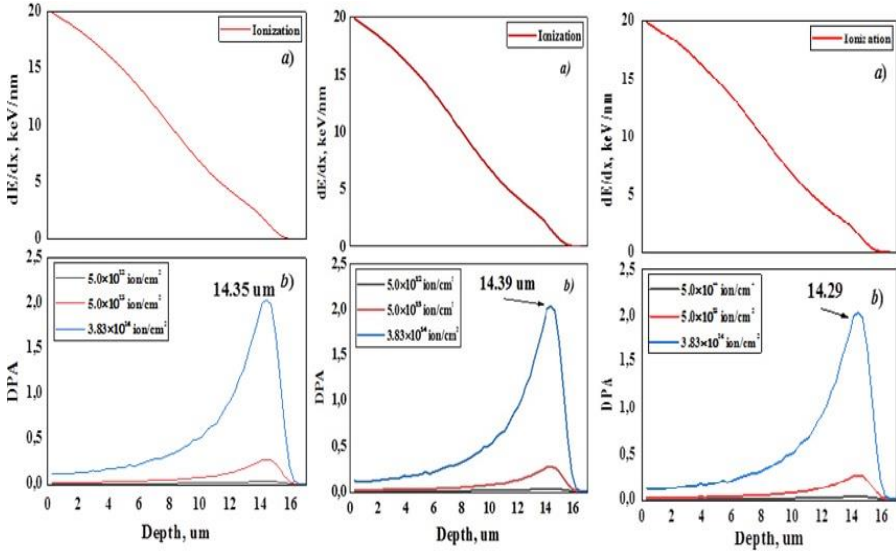
Dördüncü fəsildə Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3 birləşmələrinin termodinamik parametrlərinə və termodinamik xassələrinə ağır ionların təsiri tədqiq edilmişdir.

Ksenon ionlarının təsiri ilə bu birləşmələrdə baş verən dəyişikliklər SRIM analizləri³, termodinamik xassələrinə ağır ionların təsiri Diferensial Termik Analizləri ilə öyrənilmişdir. SRIM Code proqramında analiz nəticələri göstərmişdir ki, IC100 siklotronunda (Rusiya, Dubna) 167 MeV-lik Xe^{+26} ağır ionları ilə şüalandırılma zamanı Xe^{+26} ionları Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3 binar yarımkəçiricilərində $d \approx 16$ mkm dərinliyə qədər nüfuz edə bilirlər. (Şəkil 1.) Yüksək enerjili ksenon ionlarının Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3 birləşmələrinə nüfuz etməsini tədqiq etmək məqsədilə SRIM Code proqramı vasitəsilə hesablamalar aparılmışdır. Hesablamalar zamanı SRIM Code proqramına Bi və Se atomları, bismut selenid birləşməsinin sıxlığı: $\rho = 6.82 \text{ q/sm}^3$, bismut telluridi təşkil edən Bi və Te atomları, bismut tellurid birləşməsinin sıxlığı: $\rho = 7.71 \text{ q/sm}^3$ stibium telluridi təşkil edən Sb və Te atomları və stibium tellurid birləşməsinin sıxlığı: $\rho = 6.50 \text{ q/sm}^3$ daxil edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, $E = 167 \text{ MeV}$ enerjili ksenon ionları ilə $\Phi_1 = 5.0 \times 10^{12} \text{ ion/sm}^2$, $\Phi_2 = 5.0 \times 10^{13} \text{ ion/sm}^2$ və $\Phi_3 = 3.83 \times 10^{14} \text{ ion/sm}^2$ flüens şüalandırılma zamanı ionların hər üç birləşməyə nüfuz etməsinin xarakteri demək olar ki, eyni cür baş verir. Hesablamalar zamanı ionların hər nm dərinlikdə itirilən enerjisinin (dE/dx) dərinlikdən asılılığından (Şəkil 1.a) müəyyən edilmişdir ki, ksenon ionları ikiqat binar yarımkəçiricilərdə (Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3) $l \approx 16$ mkm dərinlikdə öz enerjilərini tamamilə itirərək $E = 0$ qiymətini alırlar.

³ Ziegler, J.F. The Stopping and Range of Ions in Matter / -New York: Pergamon Press, 1985. -375 p.

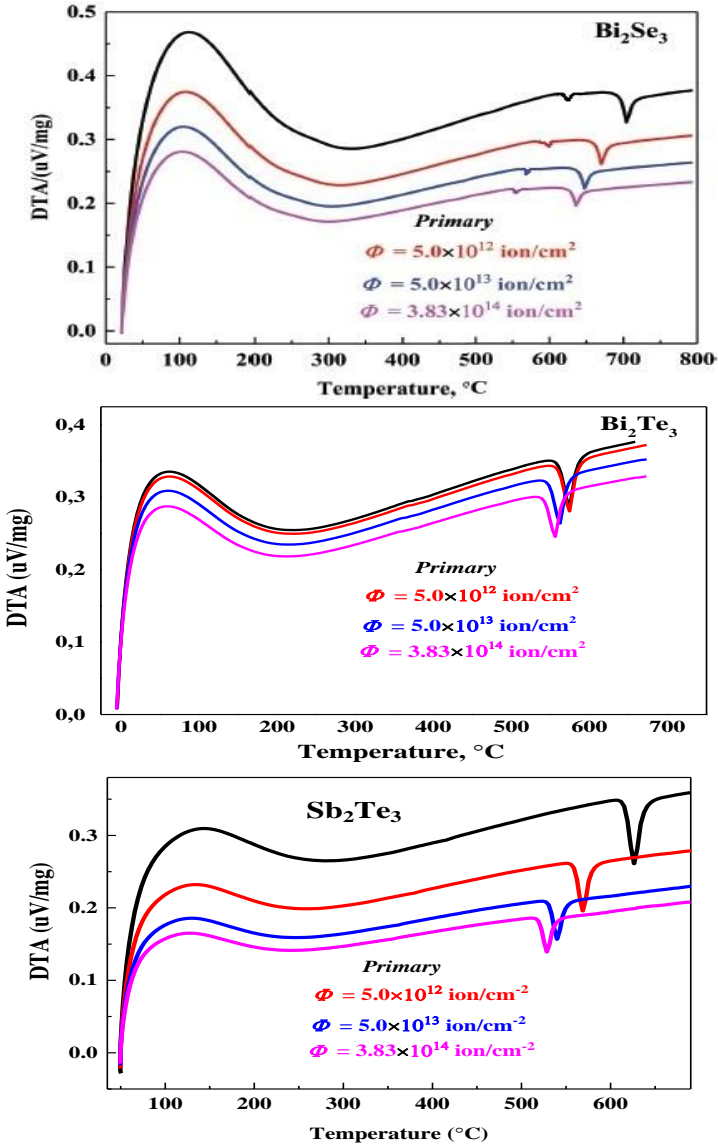
Şəkil 1.b-də DPA (Displacement Per Atom) – bir atomu yerindən çıxarmaq üçün tələb olunan enerjinin dərinlikdən asılılığından görüldüyü kimi səthdən səpilən ionlar üçün bu enerjinin qiyməti çox kiçikdir. Bu o deməkdir ki, səthdəki atomlar ya öz ideal kristalloqrafik mövqələrindən asanlıqla sürüşürlər, ya da səthdən yalnız səpilmə baş verir. Yüksək enerjili ionlar dərinliyə nüfuz etdikcə atomlarla toqquşma ehtimalları artır və bu zaman atomları sürüşdürmək üçün lazım olan enerjinin qiymətində də artma müşahidə edilir. Bu effekt, $l \approx 10$ mkm dərinlikdən sonra müşahidə edilməyə başlayır. $l \approx 14.35$ mkm dərinlikdə isə lazım olan enerjinin maksimumu müşahidə edilmişdir (Şəkil 1.b). $l \approx 16$ mkm dərinlikdən sonra $E_{DPA} = 0$ olur. Bu isə o deməkdir ki, dərinliyin verilmiş qiymətindən sonra atomları öz mövqələrindən sürüşdürmək olmur. Buna görə də $l \approx 16$ mkm dərinlik 167 MeV-lik Xe^{+26} ağır ionlarının hər üç birləşmələrdə maksimal nüfuzetmə dərinliyi hesab edilir.

Bu fəsildə həmçinin Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3 birləşmələrinin termodinamik xassələrinə ağır ionların təsiri tədqiq edilmişdir. Bu birləşmələrin tədqiqat nümunələri $E = 167$ MeV enerjili ksenon ionları ilə $\Phi_1 = 5.0 \times 10^{12}$ ion/sm², $\Phi_2 = 5.0 \times 10^{13}$ ion/sm² və $\Phi_3 = 3.83 \times 10^{14}$ ion/sm² flüens şüalandırılmış və şüalandırılmadan sonra nümunələrin Diferensial Termik Analizləri aparılmışdır. (Şəkil2.) Müəyyən edilmişdir ki, yüksək enerjili ionların bu sistemlərə təsiri müxtəlifdir. Şəkil 2-dən görüldüyü kimi şüalanmanın dozası artdıqca şüalandırılmış birləşmələrdə ərimə temperaturuna uyğun faza keçidi daha aşağı temperaturda baş verir.



Şəkil 1. SRIM analiz nəticələrinə əsasən Xe^{+26} ionlarının Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 birləşmələrində müxtəlif flüenslərdə ($\Phi_1=5.0 \times 10^{12}$ ion/sm², $\Phi_2=5.0 \times 10^{13}$ ion/sm² və $\Phi_3 = 3.83 \times 10^{14}$ ion/sm²) paylanma əyrisi.

Bi_2Se_3 birləşməsində ərimə temperaturunda baş verən faza keçidi temperaturu $T = 705$ °C-dən $T = 636$ °C-dək ($\Delta T = 69$ °C), Bi_2Te_3 birləşməsində $T = 585$ °C-dən $T = 555$ °C-dək ($\Delta T = 30$ °C), Sb_2Te_3 birləşməsində isə $T = 626$ °C-dən $T = 528$ °C-dək ($\Delta T = 98$ °C) azalmışdır. 167 MeV-lik ağır Xe^{+26} ionlaşma nəticəsində $30^\circ\text{C} \leq T \leq 800^\circ\text{C}$ temperaturlar oblastında Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 kristalları üçün termodinamik xassələrindən biri olan ərimə tempetaturunun azalması müyyən edilmişdir. Şəkil 2. asılılığından görüldüyü kimi böyük pik Bi_2Se_3 -ün, kiçik pik isə BiSe -in ərimə temperaturuna uyğun gəlir. $\Phi = 5 \times 10^{12}$, 5×10^{13} və 3.83×10^{14} ion/sm² flüenslərdə şüalanmadan asılı olaraq, BiSe üçün $520^\circ\text{C} - 606^\circ\text{C}$, Bi_2Se_3 krisralı üçün $620^\circ\text{C} - 705^\circ\text{C}$ temperatur intervalında dəyişdiyi müəyyən edilmişdir. Şüalanmadan asılı olaraq Bi_2Se_3 və BiSe kristallarının ərimə temperaturlarının simmetrik-xətti azalması müşahidə olunmuşdur.



Şəkil 2. Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3 birləşmələrinin şüalanmadan əvvəl və müxtəlif flüenslərdə şüalandırılmış nümunələrinin DTA spektrləri.

Şüalanmanın təsiri ilə Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 və Sb_2Te_3 birləşmələrində yaranmış müxtəlif təsir effektləri yalnız ərimə temperaturuna uyğun gələn faza keçidi temperaturunda müşahidə edilməmişdir. DTA spektrlərinin analizi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, ərimə temperaturuna qədər müşahidə edilmiş stabil oblastın enerjisi – Vigner entalpiyasının qiymətində, istərsə ərimə temperaturunda termodinamik parametrlərində ciddi fərqlər meydana gəlir. Birləşmələrin yüksək flüensdə şüalanmalarında, ərimə temperaturuna uyğun faza keçidi zamanı DTA əyrisi ilə temperatur oxu arasındakı sahə azalır. Bu effekt onun göstəricisidir ki, ağır ionların təsiri ilə faza keçidinin sərbəst enerjisinin və entalpiyasının qiymətlərində azalma müşahidə edilir. Xe ionları ilə $\Phi = 5 \times 10^{13}$ ion/sm² və $\Phi = 3.83 \times 10^{14}$ ion/sm² flüens şüalanmalar zamanı bu effekt daha çox müşahidə edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, stabil oblastlarda da kristalın enerjisi şüalanmadan asılıdır.

Məlumdur ki, ağır ionlarla şüalandırılma zamanı kristal quruluşda bir çox defektlər meydana gəlir. Sb_2Te_3 birləşməsinin kristal quruluşunda ağır ionların təsiri altında kimyəvi rabitələrin dağılması və rabitələr arası müxtəlif defektlərin formalaşması baş verir. Yaranmış hər bir defekt energetik xarakterinə görə “enerji yığan (toplayan) mərkəz adlandırmaq olur. Bu mərkəzlərin enerji qiymətinin dəyərləndirilməsi üçün temperaturun təsiri altında istilik seli funksiyası analiz edilmişdir.

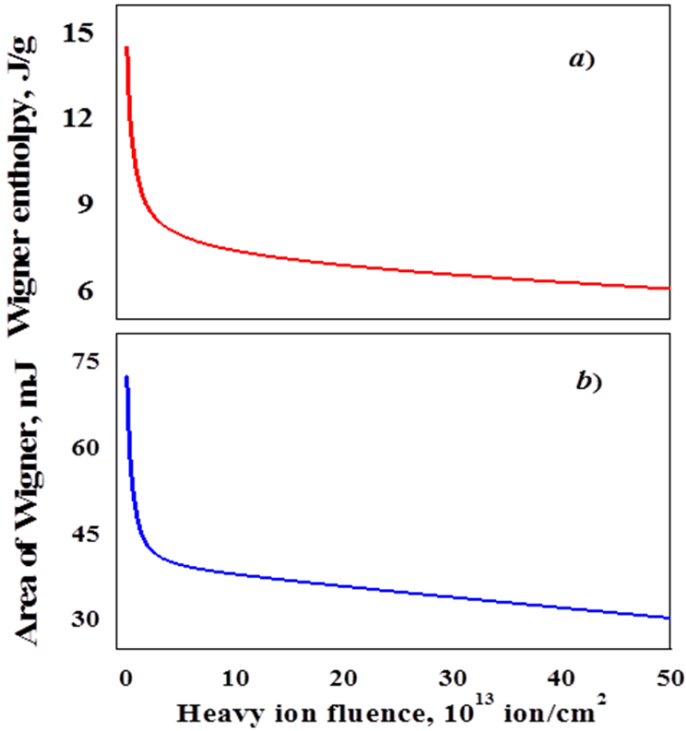
Temperaturun təsiri altında kristal quruluşdakı qruplara bölünən defektlər aktivləşmə enerjisinə görə müxtəlif energetik səviyyələrə migrasiya edirlər. Bir qism defektlərin kristal quruluşda hərəkətiliyi geniş temperatur intervalında baş verir. Lakin müəyyən tip defektlər də vardır ki, onların kristal quruluşda miqrasiyası konkret temperatur intervalında dəyişir. Ağır ionların təsiri altında yaranan defektlərin rekombinasiya prosesi kifayət qədər yüksək sürətlidir. $T > 500$ °C temperaturdan sonra Vigner entalpiyasının qiyməti birbaşa prosesin aktivləşmə enerjisindən asılıdır. Eksperimental olaraq ionların intensivliyinin artması ilə Sb_2Te_3 birləşməsinin kristal quruluşunda Vigner entalpiyasının qiymətində azalma baş verir. Xe ionları implantasiya zamanı kristal quruluşda səth xarakterli müxtəlif növ defekt mərkəzlər formalaşdırır. Əlavə olaraq, şüalanmanın

flüensinin artması ilə kristal quruluşda aktivləşmə enerjisinin miqdarı azalır. Şüalanmamış nümunələrdə ana defektlərin hesabına yaranan Vigner entalpiyasının miqdarı 5×10^{13} ion/cm² -dən $3.84 \cdot 10^{14}$ ion/cm² -dək flüensdə şüalanma zamanı azalır. 167 MeV enerjili ¹³²Xe ionları ilə şüalandırılmış Sb₂Te₃ birləşməsinin Vigner entalpiyasının sahə kinetikasının və aktivləşmə enerjisinin şüalanma intensivliyindən asılılığı şəkil 4-də göstərilmişdir.

İstilik selinin temperatur asılılığını xarakterizə edən funksiyanın analiz nəticələri göstərir ki, Sb₂Te₃ birləşməsinin kristal stukturda sintez şəraitindən və xarici təsir faktorlarından asılı olaraq həcmdə xarakterik defektlər formalaşır. Defektlərin formalaşma mexanizmindən və onların miqrasiyasından asılı olaraq Vigner entalpiyası fərqli temperatur intervallarına sürüşür. Vigner effektinin dəyişməsi eksperimental şəraitdən aslıdır. Şüalanma şəraitinin vakuum mühütündə yerinə yetirildiyini nəzərə alsaq bütün eksperimental tədqiqatlardan Vigner enerjisinin qiyməti minimuma yaxınlaşır ki, xarici təsir amillərini minimuma endirir. Eksperimental nəticələr göstərir ki, şüalanma dozasının qiymətinin artması ilə Sb₂Te₃ birləşməsində Vigner enerjisinin miqdarı azalır və kristal strukturunda defektlərin formalaşması eksponensial olaraq azalır.

Bu fərqlər onu göstərir ki, Bi– Sb və Se– Te atomlarının ion radiuslarındakı fərq nəticəsində atomlararası məsafələrin uzunluqlarında yaranmış müxtəliflik yalnız kristal quruluşun kristalloqrafik parametrlərinə və atom dinamikasına deyil, ümumilikdə sistemə təsir göstərir.

Bu birləşmələrə termodinamik sistem kimi yanaşdıqda sistemin iş görmək qabiliyyətində olan enerjisi – sərbəst enerjisi də, stabil oblastda istilik seli hesabına toplanan enerji – Vigner entalpiyası da fərqli olur. Ona görə də yüksək enerjili ksenon ionları ilə implantasiya zamanı bu sistemlərin termodinamik parametrlərinin dəyişmə xarakteri də müxtəlif olur.



Şəkil 4. 167 MeV enerjili ^{132}Xe ionları ilə şüalandırılmış Sb_2Te_3 birləşməsində Vigner entalpiyasının sahə kinetikasi və aktivləşmə enerjisinin şüalanma intensivliyindən asılılığı.

Beşinci fəsildə $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ birləşməsinin Ni atomları ilə interkalyasiyası zamanı alınmış tədqiqat obyektinin kristal və səth quruluşu kompleks şəkildə tədqiq edilmişdir. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ kristalı elektrokimyəvi üsulla Ni atomları ilə interkalyasiya edilmişdir. İnterkalyasiya prosesi zamanı $1 \times 2 \times 0.05 \text{ sm}^3$ ölçülü $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ nümunəsi Ni ilə $V = 1 \text{ dm}^3$ həcmli menzurka içərisində 0.5% -li məhlulda elektroliz metodu ilə aparılmışdır. Alınmış tədqiqat obyektinin kristal quruluşu və morfologiyası otaq temperaturunda uyğun olaraq rentgen difraktometrində və skanedici elektron mikroskopunda tədqiq edilmişdir. Nikel metalı ilə interkalyasiya olunmuş $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ laylı kristallarının difraksiya mənzərələrinin analizi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, alınmış spektrlər

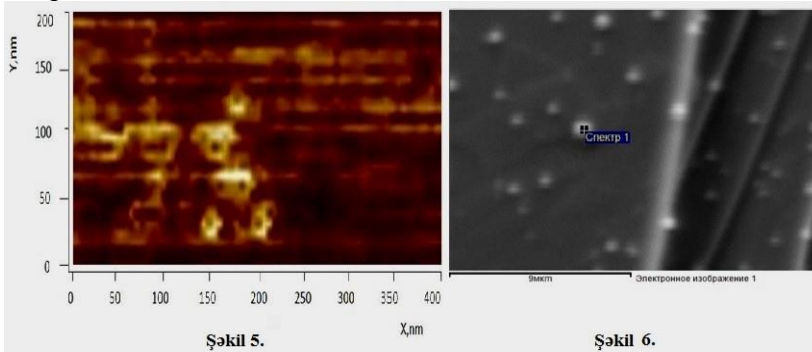
$\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ kristallarına uyğun gələn difraksiya maksimumları ilə yanaşı, eynicinsli fazadan da ibarətdir. Bu fazaların biri nikel atomlarının əmələ gətirdikləri $\text{Ni}_{1.29}\text{Te}$ birləşməsinə, ikinci faza isə NiSeTe zəncirinə uyğun gəlmişdir.

Quruluş analizləri göstərmişdir ki, nikel atomları ilə interkalyasiya edilərkən, atomlar $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ laylı kristallarının içərisində asılı vəziyyətdə qalmır, tellur və selen atomları ilə kovalent rabitələr əmələ gətirir. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ birləşməsinin Ni ilə interkalyasiyası, quruluşda 1.17% miqdarında $\text{Ni}_{1.29}\text{Te}$ yarımkəçirici birləşməsi yaranmasına səbəb olur. Rentgen difraksiyası metodu ilə alınmış difraksiya mənzərələrində $\text{Ni}_{1.29}\text{Te}$ birləşməsinin də kristal quruluşu analiz edilmişdir. İnterkalyasiyadan sonra $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ laylı kristallarının səth quruluşu AFM- BUNKER Nano N8 Neos atom qüvvə mikroskopu (AQM) və NC-AFM markalı elektron mikroskopunun köməyi ilə tədqiq olunmuşdur. Ni-lə interkalyasiya olunmuş $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ kristalın atom qüvvə mikroskopunda müxtəlif miqyaslarda alınmış səth quruluşu şəkil 5-də verilmişdir.

Ölçüləri 35 ± 5 nm olan $\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ özəklərinin əmələ gəlməsi - quruluşa xas olan 20 nm radiuslu xətti defektlərin çuxurlarının doldurulması ilə əlaqəlidir. Özəklərin quruluşu nikel atomları arasında maqnit mübadiləsi qarşılıqlı təsirinin mühüm rol oynadığı $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ laylarının müstəvilərinə yaxın defektlərdə interkalyant atomlarının öz-özünə təşkili nəticəsində əmələ gəlir, özəklərin çuxurlarda böyümə prosesi enerji baxımından əlverişsiz olduğundan özəyin böyümə prosesinin məhduqlaşması ilə nəticələnir. Skanedici elektron mikroskop vasitəsi ilə $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}\langle\text{Ni}\rangle$ səthlərində maksimal ölçüləri 0,5-0,6 mkm olan, sferik formalı $\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ tərkibli kristallitlərin mövcudluğu tədqiq olunmuşdur (Şəkil 6). $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ kristallarının pilləvari laylarında özəklərin böyüməsi əsas iki proseslə baş verir. Beləliklə, özəklər, nikel ionları elektrik sahəsi ilə məhluldan kristalın laylarına daşınaraq koalesensiya prosesi ilə defektlərdə formalaşır. Atom qüvvə mikroskopu ilə aparılmış tədqiqatlar zamanı müəyyən edilmişdir ki, Ni-lə interkalyasiya olunmuş $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ birləşməsində quruluşun formalaşması Van-der-Vaals səth quruluşunda Te ionları ilə birləşərək, öz-özünə formalaşan, ölçüləri 35 ± 5 nm olan yarımkəçirici $\text{Ni}_{1.29}\text{Te}$ nanokristal

hissəciklər (dənəciklər) və nanonaqillər formalaşdırır. (Şəkil 5.) İnterpretasiya zamanı müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmə ortorombik kristal quruluş əmələ gətirir. Müəyyən edilmişdir ki, $a \approx 3.9 \text{ \AA}$, $b \approx 6.8 \text{ \AA}$ və $c \approx 12.3 \text{ \AA}$ qiymətlərinə uyğun gəlir. Quruluşdan görünür ki, Ni və Te atomları müxtəlif rabitələr əmələ gətirirlər. Bu onunla əlaqədardır ki, kristal quruluşu əmələ gətirən Ni atomları 6 müxtəlif mövqedə dayanırlar. Ni atomları ilə kovalent rabitələr əmələ gətirən Te atomları isə 4 müxtəlif mövqedə dayanırlar. Müxtəlif mövqedə dayanan atomların əmələ gətirdikləri kovalent rabitələrin uzunluqları da müxtəlif olur.

Müəyyən edilmişdir ki, $\text{Ni}_{1.29}\text{Te}$ birləşməsində müxtəlif mövqələrdə dayanan Ni atomlarının valentlikləri də müxtəlif olur. Ona görə də ikivalentli Ni atomlarının ion radiusları birvalentli Ni atomlarının ion radiuslarından daha kiçik olurlar. Bu effekt, yalnız atomlarının kristal quruluşlarda dayandıqları atom koordinatlarına deyil, atomlararası məsafələrə və ümumilikdə quruluşun kristalloqrafik parametrlərinə öz təsirini göstərir. Ni atomları ilə interkalyasiya edilmiş $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ birləşməsinin səth quruluşu JEOL JSM-661OLV SEM (skanedic elektron mikroskopu) (Analizator markası: OXFORD INSTRUMENTS X-Max) vasitəsilə tədqiq edilmişdir. Alınmış səth morfoloqiyası şəkil 6.-da verilmişdir. Alınmış səth quruluşunun interpretasiyası zamanı müəyyən edilmişdir ki, səthdə $d = 9 \text{ mkm}$ miqyasda verilmiş quruluşda müxtəlif ölçüdə paralel laylar və kristallitlər müşahidə edilmişdir. Bu da quruluş səthlərinin təmizlik və kristallaşma dərəcəsi ilə əlaqədardır.



Bu nanokristal hissəciklərin (dənəciklərin) səth quruluşunda formalaşması, həmin materialların tətbiq edilməsi oblastını genişləndirir. Məlumdur ki, nanoməfillərin və nanokristal hissəciklər (dənəciklər) fizikası materialın digər hissələrindən fərqli olur və həmin nöqtələrdə fərqli xassələr müşahidə edilir. Ona görə də, Ni ilə interkalyasiya olunmuş $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ kristallarında nanokristal hissəciklərin və nanoməfillərin müşahidə edilməsi yalnız quruluş defektlərinin tədqiqi deyil, həm də nanokompozit material kimi tətbiqi mümkündür.

Nəticələr

Dissertasiya işinin yerinə yetirilməsi zamanı aşağıdakı əsas nəticələr alınmışdır:

1. Geniş temperatur intervalında ($30^\circ\text{C} \leq T \leq 800^\circ\text{C}$) Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 birləşmələrində stabil termik oblast üçün Vigner entalpiyasının qiyməti, termodinamik parametrləri hesablanmış, sərbəst enerjilərinin və aktivləşmə enerjilərinin qiymətləri müəyyən edilmişdir:

a) Bi_2Se_3 laylı kristalı üçün Vigner entalpiyasının qiyməti- $V_E = 17.84 \text{ C/q}$, $T = 706^\circ\text{C}$ temperaturna uyğun pikin termodinamik parametrləri: sərbəst enerjisi- $E_s = 7.87 \text{ mkC}$, aktivləşmə enerjisi - $E_{Akt} = 0.086 \text{ C/mol}$;

b) Bi_2Te_3 birləşməsi üçün $85^\circ\text{C} \leq T \leq 556^\circ\text{C}$ temperaturalar intervalında $V_E = 16.7 \text{ C/q}$, $T = 585^\circ\text{C}$ temperaturna uyğun sərbəst enerjisi- $E_s = 7.25 \text{ mkC}$, aktivləşmə enerji- $E_{Akt} = 0.092 \text{ C/mol}$;

c) Sb_2Te_3 birləşməsi üçün $V_E = 14.52 \text{ C/q}$, $E_s = 6.51 \text{ mkC}$, aktivləşmə enerji- $E_{Akt} = 0.07 \text{ C/mol}$ -a bərabər olduğu müəyyən edilmişdir.

2. 167 MeV yüksək enerjili Xe^{+26} ionlarla $3.83 \times 10^{14} \text{ sm}^{-2}$ dozayadək şüalandırılması ilə Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 birləşmələrində yaranmış defektlər hesabına ərimə temperaturunun Bi_2Se_3 birləşməsində 705°C -dən 636°C -dək ($\Delta T = 69^\circ\text{C}$), Bi_2Te_3 birləşməsində 585°C -dən 555°C -dək ($\Delta T = 30^\circ\text{C}$), Sb_2Te_3 birləşməsində 620°C -dən 528°C -dək ($\Delta T = 98^\circ\text{C}$) azalması müəyyən edilmişdir.

3. 167 MeV yüksək enerjili Xe^{+26} ionlarının intensivliyinin artması ilə $3.83 \times 10^{14} \text{ sm}^{-2}$ dozayadək şüalandırılmasından yaranmış defektlərlə əlaqədar olaraq Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 birləşmələrində Vinger entalpiyasının və termodinamik parametrlərin (sərbəst və aktivləşmə enerjilərinin qiymətlərində azalmanın baş verməsi müəyyən edilmişdir:

a) Bi_2Se_3 -in əriməyə sərf olunan istilik enerjisinin $E_s = 7.87$ mkC-dan 5.66 mkC-a qədər; aktivləşmə enerjisinin qiymətlərinin $E_{Akt} = 0.086$ C/mol-dan 0.042 C/mol-a;

b) Bi_2Te_3 -da $E_s = 7.25$ mkC-dan 4.4 mkC-a qədər, aktivləşmə enerjisi isə $E_{Akt} = 0.092$ C/mol-dan 0.041 C/mol-a;

c) Sb_2Te_3 -da $E_s = 7.26$ mkC-dan 3.8 mkC-a qədər, aktivləşmə enerjisi isə $E_{Akt} = 0.07$ C/mol-dan 0.036 C/mol-a qədər azalmışdır.

4. 167 MeV yüksək enerjili Xe^{+26} ionlarının hər üç birləşməyə (Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3) nüfuz etməsinin eyni qayda baş verdiyi müəyyən edilmişdir. İonların dərinliyə nüfuz etməsi kristalların elektron alt sistemə ion enerjisinin buraxılmasının miqdarı ilə müəyyən edilmiş və 14 mkm dərinlikdə enerjinin maksimumu müşahidə edilmişdir. Hər nm dərinlikdə itirilən enerjinin qiymətinin 16 mkm dərinlikdə sıfıra enməsi ilə kristalda əmələ gələn trektlərə uyğun maksimal nüfuzetmə dərinliyinin 16 mkm olduğu müəyyən edilmişdir.

5. Rentgen struktur tədqiqatı əsasında nikel ilə interkalyasiya edimiş $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ birləşməsinin fəza qrupu $\text{Pmc}2_1$, qəfəs parametrləri $a = 3.909 \text{ \AA}$, $b = 6.863 \text{ \AA}$, $c = 12.340 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ olduğu müəyyən edilmişdir. Doymamış atom rabitələri ilə Ni ionları kovalent rabitələr əmələ gətirərək, səthin daxili defektlərində ortorombik quruluşu yarımkeçiri $\text{Ni}_{1.29}\text{Te} - 1.17\%$ tərkibli özlərin əmələ gəlməsi ilə Van-der-Vaals səthinə yaxın defektlərdə Ni-Te-Se-1.33% zəncirlərin əmələ gətirməsi doymamış sərbəst rabitələrin bərpası ilə əlaqədardır.

6. Ölçüləri 35 ± 5 nm olan $\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ özlərinin əmələ gəlməsi - quruluşa xas olan 20 nm radiuslu xətti defektlərin çuxurlarının doldurulması ilə əlaqəlidir. Özlərin quruluşu nikel atomları arasında maqnit mübadiləsi qarşılıqlı təsirinin mühüm rol oynadığı $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ laylarının müstəvilərinə yaxın defektlərdə interkalyant

atomlarının öz-özünə təşkili nəticəsində əmələ gəlir, özəklərin çuxurlarda böyümə prosesi enerji baxımından əlverişsiz olduğundan özəyin böyümə prosesinin məhtudlaşması ilə nəticələnir.

7. AQM metodu ilə $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}\langle\text{Ni}\rangle$ yarımqeçiricilərinin interkalyasiyası zamanı ölçüləri $d=35 \pm 5$ nm olan, öz-özünə təşkil olunan tək, ikiləşmiş, üçləşmiş, dördləşmiş $\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ özəklərindən və nanonaqillərindən təşkil olunması təsdiqlənmişdir.

8. Skanedici elektron mikroskop vasitəsi ilə $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}\langle\text{Ni}\rangle$ səthlərində maksimal ölçüləri 0,5-0,6 mkm olan, sferik formalı $\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ tərkibli kristallitlərin mövcudluğu təsdiq olunmuşdur. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ kristallarının pilləvari laylarında özəklərin böyüməsi əsas iki proseslə müəyyənləşir: nikel ionlarının elektrik sahəsi ilə məhluldan kristalın laylarına daşınması; koalesensiya prosesi ilə özəklərin defektlərdə formalaşması.

Dissertasiya işinin əsas nəticələri aşağıdakı məqalə və tezislərdə dərc edilmişdir.

1. Abdullayev, N.M. The formation of slip band in layered crystal / N.M. Abdullayev, A.Sh. Kakhramanov, K.G. Khalilova, S.R.Azimova // AJP Fizika, - Bakı: -2018, Vol. XXIV, №4, c.3-6.
2. АЗИМОВА, С.Р. Формирование дефектов в тонких фольгах из слоистых кристаллов / С.Р.АЗИМОВА // Azərbaycan Texniki Universiteti Elmi Əsərlər jurnalı, - Bakı: - 2019, №2, c.33-37.
3. Gashimov, A.M., Azimova, S.R., Asadov, Y.G. Development of their moelectric thin films based on new nanocrystalline structures // 15th International Conference on “Technical and Physical Problems of Electrical Engineering” (ICTPE), - Turkey, Istanbul: - 2019. p.108-112.
4. Əzimova, S.R. Bi_2Se_3 birləşməsinin quruluş və diferensial termik analizi / S.R. Əzimova // Elmi Əsərlər Fundamental elmlər, AZTU, - Bakı: -2019, - №3, - s. 52-56.
5. Əzimova, S.R. Bismut selenin termik xassələri // “Maqnitiumşaq Ərintilərin İnformasiya Texnologiyalarında Və Hərbi Sənayedə Tətbiqi Perspektivləri “ Beynəlxalq Elmi-Praktik Konfrans , Memerlıq və İnşaat Universiteti , - Bakı: - 09-10 Oktyabr, - 2019. - s. 67-69.
6. Əzimova, S.R. $\text{Bi}_2\text{Se}_{0.5}\text{Te}_{2.5}$ birləşməsinin termik xassələri // Gənc Alim və Mütəxəssislərin İkinci Beynəlxalq Elmi Konfransı, AMEA, : Bakı: - 2019. -03- 06 mart , - 2020, - s. 289-291.
7. Azimova, S.R. Effect of the Se \rightarrow Te substitutions on thermal properties of binary Bi_2Se_3 semiconductor / S.R. Azimova, N.M. Abdullayev, Y.I. Aliyev [et al.] // Modern Physics Letters B, - 2020. Vol.34, №15, p.1-10.
8. Azimova, S.R. Study on the Thermodynamic Behavior of Sb-Te Binary Systems with Swift Heavy-Ions Irradiation at the High Temperatures, / S.R. Azimova, N.M. Abdullayev, Y.I. Aliyev [et al.] // Journal of the Korean Physical Society, -2020. - Vol. 77, № 3, - p.240-246.

9. Azimova, S.R. The behavior of thermodynamic kinetic on Bi_2Se_3 compound by ^{131}Xe ion implantation / S.R. Azimova, Y.I. Aliyev, D.M. Mirzayeva [et al.] // Modern Physics Letters B, -2020. Vol.34, №36, -p.1-10.
10. Azimova, S.R., Aliyev, Y.I., Abdullayev, N.M., Jabarov, S.H. Study on the thermodynamic behavior of Sb-Te binary systems at the high temperatures // 9th Rostocker International Conference “Thermophysical Properties for Technical Thermodynamics”, - Rostock, Germany: 15 October - 2020, -p. 69.
11. Əzimova, S.R. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}\langle\text{Ni}\rangle$ təbəqələrinin kristalilik və səth quruluşu /S.R.Əzimova // AJP Fizika, - Bakı: -2020, Vol.XXIV, №4, s.3-5.
12. Azimova, S.R. Thermal Properties of Bi_2Se_3 and $\text{Bi}_2\text{Se}_{0.5}\text{Te}_{2.5}$ Semiconductor compounds // Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, Физико-Технический Институт им. А.Ф. Иоффе Российской Академии Наук, “Аморфные и микрокристаллические полупроводники, Сборник трудов Международной конференции”, - Санкт-Петербург: 05-07 июля , -2021, -с. 225-226.
13. Azimova, S.R. Structural and Vibrational properties of Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 / S.R. Azimova //Advanced Physical Research, - Bakı: - 2021.Vol.3, №1,- p.46-51.
14. Əzimova, S.R. Bi_2Te_3 birləşməsinin termodinamik xassələrinə ağır ionların təsiri. // Сənc Тədqiqatçı , - Bakı, -2021. VII cild, №1, -s.25-28.
15. Əzimova, S.R., Abdullayev N.M. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ laylarında kristalilik özləklərin və nanoməftillərin formalaşma xüsusiyyətləri./ S.R.Əzimova, N.M.Abdullayev // AJP Fizika, - Bakı, -2021. XXVII cild, №4, -s.46-55.

Dissertasiyanın müdafiəsi 13 aprel 2022-ci il tarixində saat 11:00 Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya Şurasının iclasında keçiriləcək.

Ünvan: AZ 1143, Bakı şəh., H.Cavid pr., 131, e-mail: director@physics.science.az

Dissertasiya ilə Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutunun kitabxanasında tanış olmaq olar.

Dissertasiya və avtoreferatın elektron versiyaları Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutunun rəsmi internet saytında yerləşdirilmişdir.

Avtoreferat 10 mart 2022- ci il tarixində zəruri ünvanlara göndərilmişdir.

Çapa imzalanıb:19.01.2022

Kağızın formatı: A5

Həcm:39348

Tiraj:100