

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI

Əlyazması hüququnda

**ARSEN XALKOGENİDLƏRİ ƏSASINDA QEYRİ-
KRİSTALLİK SİSTEMLƏRİN QURULUŞU VƏ ELEKTRON
XASSƏLƏRİ**

İxtisas: 2220.01-Yarımqeçiricilər fizikası

Elm sahəsi: Fizika

İddiaçı: **Rəhim İbad oğlu Ələkbərov**

Elmlər doktoru elmi dərəcəsi
almaq üçün təqdim edilmiş dissertasiyanın

AVTOREFERATI

Bakı-2022

Dissertasiya işi Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutunun “Qeyri-kristallik yarımkeçiricilərin fizikası” laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir.

Elmi məsləhətçi: Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Abasət İsa oğlu İsayev

Rəsmi opponentlər: Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Tofiq Qambay oğlu Məmmədov

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Əhməd Şahvələd oğlu Abdinov

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Eldar Mehralı oğlu Qocayev

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Nizami Mikayıl oğlu Mehdiyev

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Ali Attestasiya Komissiyasının Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya şurası

Dissertasiya şurasının sədri:

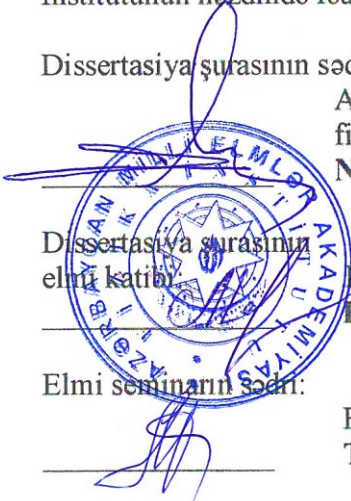
AMEA-nın həqiqi üzvü,
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Nazim Timur oğlu Məmmədov

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 aktuallığı və işlənmə dərəcəsi. Xalkogenid şüşəvari yarımkeçiricilərin (XŞY) elektromaqnit şüalanma spektrinin geniş infraqırmızı oblastında ($\lambda=1\div 12\mu\text{m}$) yüksək şəffaflığa, yüksək qeyri-xətti optik xüsusiyyətlərə, aşağı enerjili fononlara və atmosferin rütubətliliyinə qarşı stabil parametrlərə malik olması, onların mülkü və hərbi sənayenin müxtəlif sahələrində tətbiq imkanlarının yaranmasına səbəb olmuşdur. Bu maddələrin həm də orta infraqırmızı optika üçün perspektivli material olması əhəmiyyətli gələcək görmə cihazları, istilik müşahidə kameraları, gücləndiricilər, kimyəvi sensorlar kimi mühüm qurğularda uğurlu alternativ tətbiq imkanlarının meydana gəlməsinə zəmin yaratmışdır.

İlk elmi əsası Ovşinski tərəfindən qoyulan dəyişən-faza keçidli xalkogenid şüşəvari maddələrin yaddaş elementləri kimi tətbiq olunma ideyası son on illər ərzində uğurlu inkişaf etdirilərək müəyyən olunmuşdur ki, məlumatların saxlanması və tutumu, faza-keçidinin sürətliliyi, enerji səmərəliliyi və s. xüsusiyyətləri ilə onların əsasında hazırlanan elektrik yaddaş elementləri optik elementlər ilə müqayisədə daha üstün keyfiyyətlərə malikdir. Belə xaotik dəyişən-faza keçidli xalkogenid şüşəvari maddələrin ($\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$) istifadə olunduğu yaddaş texnologiyaları əsasında <500 piko- saniyələr ərzində 10^8 dəfədən çox informasiyanın təkrar yazılmasına imkan verən yaddaş elementlərinin hazırlanmasının mümkünlüyü və maliyyə dəyərinin nisbətən aşağı olması, onların qeyri-xətti elektrik xarakteristikalarına malik yaddaş elementlərinə (Flash kartlar) alternativ namizəd kimi, təqdim olunmasına səbəb olmuşdur. XŞY maddələrdə zəif intensivlikli lazer şüalanmasının təsiri ilə sərbəst elektron halları sıxlığının kəskin artması və müqavimətin kəskin azalması ilə müşayiət olunan amorf faza halından polikristal hala keçidin və eləcə də təkrar bərpa olunan sürətli əks faza keçidinin müşahidə olunması, onlardan təkrar informasiya yazılması (və əksinə pozulması) imkanlarına malik optik CD-RW və DVD-RW disklərin hazırlanmasına imkan verir.

Mövcud tədqiqatların kompleks təhlili göstərir ki, XŞY maddələrin optik şəffaflıq diapazonunun genişlənməsini, fononların enerjisinin azalmasını və qeyri-xətti optik xassələrini

məhdudlandıran şərtlər (kristallarla müqayisədə mexaniki xassələrin pisləşməsi, düzgün kimyəvi rəbitəliliyin və davamlılığın pozulması) onların kimyəvi tərkibindən müstəsna dərəcədə asılıdır. Binar xalkogenid şüşələr (As_2S_3 , As_2Se_3 , GeS_2 , $GeSe_2$) əsasında uyğun olaraq minimal optik itkiyə və nisbətən geniş optik şəffaflıq oblastına malik fiberlər hazırlanmasına baxmayaraq, onların kristallaşmaya meyilliyi, nisbətən üstün fonon qarşılıqlı təsirinə (üç və daha mürəkkəb komponentli xalkogenid şüşələrlə müqayisədə), aşağı şüşələşmə temperaturuna və kimyəvi davamlılığa, zəif qeyri-xətti optik xüsusiyyətlərə malik olması uğurlu tətbiq imkanlarını məhdudlaşdırır. Xalkogenid şüşəvari maddələrə məxsus Rentgen, neytron şüalarının difraksiya səpilməsi intensivliyinin paylanmasında müşahidə olunan birinci kəskin difraksiya pikləri (BKDP) və Raman səpilməsinin aşağı tezliklər (akustik tezliklər) oblastında müşahidə olunan “bozon piki” lokal quruluşun orta nizamlılığı ilə əlaqələndirilsə də, onların təbiəti və yaranma mexanizmlərini şərh edən mühakimələr elmi müzakirə mövzusu olaraq qalmaqdadır və ciddi eksperimentlərin aparılmasını tələb edir.

Qeyri-kristal yarımkeçirici (QKY) maddələrin tətbiq oblastlarının kifayət qədər geniş olduğuna baxmayaraq, onlarda baş verən elektron və digər fiziki proseslərin mexanizmi hələ də tam aydınlaşdırılmamışdır və bəzi fiziki hadisələr üçün təklif olunan mexanizmlərin digər proseslərə tətbiqi müəyyən uğursuzluqlarla müşayiət olunur. Kristal yarımkeçiricilər üçün mövcud olan nəzəriyyələr QKY maddələrdə baş verən hətta çox sadə proseslərin, məsələn, aşqarların keçiriciliyə, Fermi səviyyəsinin vəziyyətinə təsiri, keçiriciliyin tipi və s. proseslərin mexanizmini izah edə bilmir.

QKY maddələr kristallardan ilk öncə onlarda kristallara məxsus uzaq nizamın, yəni atomların düzülüşündə transilyasiya simmetriyasının olmaması ilə fərqlənir. Lakin qeyd olunan fakt, onlarda ümumiyyətlə tam nizamsızlığın mövcudluğu kimi qəbul edilə bilməz. QKY maddələrdə kristallarda mövcud olan yaxın nizam-birinci koordinasiya sferasını əhatə edən oblastlarda mövcud olan qanunauyğunluqlar-koordinasiya ədədi, kimyəvi rəbitələrin növləri və uzunluğu, rəbitə bucağı cüzi fərqlənmə ilə saxlanılır. A.F.İoffe tərəfindən irəli sürülən ideyaya görə maddənin əsas

fundamental xassələri atomların düzülüşündəki mövcud olan uzaq nizamla deyil, məhz yaxın nizamla təyin olunur. Ona görə də, QKY maddələrin qeyd olunan xassələri kristallara yaxın olmalıdır. Bilavasitə elektronların hərəkətinin və elektron keçidlərinin idarə olunmasında həlledici rol oynayan elektronların enerji spektri və hal sıxlığı QKY maddələrdə kristallarda olduğu kimidir, yəni icazəli zonalar bir-birindən qadağan olunmuş zona ilə ayrılır, lakin onlarda identik olaraq kristallardakı zona quruluşu təkrar olunmur. Yaxın nizam parametrlərindəki cüzi fərq və quruluşdakı defektlər icazəli zonaların kənarlarının yayılmasına, qadağan zona daxilində isə enerjiyə görə paylanmış lokal halların yaranmasına səbəb olur.

Son onilliklər ərzində müşahidə olunan təcrübi faktlar - neytronların, Rentgen şüalarının difraksiyasında müşahidə olunan birinci kəskin difraksiya piki (BKDP), Raman səpilməsinin aşağı tezliklər (akustik tezliklər) oblastında müşahidə olunan bozon piki (BP) və s. birinci koordinasiya sferasından kənarında, bir neçə koordinasiya sferasını əhatə edən oblastlarda da atomların düzülüşündə müəyyən korrelyasiyanın mövcudluğu ilə əlaqələndirilmişdir. Orta nizam oblastı adlanan həmin oblast kristallardakı elementar qəfəs kimi qəbul edilir və maddənin optik, elektrik xassələrinin idarə edilməsində həlledici rol oynayır. Beləliklə, QKY maddələrin yaxın nizam və orta nizam tərtibli lokal quruluş xüsusiyyətləri onlarda baş verən elektron proseslərinin və fiziki parametrlərin idarə olunmasında mühüm rol oynayır.

Qeyd olunanları nəzərə alaraq, belə qənaətə gəlmək olar ki, QKY maddələrin tətbiq oblastlarının genişləndirilməsi və onların əsasında hazırlanan müxtəlif təyinatlı cihazların parametrlərinin yaxşılaşdırılması kimi problemlərin həlli, ilk növbədə yaxın və orta nizam parametrləri ilə fərqlənən maddələrin alınması, onların lokal quruluşunun və fiziki xassələrinin kompleks tədqiqi ilə həyata keçirilə bilər. Belə tədqiqatlar eyni zamanda QKY maddələrdə baş verən elektron, optik və digər fiziki proseslərin mexanizmi haqqında müəyyən informasiyalar almağa imkan verir.

Qeyd olunan istiqamətdə aparılan tədqiqatlar üçün müxtəlif fiziki parametrlə elementlərdən ibarət üç və daha çox komponentli QKY maddələrin seçilməsi ilə obyektin yaxın nizam parametrlərinin

variasiyasına və fiziki xassələrinin idarə olunmasına nail olmaq mümkündür. Digər tərəfdən aşqarlama ilə də, maddələrin fiziki parametrlərinin qiymətinə təsir etmək mümkündür.

Beləliklə, yüksək fətohəssaslığa, qeyri-xətti optik xassələrə, optik spektrin yaxın, orta infraqırmızı oblastlarında yüksək şəffaflığa, aşağı enerjili fononlara, yüksək optik sındırma əmsalı və şüşələmə temperaturuna, sadə alınma texnologiyasına və kimyəvi davamlılığa, stabil fiziki parametrlərə, məhdudiyətsiz aşqarlanma imkanlarına malik arsen xalkogenidləri əsasında nisbətən mürəkkəb tərkibli xalkogenid şüşələrin alınması və onların lokal quruluş xüsusiyyətlərinin müasir təcrübi üsulların (neytron-difraksiya səpilməsi, Raman spektroskopiyası, atom qüvvə mikroskopiyası, kiçik bucaq altında neytron səpilməsi, diferensial skanəedic kalorimetriya) və modelləşmələrin tətbiqi ilə sistemli araşdırılması elmi və praktiki baxımdan böyük aktuallıq kəsb edir.

Son illərin tədqiqatları göstərir ki, arsen xalkogenidləri əsasında qeyri-kristal maddələrdə kimyəvi tərkibdən asılı olaraq quruluşun modifikasiyasına nail olmaqla, yaxın nizam və bir neçə koordinasiya sferasını əhatə edən orta nizam quruluşunun təbiətini, xüsusiyyətlərini və onların elektron xassələrlə əlaqəsini aydınlaşdırmağa imkan verən tədqiqatların aparılması yarımkeçiricilər fizikasında mühüm əhəmiyyət daşıyır.

Tədqiqatın obyektı və predmeti:

Tədqiqatın obyektı arsen xalkogenidləri əsasında As_xSe_{100-x} , $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$ at%), $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=33,3$; $y=33,3$ at%) qeyri-kristal sistemləri, predmeti isə qeyd olunan maddələrin quruluşunun və elektron xassələrinin tədqiqatıdır.

Tədqiqatın məqsədi və vəzifələri:

İşin məqsədi arsen xalkogenidləri əsasında şüşəvari yarımkeçiricilərdə lokal quruluşun təbiətinin, yaxın və orta nizam parametrləri ilə optik və digər fiziki xassələr arasında korrelyasiyanın, kimyəvi tərkibin və nadir torpaq elementləri ilə aşqarlanmanın lokal quruluşa və elektron proseslərinə təsir mexanizminin müəyyənləşdirilməsi, stabil fiziki parametrlərə, yüksək kohersiv enerjiyə, optik sındırma əmsalına, geniş temperatur

intervalında idarə olunan şüşələşmə temperaturuna malik, optoelektronika üçün perspektivli materialların alınmasıdır.

Bu məqsədə nail olmaq üçün:

- Fırlanan soba üsulu ilə izostatik şüşə hallarına uyğun As_xSe_{100-x} , $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$ at%), qismən elastik şüşə halına uyğun $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=33,3$; $y=33,3$ at%) və həmin maddələrin Sm, Dy-ionları ilə aşqarlanmış tərkibləri sintez olunmuşdur;
- Neytron,- Rentgen-difraksiya səpilməsinin və şüşələşmə prosesinin tədqiqi üçün toz halında ($m=3\div 4$ q, $m=15$ mg) nümunələr, atom qüvvə mikroskopiyası (AQM) və optik eksperimentlərin aparılması üçün vakuumda termik çökdürmə üsulu ilə $d=2\div 10$ mk qalınlıqlı nazik təbəqələr alınmışdır;
- Neytron-difraksiyası tədqiqatlarının nəticələrinə əks Monte-Karlo (ƏMK) modelləşməsi tətbiq olunaraq amorf matrisada atomların məskunlaşmasının yaxın və orta nizam sərhədləri və onların kimyəvi tərkibdən, rabitələrin növündən asılılıq xüsusiyyətləri kompleks şəkildə tədqiq olunmuşdur;
- Neytron-difraksiya səpilməsinin nəticələrinə ƏMK modelləşməsi tətbiq olunaraq, müxtəlif tərkiblər üçün amorf matrisanın qurulmasında homeo- və heteropolyar rabitələrin rolu nəzərə alınmaqla, yekun və orta koordinasiya ədədlərinin kimyəvi tərkibdən asılılığı müəyyənləşdirilmiş və alınan nəticələr Mottun 8-N qaydasını nəzərə almaqla araşdırılmışdır;
- ƏMK modelləşməsi ilə 3D-atomar və ya molekulyar konfigurasiyada binar As_xSe_{100-x} , As_xTe_{100-x} və üç komponentli $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$ at%) amorf maddələrinin matrisasını əmələ gətirən piramidal ($AsSe_3$, $AsTe_3$) və digər quruluş elementlərinin mövcudluğu sübut olunmuş, lokal quruluş xüsusiyyətləri Raman spektroskopiyası və cüt parsial korrelyasiya funksiyalarının ($g(r)$) müqayisəli tədqiqi ilə müəyyən olunmuşdur;
- BKDP-nin təbiəti neytron difraksiyasının nəticələrinə ƏMK modelləşməsi tətbiq olunmaqla boşluq-klaster modelinə əsasən araşdırılmışdır;

- BP-nin təbiəti aşığı tezlikli Raman spektroskopiyası və neytron-difraksiyasının nəticələrinin müqayisəli təhlili əsasında araşdırılmışdır;
- Amorf matrisada mövcud olan, qeyri-bircins paylanmış səpici mərkəzlərin təbiəti kiçik bucaq altında neytron səpilməsi (KBANS) üsulu ilə tədqiq olunmuş və fraktal quruluşun xarakteristik ölçülərinin (D_s), Porod əmsalı (n) və sabitinin (K), mono-dispers zərrəciklərin həndəsi ölçülərinin (r_0) ədədi qiymətləri hesablanmışdır;
- Amorf təbəqələrdə AQM üsuluna əsasən səthin morfologiyasını müəyyələşdirən nəticələr ilə, kiçik bucaq altında neytron səpilməsinin nəticələri arasında korrelyasiyaların mövcudluğu müəyyənəşdirilmişdir;
- Diferensial skanedic kalorimetriya (DSK) üsulu ilə şüşələşmə prosesi tədqiq olunaraq şüşələşmə temperaturu (T_g), maddənin sıxlığı(ρ), amorf matrisanın fiziki, kimyəvi və lokal quruluşunu xarakterizə edən termodinamik və digər parametrlər arasındakı korrelyasiyalar müəyyənəşdirilmişdir;
- Tədqiq olunan xalkogenidlərin optik udulma əmsalının (α) zəif, Urbax və üstü asılılıq oblastlarında spektral paylanma xüsusiyyətlərinin, Taus qanununa əsasən və empirik yolla təyin olunan qadağan olunmuş zonanın optik eninin (E_g) tərkibin modifikasiyasından asılılığı müəyyən olunmuşdur;
- Urbax udulmasının təbiəti və onun elektron-fonon qarşılıqlı təsirləri ilə əlaqələri araşdırılmışdır;
- İzostatik şüşə hallarına uyğun As_xSe_{100-x} , $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$ at%) tərkiblərində optik əmsalların (n -sındırma və k -ekstinksiya), ossilyator və dispersiya (E_0 , E_d) enerjilərinin tərkibin modifikasiyasından asılılığı Swanpoel və tək ossilyator modelinə əsaslanaraq tədqiq olunmuşdur;
- Arsen xalkogenidləri əsasında sendviç quruluşlu $Al-As_xSe_yS_{100-x-y}$ -Te, $Al-As_xSe_yS_{100-x-y}$ -Te ($x=33,3$; $y=33,3$ at%) rütubət sensorları hazırlanaraq, kontakt potensiallar fərqlinin nisbi rütubətdən, zamandan, termik işlənmədən, daxil edilən aşqarın təsirindən asılılıqları öyrənilmişdir.

Tədqiqat metodları:

Aparılan tədqiqatlarda arsen xalkogenidləri əsasında qeyri-kristal sistemlərin quruluşu və elektron xassələri neytron-difraksiya səpilməsi, KBANS, Rentgen şüalarının difraksiyası, Raman spektroskopiyası, AQM, optik spektroskopiya, DSK təcrübi üsulları və ƏMK modelləşməsi tətbiq olunmuşdur.

Müdafiyyə çıxarılan əsas elmi müddəalar:

1. Neytron şüalarının səpmə qabiliyyətini xarakterizə edən, lokal quruluşu haqqında məlumat əldə etməyə imkan verən quruluş əmsalının spektral paylanma qrafikində səpilmə vektorunun $Q \sim 1 \div 1.5 \text{ \AA}^{-1}$ qiymətləri oblastında birinci kəskin difraksiya pikinin müşahidə olunması;
2. Parsial korrelyasiya funksiyalarının radial paylanma mənzərəsində orta nizam oblastının mövcudluğu ilə əlaqələndirilən təkrarlanan zolaqların müşahidə olunması;
3. Raman səpilmə spektrinin aşağı akustik tezliklər oblastında müşahidə olunmaqla lokal quruluşun orta nizamlılığının xüsusiyyətlərini və törənmə mexanizmlərini aydınlaşdırmağa imkan verən və parametrləri kimyəvi tərkibin modifikasiyası ilə idarə oluna bilən bozon pikinin mövcudluğu;
4. Tədqiq olunan maddələrin sıxlıqlarının təcrübi qiymətləri, atomar həcmnin orta qiyməti (V_a), qablaşma sıxlığı (κ), koordinasiya ədədinin orta qiyməti (Z), orta rabitə və kohersiv enerji kimi fiziki parametrlərin qiymətləri arasındakı korrelyasiya;
5. Şüşələşmə temperaturunun hesablanan və təcrübi qiymətləri arasındakı uyğunluq;
6. Tədqiq olunan xalkogenid şüşələrin binar birləşmələrindən çox komponentli tərkiblərinə doğru elektron-fonon qarşılıqlı təsir intensivliyinin yüksəlməsi və onun amorf matrisanın nizamsızlıq dərəcəsinin yüksəlməsi ilə izahı;
7. Kiçik bucaq altında neytron-difraksiya səpilməsi zamanı müşahidə olunan Porod qanunauyğunluğu və onun sayəsində aşkar olunan qeyri-bircins paylanmış səpici mərkəzlərin mövcudluğu və quruluşun fraktal təbiəti;
8. Zəif ətalətliliyə malik, həssaslığı müxtəlif modifikatorların təsiri ilə məxsusi yüklü defektlərin (D^+ və D^-) konsentrasiyasını

dəyişməklə idarə olunan sendviç quruluşa malik $\text{Al-As}_x\text{Se}_y\text{S}_{100-x-y}\text{-Te}$, $\text{Al-As}_x\text{Se}_y\text{Te}_{100-x-y}\text{-Te}$ ($x=33,3$; $y=33,3$ at%) rütubət sensorları.

Tədqiqatın elmi yeniliyi:

1. Üçkomponentli xalkogenid şüşələrə məxsus yekun və parsial quruluş əmsallarının spektrlərinin $Q \sim 1 \div 1.5 \text{ \AA}^{-1}$ oblastında müşahidə olunan birinci kəskin difraksiya pikinin parametrlərinə əsasən yaxın və orta nizam oblastlarının həndəsi ölçüləri təyin olunmuşdur;
2. Parsial və yekun quruluş əmsallarının səpilmə vektorundan asılılıqlarının, korrelyasiya funksiyalarının ($g_{ij}(r)$, $g(r)$) radial paylanma xüsusiyyətlərinin tədqiqi nəticəsində orta nizam oblastının əmələ gəlməsində Se-Se və As-Se rabitələrinin həlledici rol oynadığı müəyyənləşdirilmişdir;
3. Neytron-difraksiya səpilməsindən alınan təcrübi nəticələrə əks Monte-Karlo modelləşməsinin tətbiqi ilə təyin olunan parsial koordinasiya ədədləri, atomların ən yaxın qonşularının orta sayı, yekun və orta koordinasiya ədədlərinin məxsusi qiymətlərinin $8-N$ qaydasının tələblərinə uyğunluğu xaos (təsadüfi) kovalent şəbəkə modeli çərçivəsində təsvir olunmuşdur;
4. Müəyyən olunmuşdur ki, izostatik şüşə halına uyğun ($Z=2,4$) $\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{S}_{30}$ sistemindən qismən elastik şüşə halına məxsus $\text{As}_{33,3}\text{Se}_{33,3}\text{S}_{33,4}$ tərkibinə keçdikdə qablaşma sıxlığının, kompaktlığın nəzərə çarpan səviyyədə azalması, quruluşun nizamsızlıq dərəcəsinin artması xalkogen atomları arasında homeopolyar rabitələrin faiz nisbətinin artması nəticəsində yeni molekulyar fraqmentlərinin yaranması ilə əlaqədardır;
5. Tellur atomlarının miqdarı çox olan tərkiblərdə qeyri-bircins oblastların həndəsi ölçülərinin və kontrastın kiçilməsi, hündürlüyün paylanma histoqramının asimmetriyasını xarakterizə edən səthin asimmetriya əmsalının mənfi qiymət alması, monodispers qeyri-bircins oblastların həndəsi ölçülərinin nəzərə çarpan dərəcədə azalması, nisbətən aşağı enerjili homeopolyar rabitələrin (As-As və Te-Te) hesabına lokal quruluşun defektliliyinin və nizamsızlıq dərəcəsinin artması ilə izah olunmuşdur;

6. Kükürd atomlarının əlavə konsentrasiyası olan tərkiblərdə qeyri-bircins oblastların həndəsi ölçülərinin artması, Porod əmsalının qismən azalması, səthin asimmetriya əmsalının müsbət qiymətə malik olması və səthin ekssesliyinin $K > 3$ şərtini ödəməsi nəticəsində Qaus paylanmasına nəzərən orta xətdən aşağıda məskunlaşan lokal minimumların konsentrasiyasının üstünlük təşkil etməsi kükürd atomlarının kimyəvi aktivliyi və amorf matrisanın kohersiv enerjisini artırması ilə izah olunmuşdur;
7. Tədqiq olunan tərkiblərin kohersiv enerjisi, orta rabitə enerjisi, qadağan zonanın optik eni kimi fiziki parametrlərinin selenin qismən kükürlə əvəz olunması nəticəsində artması, tellurla əvəz olunma nəticəsində azalması müəyyən olunmuşdur və qeyd olunan parametrlərdə müşahidə olunan dəyişmələr həmin elementlərin fərqli kimyəvi aktivlikləri sayəsində amorf matrisanı əmələ gətirən kimyəvi rabitələrdə və quruluş elementlərində baş verən dəyişmələrlə əlaqələndirilmişdir;
8. Göstərilmişdir ki, tellur atomları ilə zəngin olan nümunələrdə maddənin nizamsızlıq dərəcəsini əks etdirən Urbax enerjisinin qiymətinin daha yüksək olması σ^* -orbitalları və Te–Te, Se-Te rabitələrinə məxsus LP-orbitalların selenin yürüklük aralığına düşməklə, lokal halların konsentrasiyasının artmasına və qadağan olunmuş zonanın kiçilməsinə səbəb olur;
9. Raman spektroskopiyası üsuluna əsasən müəyyən olunmuşdur ki, elektron-fonon qarşılıqlı təsirinə uyğun fononların effektiv enerjisinin ($\hbar\omega_p$) tellur tərkibli nümunərdə nisbətən aşağı olması daha aşağı enerjili As-Te(32,7 kcal/mol), Se-Te(40,8 kcal/mol), Te-Te(33 kcal/mol) rabitələrinin və atomların məskunlaşmasında təzahür edən quruluş nizamsızlığının mövcudluğu ilə bağlıdır;
10. Elektron-fonon qarşılıqlı təsirini xarakterizə edən σ_0 – parametrinin qiymətinin binar As_xSe_{100-x} ($x=40$ at%) tərkiblə müqayisədə üçkomponentli nümunələr üçün aşağı olması çoxkomponentli xalkogenid şüşələrdə elektron-fonon qarşılıqlı təsirinə daha yüksək intensivliyə malik olması ilə əlaqələndirilmişdir;

11. As_xSe_{100-x} , $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$ at%), $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=33,3$; $y=33,3$ at%) nümunələrində diferensial skanedici kalorimetriya üsulu ilə şüşələşmə temperaturunun təcrübədən təyin olunan və empirik hesablanan qiymətlərinin bir-birinə yaxın olması sübut olunmuşdur. Selenin qismən kükürd atomları ilə əvəz olunması şüşələşmə temperaturunun, orta rabitə enerjisinin və kohersiv enerjisinin artması, tellurla əvəzləmə isə onların qiymətlərinin azalması, kükürd (S) atomlarının iştirakı olan rabitələrin daha böyük, tellurla bağlı rabitələrin isə aşağı enerjiyə malik olması ilə əlaqədardır.

Tədqiqatın nəzəri və praktiki əhəmiyyəti:

Dissertasiya işində alınan nəticələr müxtəlif binar və çoxkomponentli xalkogenid şüşəvari yarımkeçiricilərin lokal quruluşunun formalaşmasının və elektron xassələrinin mexanizmlərinin müəyyənləşdirilməsində istifadə oluna bilər;

Xalkogenid şüşəvari yarımkeçirici (XŞY) As_xSe_{100-x} , $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$ at%), $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=33,3$; $y=33,3$ at%) tərkibli spektrin infraqırmızı oblastında yüksək şəffaflığa, yüksək qeyri-xətti optik xüsusiyyətlərə, aşağı enerjili fononlara malik olub, orta infraqırmızı optikanın perspektivli materialı olaraq, müşahidə kameralarında, gücləndiricilərdə, sensorlarda və lifli optik ötürücülərdə tətbiq oluna bilər.

Aprobasiyası və tətbiqi:

Dissertasiyanın nəticələri aşağıdakı elmi konfranslarda məruzə edilmişdir:

- Proc. SPIE Proceedings “Reflection, Scattering and Diffraction from Surfaces” (California, USA, 2014) Beynəlxalq Konfransı;
- “Kondensə olunmuş hal fizikası”na həsr olunmuş 7-ci Beynəlxalq Konfrans (Kişinyov, 2014);
- “Amorf və Nanoquruluşlu Xalkogenidlər” haqqında 7-ci Beynəlxalq Konfrans (Rumıniya Respublikası, Cluj-Napoca, 2015);

- “Elmi materiallar və Kondensə olunmuş materialların fizikası”na həsr olunmuş 8-ci Beynəlxalq Konfrans (Moldova Respublikası, Kişinyov, 2016);
- “Amorf və Nanoquruluşlu xalkogenidlər” haqqında 8-ci Beynəlxalq Konfrans (Rumıniya Respublikası, Sinaia, 2017);
- Akademik H.B. Abdullayevin 100 illiyinə həsr olunmuş “Kondensə Olunmuş Maddələr Fizikasında Müasir İstiqamətlər” (MTCMP-2018, Bakı, Fizika İnstitutu) Beynəlxalq Konfransı;
- Amorf və mikrokristallik yarımkeçiricilərə dair 11-ci Beynəlxalq Konfrans (Sankt-Peterburq, 2018);
- “Elektrik mühəndisliyinin fiziki və texniki problemlərinə” (Naxçıvan Dövlət Universiteti, 2018) həsr olunan XIV Beynəlxalq Konfrans;
- “Amorf və Nanoquruluşlu xalkogenidlər” haqqında 9-cu Beynəlxalq Konfrans (Moldova Respublikası, Kişinyov, 2019);
- "Üzvü və Qeyri Üzvü Materiallarda Elektron Proseslər" haqqında XII Beynəlxalq Konfrans (ICEPOM-12, Kamianets-Podilsky, Ukraine, 2020);
- Amorf və mikrokristallik yarımkeçiricilərə dair XII Beynəlxalq Konfrans (Sankt-Peterburq, 2021).

Dissertasiya işinin mövzusunə dair yerli və xarici elmi nəşrlərdə 31 elmi əsər çap olunmuşdur. Bunların 20-i məqalə 11-i isə konfrans materialıdır.

Dissertasiya işinin yerinə yetirildiyi təşkilatın adı:

Dissertasiya işi Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutunda yerinə yetirilmişdir.

Dissertasiyanın strukturu və həcmi:

Dissertasiya işi girişdən, doqquz fəsildən, nəticələrdən və 268 adda istinad edilmiş ədəbiyyatın biblioqrafik siyahısından ibarət olmaqla, 362 səhifədə şərh olunmuşdur. Dissertasiya işində 148 şəkil, 29 cədvəl vardır. Şəkillər, cədvəllər və istinad edilmiş ədəbiyyat siyahısı istisna olmaqla, giriş 33421, I fəsil 87421, II fəsil 23141, III fəsil 36582, IV fəsil 54367, V fəsil 52638, VI fəsil 39470, VII fəsil 9317, VIII fəsil 66812, IX fəsil 30437, nəticələr 4270, ixtisarlar və şərti işarələr isə 2498 işarədən ibarətdir. Dissertasiya işinin ümumi həcmi 440374 işarədən ibarətdir.

DİSSERTASIYANIN ƏSAS MƏZMUNU

Girişdə dissertasiya işinin mövzusunun aktuallığı əsaslandırılmış, işin məqsədi, elmi yeniliyi, praktiki əhəmiyyəti göstərilmiş, müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar, aprobasiya dərəcəsi, nəşrlər barədə məlumat verilmiş, həmçinin fəsilər üzrə əsas məzmunu qısaca şərh olunmuşdur.

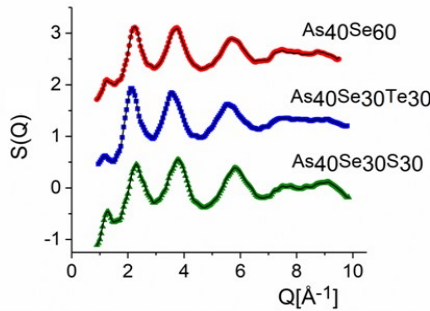
Birinci fəsil neytron-difraksiya səpilməsi üsulu ilə izostatik $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ və qismən elastik şüşə halına uyğun $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ tərkibli maddələrin lokal quruluş xüsusiyyətlərinin kompleks şəkildə tədqiqinə həsr olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, xalkogenid şüşəvari maddələrdə baş verən fiziki proseslərin mexanizmləri və onların makroskopik xassələri mikroquruluşun xüsusiyyətləri ilə, yəni atomların yerləşməsində təzahür olunan yaxın və orta nizamın xüsusiyyətlərini nəzərə alaraq izah etmək mümkündür. Məlumdur ki, mövcud ənənəvi tədqiqatların köməyi ilə lokal quruluş və habelə amorf matrisanın qurulmasında müxtəlif rabitələrin (homeopolyar və heteropolyar) nisbi payının, rolunun müəyyənləşdirilməsi zamanı ziddiyyət doğuran mühakimələrin irəli sürülməsi, onların fiziki xassələrinin izahı və tətbiq sahələrinin müəyyən olunması üçün dəqiq mühakimə və mexanizmlərin verilməsi elmi ədəbiyyatda öz həllini tapmadığından ciddi problem olaraq qalırdı. Yəni son onilliklər ərzində xalkogenid şüşəvari maddələr üzərində aparılan Rentgen, neytron şüalarının difraksiya tədqiqatları göstərdi ki, difraksiya səpilməsi intensivliyinin paylanmasında digər piklərdən fərqli dar enliyə malik, vəziyyəti, intensivliyi, temperaturdan və təzyiqdən fərqli funksional asılılığa malik pik müşahidə olunur. Bu pik birinci kəskin difraksiya piki (BKDP) adlandırılaraq orta nizamın varlığı ilə əlaqələndirilir. Onun intensivliyinin temperaturdan asılılığı normal Debye-Waller qanunauyğunluğuna tabe olmur. Yəni kristal maddələr üçün uğurlu tətbiq olunan normal Debye-Waller asılılığına əsasən temperaturun artması ilə digər piklərin intensivliyi azaldığı halda, BKDP pikinin intensivliyi artır. Digər anomal xüsusiyyətin mənzərəsi təzyiğin təsiri ilə də, aydın surətdə öz əksini tapmışdır. Təzyiğin artması nəticəsində digər piklərdən fərqli olaraq BKDP-nin intensivliyi kəskin olaraq azalır,

vəziyyəti isə nisbətən səpilmə vektorunun (Q) böyük qiymətlərinə doğru sürüşür. Digər tərəfdən bu pikə məxsus parametrlər və o cümlədən orta nizam quruluşu daha çox kimyəvi tərkibin dəyişməsinə həssasdır. Tədqiqatlar göstərdi ki, orta nizamın lokal quruluşda yaxın nizam konsepsiyası ilə təsvir olunması praktiki olaraq mümkün deyildir. Buna görə ki, qeyd olunan konsepsiya yaxın nizam oblastlarının bir-biri ilə hansı şəkildə əlaqəli olması haqqında məlumat əldə etməyə imkan vermir. Elmi ədəbiyyatda QKY maddələrin lokal quruluşunun təbiəti haqqında müxtəlif modellər mövcuddur. Bunlardan mikrokristal, klaster, Lukovski, Elliott modellərini göstərmək olar. Mikrokristal modelinə görə qeyri-kristal material xaotik şəkildə oriyentasiya olunmuş nizamlı quruluşa malik oblastlardan ibarətdir. İlkin olaraq hesab olunurdu ki, həmin mikrokristal oblastların ölçüsü təqribən 300 Å-ə qədərdir. Lakin təcrübələr göstərdi ki, bircins qeyri-kristal maddələrdə 15-20 Å-dən böyük ölçülü mikrokristal oblastlar mövcud deyil. Digər tərəfdən də kiçik ölçülü mikrokristalların mövcudluğunu təsdiq edən birbaşa sübutlar da yoxdur. Buna görə də, qeyri-kristal maddələrin quruluşunun mikrokristal yaxınlaşma ilə izahı çətinlik törədir. Mikrokristal oblastların mövcudluğu mümkün olmayan mayələrdə də orta nizamlığın varlığı bu modelin həqiqətə uyğun olmadığını sübut edən mühüm fakt kimi qəbul edilməlidir. Tetraedrik koordinasiyalı qeyri-kristal materiallar üçün klaster modeli təklif olunaraq göstərilmişdir ki, qeyri-kristal material təqribən 100 atomdan ibarət olan ayrı-ayrı klasterlərdən ibarətdir. Klasterlər arasındakı sərhdələrin təsiri nəzərə alınmadığındanbu model də, qeyd olunan problemi həll etmədi. Lukovski modelinə görə orta nizam rabitə bucaqlarının qanunauyğun şəkildə paylanması ilə müəyyən olunur. Bu halda yalnız bir molekula (zəncir və ya həlqəvi) aid olan atomlar orta nizam hesab olunur. Lakin seçilmiş mərkəzi atomdan kiçik məsafədə yerləşən digər molekulun atomu orta nizamın oblastına daxil olunmur. Bu modellər sırasında nisbətən təkmil olanı Elliott modelidir. Elliotta görə orta nizam oblastını üç səviyyəyə bölmək olar. 1-ci orta nizamın lokal və ya yaxın orta nizam oblastı (qonşu quruluş elementlərinin qarşılıqlı yerləşməsi) adlandırılır və təqribi ölçüsü 5 Å-dən böyük deyildir. Yəni yaxın orta nizam oblastı

polihedral koordinasiya arasındakı əlaqə növünü təsvir edir. 2-ci orta nizamın orta oblastı (klasterlərin qarşılıqlı yerləşməsi) olub, ölçüsü $\sim 5 \div 8$ Å intervalında dəyişir. Elliott modelinə görə bu oblast qonşu rabitələrin üstünlüyə malik dihedral bucaqları arasındakı korrelyasiyalarla və ya bir-biri ilə əlaqəli olan polihedrlər arasındakı korrelyasiyalarla əlaqələndirilə bilər. Nəhayət, ölçüləri $8 \div 20$ Å intervalında dəyişən orta nizamın uzaq oblastı kovalent rabitəli amorf şəbəkənin nizamlı oblastları ilə əlaqələndirilmişdir. Son illərin xalkogenid şüşələrə həsr olunan məqalə və digər elmi əsərlərində $20 \div 30$ Å intervalını əhatə edən orta nizamın törənmə mexanizminin aşkar şəkildə məlum olmadığı göstərilir.

Qeyd olunan problemin həlli daha çox informasiya tutumlu müasir tədqiqat üsullarından istifadə etməyi zəruri edir. Bu məqsədlə dissertasiyanın birinci fəslində müəyyən olunmuşdur ki, tədqiq olunan maddələrdə neytron-difraksiya səpilməsinin tədqiqi və alınan təcrübə faktlarına ən müasir komputer modelləşmə proqramlarının (The soft ware package RMC⁺⁺ [<http://www.szfk.hu/~nphys/rmc++/opening.html>]) tətbiqi binar və mürəkkəb tərkibli (3, 4 və s. komponentli) xalkogenid şüşəvari yarımkəçiricilərin lokal quruluşu və o cümlədən onların atomlarının yerləşməsindəki yaxın və orta nizam düzülüşü haqqında dolğun informasiya əldə etməyə imkan verir.

Şəkil.1-də $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$ və $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ tərkiblərində neytron difraksiyası səpilməsindən alınan quruluş əmsallarının ($S(Q)$) səpilmə vektorundan (Q) spektral asılılıqları təsvir olunmuşdur.



Şəkil 1. Müxtəlif tərkibli arsen xalkogenidlərində quruluş əmsalının səpilmə vektorundan asılılığı.

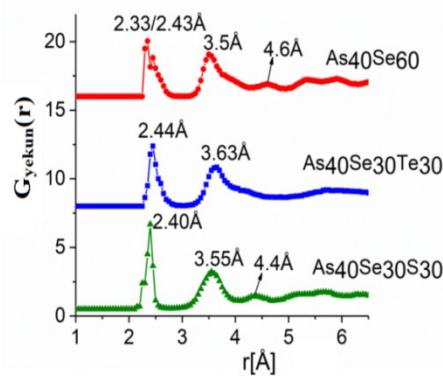
Burada Q-səpilmə hadisəsini xarakterizə edib, nüvənin üzərinə düşən və səpilən neytronların dalğa vektorlarının fərqi ilə təyin olunur. $S(Q)$ -quruluş faktoru adlanır və hər bir atomun üzərinə düşən neytron şüalarını səpmə qabiliyyətini xarakterizə edib, amorf sistemin dinamikası və lokal quruluşu haqqında məlumat əldə etməyə imkan verir. Göründüyü kimi, təsvir olunan hər 3 spektr arasında nəzərəçarpan oxşarlıqlar mövcuddur. Şəkil1–dən göründüyü kimi quruluş əmsalının ($S(Q)$) səpilmə vektorundan (Q) asılılığını təsvir edən bütün spektrlərdə Q -nün qiymətlərinin $1,2 \div 1,3 \text{ \AA}^{-1}$ intervalında BKDP müşahidə olunur. Parsial quruluş əmsallarının tədqiqi zamanı bütün spektrlərdə əsasən As-As, As-Se, Se-Se atom cütlərinə məxsus BKDP müşahidə olunmuşdur. Bu nəticələr birmənalı olaraq göstərir ki, bütün tərkiblər üçün Se-Se atom cütlərinə məxsus spektrdə BKDP-nin daha parlaq müşahidə olunması orta nizam oblastının (ONO) formalaşmasında selen (Se) atomları arasındakı korrelyasiyaların (Se-Se rabitələri) müstəsna rol oynadığını sübut edir.

Şəkil.2.-də isə uyğun olaraq quruluş əmsallarının ($S(Q)$) təcrübi qiymətlərindən ƏMK modelləşməsi nəticəsində hesablanan yekun cüt korrelyasiya paylanması funksiyaları ($G(r)$) təsvir olunmuşdur. Bütün tərkiblərin parsial və yekun quruluş əmsallarının ($S_{ij}(Q)$, $S(Q)$) qrafiklərində BKDP mövcudluğu və parsial, yekun korrelyasiya funksiyalarının qrafiklərində təkrarlanan maksimumların ($g_{ij}(r)$, $G(r)$) yaranması atomların yerləşməsində orta nizamın mövcudluğu ilə əlaqələndirilmişdir. Qeyd edək ki, cüt-korrelyasiya funksiyası amorf maddədə hər hansı seçilmiş zərrəciyin mərkəzindən r -məsafədə yerləşən digər zərrəciyin olma ehtimalını xarakterizə edir. Kristal maddələrdə atomlar arasındakı məsafə dəyişmədiyindən $g(r)$ -diskret paylanmaya malik olur. Amorf maddələrdə kristallardan fərqli olaraq atomların periodik düzülüşü və transilyasiya simmetriyası mövcud olmadığından onlara məxsus olan difraksiya spektri kəskin deyil genişlənmiş olur.

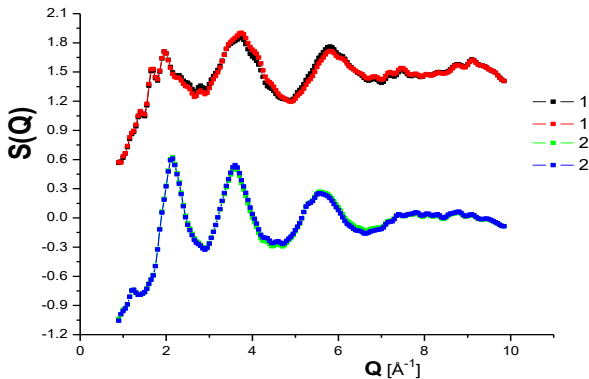
Şəkil.2.-də yekun korrelyasiya funksiyasının atomlar arasındakı məsafədən asılılığı göstərir ki, radial məsafənin artması ilə amplitudu tədricən kiçilən zolaqlar müşahidə olunur. Bu zolaqların tam

sönməsinin nisbətən böyük məsafələrə qədər davam etməsi böyük ölçülü ($L \approx 20 \div 30 \text{ \AA}$) ONO-nın mövcudluğu ilə izah olunur.

Şəkil3.-də qeyri-stexiometrik şüşəvari $\text{As}_{33.3}\text{Se}_{33.3}\text{S}_{33.4}$ və $\text{As}_{33.3}\text{Se}_{33.3}\text{Te}_{33.4}$ tərkiblərinə məxsus quruluş əmsalının ($S(Q)$) səpilmə vektorundan (Q) asılılığı təsvir olunmuşdur. Bu nəticələr göstərir ki, stexiometriyadan kənara çıxma zamanı BKDP-lərinin intensivliyi azalır.



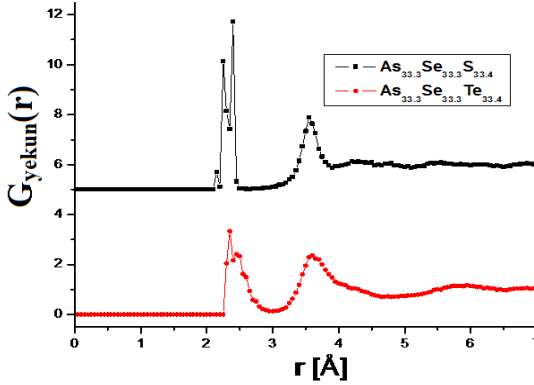
Şəkil 2. $\text{As}_{40}\text{Se}_{60}$, $\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{S}_{30}$ və $\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{Te}_{30}$ xalkogenid şüşəvari maddələrində yekun cüt korrelyasiya paylanması funksiyaları.



Şəkil 3. $\text{As}_{33.3}\text{Se}_{33.3}\text{S}_{33.4}$ (1, 1') və $\text{As}_{33.3}\text{Se}_{33.3}\text{Te}_{33.4}$ (2, 2') xalkogenid şüşəvari maddələrində quruluş əmsalının səpilmə vektorundan asılılığı. (1, 2- təcrübi, 1', 2' –isə modelləşmədən hesablanan nəticələrə uyğundur.

Bu fakt qismən elastik şüşə halına uyğun qeyri-stexiometrik $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$ və $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ tərkiblərində nizamsızlıq dərəcəsinin artması ilə izah olunmuşdur. Digər tərəfdən parsial quruluş faktorlarının ($S_{ij}(Q)$) səpilmə vektorundan (Q) asılılıqlarının təhlili göstərir ki, yekun $S(Q)$ –spektrində $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$ tərkibi üçün $1,5 \div 2 \text{ \AA}^{-1}$ və $2,5 \div 3 \text{ \AA}^{-1}$ intervallarında müşahidə olunan bir neçə zəif piklər qalığ homeopolyar Se-Se rabitələrinin varlığı ilə izah oluna bilər. Bu nəticələr parsial korrelyasiya funksiyalarının təhlili zamanı korrelyasiya uzuluğunda müşahidə olunan dəyişmələrdə də, öz təsdiqini tapır. ONO-nın formalaşmasında müxtəlif kimyəvi rabitələrin rolunu aydınlaşdırmaq üçün tətbiq olunan modelləşmənin sayəsində parsial korrelyasiya funksiyalarının radial paylanması təhlil olunmuşdur. Digər tərəfdən, radial məsafənin $2 \div 3 \text{ \AA}$ intervalında daha aydın müşahidə olunan maksimumlar kimyəvi tərkibdən asılı olaraq vəziyyətinə, formasına, o cümlədən amplituduna görə fərqlənir. $2 \div 3 \text{ \AA}$ intervalında daha aydın müşahidə olunan maksimum birinci koordinasiya sferası oblastının ölçüsünə uyğun gəlir. Qeyd edək ki, birinci və ikinci koordinasiya sferası oblastlarının ölçüsünə uyğun gələn bu nəticələr müxtəlif müəlliflərin aldığı nəticələrlə uyğunluq təşkil edir. Tədqiqat göstərir ki, $G(R)$ - asılılığında əhəmiyyətli dəyişiklik (əsasən birinci və sonuncu maksimumların) stexiometrik olmayan $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$ tərkibində müşahidə olunur (şəkil4.). Göründüyü kimi, stexiometrik tərkiblərdən fərqli olaraq bu halda zəif meyilli əyilmələr aydın şəkildə müşahidə olunan maksimumlara ($2,14$ və $2,24 \text{ \AA}$ -də) çevrilir. Digər tərəfdən $As_{40}Se_{60}$ və $As_{40}Se_{30}S_{30}$ -də müşahidə olunan təkrarlanan piklər bu halda tamamilə yox olur. Qeyd olunan nəticə $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$ tərkibində xalkogen atomlarının qalığ konsentrasiyasının mövcudluğu ilə izah olunmuşdur. Aparılan tədqiqat göstərir ki, birinci maksimumda əlavə piklərin yaranması Se-Se, Se-S, S-S əlaqələrinin konsentrasiyasının, təkrarlanan maksimumların yox olması isə nizamsızlıq dərəcəsinin artması ilə izah oluna bilər. Bu fakt alınan nəticələrlə ƏMK–modelləşməsinin tətbiqi nəticəsində $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$ və $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ -də xalkogen atomları arasındakı rabitələrin sayının stexiometrik tərkiblərdən yüksək olması ilə izah olunmuşdur. Anoloji olaraq parsial

korrelyasiya funksiyalarının təhlili də birmənalı şəkildə göstərir ki, $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$ tərkibi üçün (birinci koordinasiya sferasında) atom çütləri arasındakı korrelyasiya uzunluğu (As-As, As-Se (2,39 Å), As-S, Se-Se, Se-S, S-S (2,33; 2.3; 2,24 və 2,16 Å) stexiometrik tərkiblərlə müqayisədə olduqca kiçikdir.



Şəkil 4. $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$ və $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ xalkogenid şüşəvari maddələrində yekun cüt korrelyasiya paylanması funksiyaları.

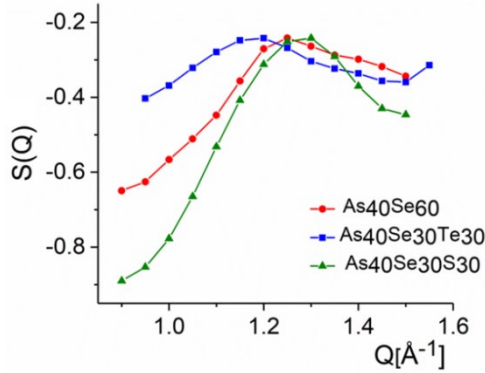
Digər tərəfdən ƏMK modelləşməsi əsasında müəyyən olunmuşdur ki, stexiometrik olmayan $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ tərkibləri üçün koordinasiya ədədinin (Z) modelləşmənin tətbiqindən alınan qiymətləri 8-N qaydasından hesablanan qiymətlər ilə nəzərəçarpan dərəcədə fərqlənir.

Beləliklə, parsial və yekun korrelyasiya funksiyalarının müşahidə olunan xüsusiyyətləri ONO-nın əmələ gəlməsində Se-Se və As-Se korrelyasiyalarının həlledici rol oynadığını birmənalı olaraq sübut edir. ƏMK modelləşməsinin neytron -difraksiya səpilməsinin nəticələrinə tətbiqindən alınır ki, As_xSe_{100-x} ($x=40$ at%) tərkibində selenin (Se) 0,5 at% nisbətində izovalent kükürd (S) və tellur (Te) atomları ilə əvəz olunması həm homeopolyar, həm də heteropolyar rabitələrin yekun koordinasiya ədədlərinin dəyişməsi ilə müşayiət olunur. Birinciləri kükürd artırır (1,12- dən -1,18 -ə qədər), tellur azaldır (1,18-dan - 0,56 -ə qədər), ikinciləri isə kükürd azaldır (2, 36

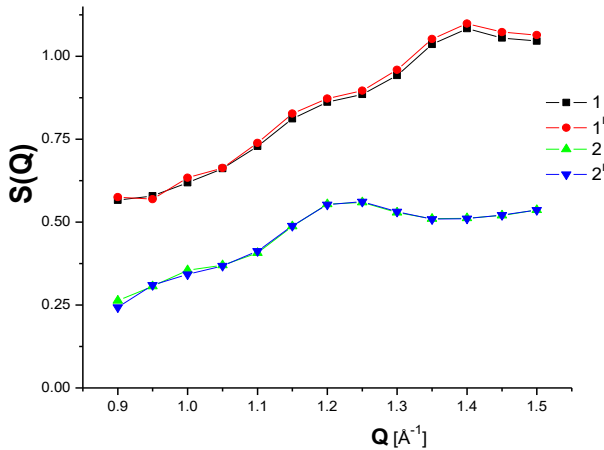
–dan 2,27 -ə qədər) tellur isə artırır (2,36 –dan 2,65 - ə qədər). Homeopolyar və heteropolyar rabitələrə məxsus yekun koordinasiya ədədinin qiymətlərində müşahidə olunan dəyişikliklər xalkogen atomlarından ibarət olan zəncir və həlqəvi molekulların nisbi payının dəyişməsi ilə əlaqədardır. Müəyyən olunmuşdur ki, bütün stexiometrik tərkiblərdə yekun koordinasiya ədədləri 2.4 olub, Mottun 8-N qaydasını ödəyir və onların məxsusi amorf matrisası əsasən piramidal tipli $AsSe_3$, AsS_3 , $AsTe_3$ quruluş elementlərindən təşkil olunmuşdur. Müvafiq fəsildə qismən elastik şüşə halına uyğun qeyri-stexiometrik tərkibli $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ şüşəvari xalkogenid yarımkəçirici tərkiblərində quruluş faktorunun (S(Q)) təcrübi və modelləşmənin tətbiqindən alınan qiymətlərinin səpilmə vektorundan (Q) asılılıq xüsusiyyətləri tədqiq olunmuşdur. Həmin tərkiblərdə BKDP-nin nisbətən zəif müşahidə olunması maddənin quruluşunda nizamsızlıq dərəcəsinin artmasına səbəb olan quruluş elementlərinin növü, nisbi payı və rolunun dəyişməsi ilə izah olunmuşdur.

İkinci fəsildə $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$, $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ xalkogenid şüşələrdə lokal quruluşun orta nizamlılığının təbiəti (birinci kəskin difraksiya pikinin tədqiqi), fiziki xüsusiyyətləri və onlara müxtəlif modifikatorların (Sm, Dy) təsirləri kompleks şəkildə araşdırılmışdır. Bu məqsədlə yuxarıda qeyd olunan tərkiblərə məxsus quruluş əmsallarının (S(Q)) səpilmə vektorundan (Q) təcrübi asılılıqları Şəkil5. və Şəkil6.-da birinci kəskin difraksiya pikinin müşahidə oblastında təsvir olunmuşdur. Alınmış nəticələrə Elliott-un boşluq-klaster modeli tətbiq olunaraq BKDP-nə məxsus parametrlərə, daha doğrusu pikin vəziyyəti (Q_0), yarım eni (ΔQ), amplitudu və nano boşluqların diametrinə (D), lokal quruluşun yaxın və orta nizamlılığının ölçülərinə (d, L), kompaktlıq əmsalına (δ), molyar həcmə (V_a) kimyəvi tərkibin və müxtəlif modifikatorların (Sm, Dy) təsirləri kompleks şəkildə tədqiq olunmuşdur. Boşluq-klaster modelinə görə bu materiallar aşağı atomar sıxlıqlı oblastlar və ya biri-digərindən boşluqlar (məsamələr) ilə ayrılan nisbətən böyük sıxlıqlı oblastlardan, yaxud da klasterlərdən ibarətdir. Hesab olunur ki, bu maddələrdə atomar kontrast və uyğun olaraq klasterlərlə

boşluqlar arasındakı orta elektron sıxlığı yekun quruluş əmsalının ($S(Q)$) spektral asılılığında BKDP-nin yaranmasına səbəb olur.



Şəkil 5. Müxtəlif tərkibli arsen xalkogenidləri üçün birinci kəskin difraksiya pikinin müşahidə oblastında quruluş əmsalının səpilmə vektorundan asılılığı.



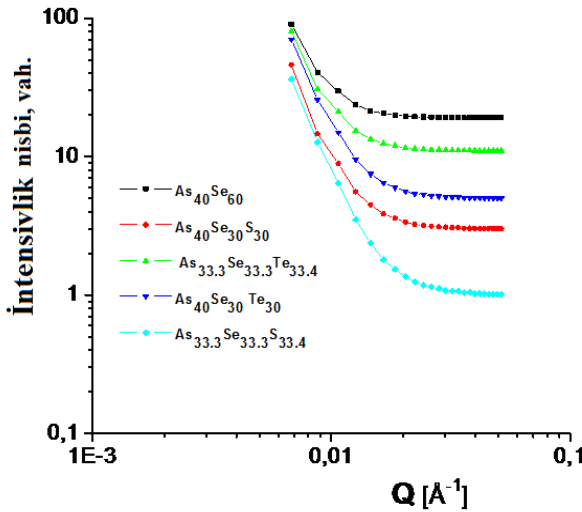
Şəkil 6. As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.3} (1, 1¹) və As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4} (2, 2¹) xalkogenid şüşəvari maddələri üçün birinci kəskin difraksiya pikinin müşahidə oblastında quruluş əmsalının səpilmə vektorundan asılılığı. (1, 2 -təcrübi, 1¹, 2¹ –isə modelləşmədən hesablanan nəticələrə uyğundur.

Tədqiqatın nəticəsi göstərir ki, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{60}$ və $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ tərkib ardıcılığına uyğun olaraq, d-nin qiyməti artır, orta nizamın ölçüsü (L) isə azalır. Tədqiqat zamanı d-nin artması xalkogen atomlarının qeyd olunan S, Se, Te ardıcılığı istiqamətində atomar radiusunun artması ilə, ONO-nın ölçülərinin azalması isə, həmin sırada nizamsızlıq dərəcəsinin artması ilə əlaqələndirilmişdir. Həmçinin tədqiq olunan tərkiblərin $As_xSe_yS_{100-x-y}$, As_xSe_{100-x} və $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$ at%) ardıcılığına uyğun olaraq nano-boşluqların diametrlərinin (D) ədədi qiymətləri azalır. İlk dəfə olaraq tədqiq olunan maddələrdə neytron difraksiya səpilməsindən alınan quruluş əmsallarının səpilmə vektorundan asılılığını əks etdirən təcrübi nəticələ ƏMK modelləşməsi (The software package RMC⁺⁺[<http://www.szfki.hu/~nphys/rmc++/opening.html>]) tətbiq olunaraq, tədqiq olunan maddələrdə amorf matrisanın qurulmasında iştirak edən bütün kimyəvi əlaqələrin (Se-Se, S-S, Se-S, Se-Te, Te-Te və.s) BKDP-nin əmələ gəlməsində rolunu dəqiq analiz etmək üçün parsial quruluş əmsalları ($S_{ji}(Q)$) hesablanaraq, elmi ədəbiyyatda tamamilə yeni olan təhlillər aparılmış və dəqiq təcrübi nəticələrə əsaslanan mühakimələr irəli sürülmüşdür. Bu nəticələrə xaotik kimyəvi şəbəkə (XKŞ) modelinin tətbiqindən məlum olur ki, homeopolyar və heteropolyar atomlar cütü arasında rabitələrin paylanması statistik olaraq xaotik xarakter daşdığından qeyri-stexiometrik halakeçid zamanı xalkogen atomlarının konsentrasiyasının qiyməti müvafiq stexiometrik tərkibdən üstünlük təşkil etdiyi halda həmin atomların arasında homeopolyar rabitələrin faizi statistik olaraq artır. Nəticədə, orta nizamın ölçüsünün (L) və pikin amplitudunun azalmasını qalıq xalkogen atomlarının konsentrasiyasının (S-S, Te-Te) artması ilə izah etmək olar. Dissertasiyada tədqiq olunan materiallar üçün məxsusi sərbəst həcmlərinin varlığı haqqında mülahizələri, maddələrin təcrübi ölçülən və onların tərkibinə daxil olan elementlərin atomar sıxlıqları nəzərə alınmaqla hesablanan quruluşun kompaktlıq əmsalının (δ) ədədi qiymətləri stexiometrik tərkiblərin daha təkmil quruluşlu amorf matrisaya malik olduğunu birmənalı sübut edir.

Neytron-difraksiya səpilməsi üsulu ilə müəyyən olunmuşdur ki, yuxarıda qeyd olunan xalkogenid şüşəvari tərkiblərə əlavə edilmiş

samarium və disproziyum atomları yüksək kimyəvi aktivlikləri sayəsində amorf matrisanı əmələ gətirən əsas quruluş elementləri arasında (AsSe_3 , AsS_3) kimyəvi əlaqə yaradaraq nizamlılıq dərəcəsini və korrelyasiya məsafəsini artırır.

Üçüncü fəsilə İzostatik şüşə hallarına uyğun $\text{As}_x\text{Se}_y\text{S}_{100-x-y}$, $\text{As}_x\text{Se}_y\text{Te}_{100-x-y}$ ($x=40$, $y=30$ at%)–stexiometrik və qismən elastik şüşə halına uyğun $\text{As}_x\text{Se}_y\text{S}_{100-x-y}$, $\text{As}_x\text{Se}_y\text{Te}_{100-x-y}$ ($x=33,3$; $y=33,3$ at%) qeyri-stexiometrik tərkiblərində kiçik bucaq altında neytron səpilməsinin xüsusiyyətləri və səth morfologiyası kompleks tədqiq olunmuşdur. Bu məqsədlə Şəkil7.-də yuxarıda qeyd olunan tərkiblərə məxsus kiçik bucaqlı neytron səpilməsi intensivliyinin (I) səpilmə vektorundan (Q) təcrübi asılılıqları təsvir olunmuşdur.



Şəkil 7. $\text{As}_{40}\text{Se}_{60}$, $\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{S}_{30}$, $\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{Te}_{30}$, $\text{As}_{33.3}\text{Se}_{33.3}\text{Te}_{33.4}$, $\text{As}_{33.3}\text{Se}_{33.3}\text{S}_{33.4}$ maddələrində kiçik bucaqlı neytron səpilməsi intensivliyinin (I) səpilmə vektorundan (Q) asılılığı.

Təqdim olunan üsula əsasən səpilmə intensivliyinin səpilmə vektorundan tərs qüvvət üstlü $I \sim q^{-n}$ ($n \approx 4, 12 \div 4, 14$) asılılığına malik olduğu müəyyən olunmuşdur. Göründüyü kimi, kimyəvi tərkibdən asılı olaraq $I \sim q^{-n}$ asılılığı səpilmə vektorunun $q \sim 6,8 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ – qiymətindən $q \sim 0,05 \text{ \AA}^{-1}$ –qiymətlərinə kimi davam edir. Qeyd olunan asılılıqlar üçün qismən kənarçıxma ilə Porod qanunu

ödənilir. Porod əmsalının qiymətindəki dəyişikliklər qeyri-bircins paylanmış səpici oblastların varlığı ilə, Porod qanunundan qismən kənaraçıxma işə səthdən diffuz səpilmə ilə əlaqədardır. İntensivliyin səpilmə vektorundan üstlü funksiya şəklində asılı olması həmçinin göstərir ki, neytronların səpilmə proseslərində həlledici rol oynayan qeyri-bircinsli oblastların ölçüləri kifayət qədər böyükdür və buna görə də, $Q_{\min}R \gg 1$ şərti ödənilir. Qeyri-bircins paylanmış oblastların ölçülərinin müəyyən olunması üçün $Q_{\min} \cdot R \approx 3,5$ - şərtini ödəyən meyardan istifadə edərək, tədqiq olunan nümunələrdə qeyri-bircins oblastların xarakterik ölçüsünün $\sim 515 \text{ \AA}$ olduğu müəyyən olunmuşdur. Aparılan təcrübələr nəticəsində qrasiyanın radiusunun və ya fraktal sistem halında özünə bənzər oblastların yuxarı sərhədinin təcrübi qurğunun ayırtdetmə qabiliyyətinin qeyd etməyə imkan verdiyi qeyri-bircins oblastların maksimal ölçüsündən (R_{\max}) böyük olması müəyyən olunmuşdur. Bunun nəticəsində, Q -nün kiçik qiymətləri halında bütün tərkiblər üçün kiçik bucaqlı neytron səpilməsi intensivliyinin (I) səpilmə vektoru modulundan (q) asılılığı Guinier qanununa tabe olmur. Qeyd edək ki, Guinier modelinə görə səpilmə intensivliyinin səpilmə vektorundan asılılığı eksponensial qanuna tabedir. Guinier qanununa tabe olan asılılıq müşahidə olunsaydı qeyri-bircins səpici mərkəzlərin yuxarı ölçü sərhəddini müəyyənləşdirmək mümkün olardı. Bu təcrübələrdə R_{\max} -un qiymətləndirilməsi, aparılan eksperimentin imkanları ilə məhdudlanmışdır. Bu məhdudiyət səpilmə vektorunun (Q) daha böyük qiymətlərində ($0,05 \text{ \AA}^{-1}$) səpilmə intensivliyinin (I) fon səviyyəsində azalması ilə bağlıdır. Səpilmə vektorunun $Q=0,04 \text{ \AA}^{-1}$ –qiymətindən başlayaraq kiçik bucaqlı neytron səpilməsi digər səpilmə rejiminə keçir və həmin keçidə uyğun Q -nün qiymətindən qeyri-bircins oblastların uyğun olaraq minimum həndəsi ölçüləri təyin olunmuşdur (d_{\min}). Bu baxımdan aydın olur ki, bütün səpilmə əyriyələri Porodun üstlü funksional asılılıq qanununa tabe olur və maddələrin təcrübi təyin olunan sıxlığı onların bərk fazasının sıxlığından kiçikdir. Bu nəticə tədqiq olunan maddələrin iki fazalı (bərk faza-məsaməli faza) məsaməli quruluşlu olması haqda mühakimə yürütməyə imkan verir. Nəticədə, tədqiq olunan

materialların bərk hissəcikli faza ilə bərabər, sərbəst həcmli oblastlardan da təşkil olunması müəyyən olunmuşdur.

Porod qanunu ilə ifadə olunan asılılığa kimyəvi tərkibin və modifikatorların (Sm) təsiri öyrənilərək, qeyri bircins paylanmış səpici oblastların minimal həndəsi ölçüləri təyin edilmişdir. Digər tərəfdən, tədqiq olunan maddələrin bərk fazasının sıxlığı (ρ_0), Porod əmsalı (n), fraktalların ölçüləri (D_s), mono-dispers zərrəciklərin ölçüsü (r_0) və Porod sabiti (K) hesablanmışdır. Göstərilmişdir ki, samariumla aşqarlanma hesabına Porod asılılığının qüvvət üstünün (n) $As_{32,3}Se_{32,55}Te_{32,65}:Sm_x$ ($x=2,5at\%$) şüşəvari tərkib üçün $n=3,85$ -ə kimi azalması səthinin fraktal ölçüləri $3 < n = 6 - D_s \leq 4$ şərtini ödəyən üçölçülü oblastlardan səpilmənin mövcudluğu ilə izah oluna bilər. Özünə oxşar oblastların aşağı sərhədinin $r_0 \sim 30 \div 50 \text{ \AA}$ intervalında dəyişməsi, böyük ölçülü ($R \approx 500 \text{ \AA}$) fraktal klasterlərin tərkibinə daxil olan monodispers qeyri bircinsliklərin varlığı ilə müəyyən olunur. Dissertasiyada məsaməli fraktal təbiətə malik materiallar üçün Porod asılılığının qüvvət üstünün $n=7-\gamma$ ifadəsi ilə müəyyən olunduğu nəzərə alınaraq, samariumla (Sm) aşqarlanmış As-Se-S nümunələri üçün həmin paylanmanın $P(r) \sim r^{-2,15}$ asılılığı ilə, As-Se-Te -üçün isə $P(r) \sim r^{-1,14}$ şəklinə ifadə olunduğu müəyyən olunmuşdur. Burada γ -boşluqların ölçüyə görə $P(r) \sim r^{-\gamma}$ -paylanmasını xarakterizə edir. Samariumla aşqarlanmanın As-Se-S şüşəvari xalkogenid sistemində kontrastın ($\Delta\rho$) artmasına, səpilmə intensivliyinin isə azalmasına, As-Se-Te sistemində isə bunun əksinə olaraq kontrastın ($\Delta\rho$) azalmasına, səpilmə intensivliyinin artmasına səbəb olduğu sübut olunmuşdur. Bu baxımdan samariumla aşqarlanmış qismən elastik şüşə halına uyğun $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=33,3$; $y=33,3 \text{ at}\%$) tərkibləri əsasında hazırlanan nazik təbəqələrin səth morfologiyasını xarakterizə edən parametrlərin tədqiqi və alınan nəticələrin kiçik bucaq altında neytron səpilməsinin nəticələri ilə müqayisəli təhlili kompleks yanaşma tələb edir. Alınan nəticələrin müqayisəsi göstərir ki, samariumun əlavə olunması nəticəsində $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$ tərkibinə məxsus özünə oxşar oblastların aşağı sərhədi (r_0), qeyri-bircins oblastların minimum həndəsi ölçüləri (d_{min}), Porod sabiti (K), kontrast ($\Delta\rho$), sıxlıq (ρ) azalır, nahamarlığın amplitud parametrləri (R_a, R_q, R_t, R_p, R_v),

fraktalların ölçülərinin (D_s) və bərk maddənin sıxlığı (ρ_0) ilə təcrübi sıxlıq (ρ) arasındakı fərq ($\rho_0 - \rho$) artır. Lakin aşqarlanmanın $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$ -ə məxsus səth morfolojiyasını xarakterizə edən parametrlərə və kiçik bucaqlı neytron səpilməsinin nəticələrinə təsiri nisbətən əks mənzərə ilə müşahidə olunur. Aşqarlanma nəticəsində $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$ -ə məxsus özünə oxşar oblastların aşağı sərhədi (r_0), qeyri-bircins oblastların minimum hündəsi ölçüləri (d_{min}), Porod sabiti (K) və kontrastın ($\Delta\rho$) ədədi qiyməti artır, nahamarlığın amplitud parametrləri (R_a, R_q, R_t, R_p, R_v) isə azalır.

İlk dəfə olaraq təqdim olunan dissertasiyanın müvafiq fəslində alınan nəticələr səth morfolojiyasının yəni, hündürlüyün paylanması histoqramının asimmetriyasını xarakterizə edən səthin asimmetriya əmsalının (S_{sk}) və təciklərin iti ucluluğunu xarakterizə edən səthin ekssesliyinin (K) ədədi qiymətləri ilə müxtəlif tərkiblər üçün müqayisəli təhlili aparılaraq səth morfolojiyası və həcmdə gedən fiziki proseslərin əlaqəliliyini ayırd edən yeni mühakimələr irəli sürülmüşdür.

Dördüncü fəsildə xalkogenid şüşələrin lokal quruluşunun və onların tərkibini yaradan kimyəvi rabitələrin növlərinin öyrənilməsi üçün effektiv üsul olaraq tətbiq edilən Raman spektroskopiyasına aid təcrübi nəticələrin müqayisəli təhlili və onların izah olunmasında tətbiq olunan müasir modellər (molekulyar quruluş modeli, klaster modeli, bağlı klaster modeli) təsvir olunmuşdur. Müxtəlif növ xalkogenid şüşələrdə optik və akustik fononlarla bağlı olan rəqslərin dinamikası, fırlanma və digər aşağı tezlikli rəqs modlarının xüsusiyyətlərini müəyyənləşdirən yeni mühakimələr irəli sürülmüşdür. Bu fəsildə həmçinin elmi ədəbiyyatda ilkin mənşəyi və təbiəti dəqiq bəlli olmayaraq ciddi müzakirə mövzusu hesab olunan aşağı tezlikli əlavə rəqs hallarının və onun sayəsində əmələ gələn bozun pikinin təbiətinin araşdırılması istiqamətində irəli sürülən müxtəlif ilkin cəlbədicilərin nəzəri-eksperimental modelləri (dinamik nizamsızlıq modeli, fəza fluktuasiyalı elastik-optik Pockels sabitləri modeli, təsadüfi dinamik matrisa modeli və.s.) və onların üstünlükləri, çatışmazlıqları ciddi təhlil olunmuşdur. Bu fəsildə həmçinin Urbax udma kənarı dikliyini xarakterizə edən σ_0 -parametri təyin olunaraq göstərilmişdir ki, bütün tərkiblər üçün $\sigma_0 < 1$ şərtinin

ödənilməsi elektron-fonon qarşılıqlı təsirinin (EFQT) mövcudluğunu sübut edir. Burada σ_0 –parametri həmçinin kondensə olunmuş mühitlərdə elektron-fonon qarşılıqlı təsirini xarakterizə edir. Müəyyən olunmuş ki, üçkomponentli nümunələr üçün σ_0 -ın qiymətinin binar $As_{40}Se_{60}$ - tərkibi ilə müqayisədə aşağı olması çox komponentli xalkogenid şüşələrdə yüksək səviyyəli elektron-fonon qarşılıqlı təsirinin mövcudluğunu sübut edir. Alınan nəticələrin təhlili göstərir ki, stexiometrik tərkibli $As_{40}Se_{60}$ -də selenin qismən kükürd və tellurla əvəz olunması elektron-fonon qarşılıqlı təsirinin artması, Te olan qeyri–stexiometrik tərkiblərdə isə daha da güclənməsi, quruluşun nizamsızlıq dərəcəsinin artması ilə əlaqələndirilir. Bu fəsilə fononların effektiv enerjisini ($\hbar\omega_p$) hesablayarkən kimyəvi rabitə yaxınlaşması modelinin təməl prinsiplərini tətbiq edib amorf matrisaya daxil olan bütün kimyəvi rabitələrin faiz nisbətini nəzərə alaraq, Raman spektrindən orta rəqs enerjisi kimi təyin olunmuşdur. Həmçinin xalkogenid şüşələrdə elektron proseslərinin müşahidə olunan xüsusiyyətlərini kompleks şəkildə təhlil etmək üçün kimyəvi rabitə yaxınlaşması (KRY) modeli tətbiq olunmuşdur. Həmin modelə görə heteropolyar rabitələrin yaranma ehtimalı homopolyardan üstündür. Yəni, əvvəlcə enerjisi yüksək olan heteropolyar rabitələr, daha sonra yüksək enerjili homopolyar rabitələr yaranır. Beləliklə, rabitə enerjisinin azalması ardıcılığı ilə, əlaqələrin yaranması o vaxta qədər davam edir ki, matrisanın yaranmasında bütün mümkün olan atomların valent tələbləri ödənilsin. Fononların effektiv enerji parametrinin ($\hbar\omega_p$) qiymətlərinin digər nümunələrlə müqayisədə tərkibində tellur (Te) olan nümunələr üçün aşağı olduğu müəyyən olunmuşdur. Digər tərəfdən üçkomponentli tərkiblər ($As_{40}Se_{30}S_{30}$ və $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$) üçün $\hbar\omega_p$ -parametrinin ədədi qiymətlərinin binar tərkiblərlə ($As_{40}Se_{60}$) müqayisədə yüksək olması mürəkkəb komponentli XŞY materiallarda güclü elektron-fonon qarşılıqlı təsirin olduğunu sübut edir. Tərkiblərin belə dəyişməsi zamanı eksponensial udma oblastına xas olan Urbax enerjisinin artması, qadağan olunmuş zona eninin kiçilməsi, Urbax enerjisinin icazəli zonaların kənarındakı lokal hallar oblastına aid olması ilə əlaqələndirilir.

Elmi ədəbiyyatda ilk dəfə olaraq izostatik şüşə halına uyğun $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ və qismən elastik şüşə halına uyğun $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ tərkiblərində aşağı tezlikli Raman səpilməsi (bozon pikinin) təbiətinin izah olunması üçün Raman səpilməsinə dair təcrübi nəticələr ilə, neytron-difraksiya səpilməsinə ƏMK modelləşməsinin tətbiqi sayəsində alınan nəticələr birgə müqayisəli şəkildə araşdırılaraq ciddi qanunauyğunluqlar aşkar olunmuş və yeni mexanizmlər irəli sürülmüşdür.

Bəşinci fəsilə uyğun olaraq izostatik və qismən elastik şüşə hallarına uyğun $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$ at%) və $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=33,3$; $y=33,3$ at%) tərkiblərində aşağı tezlikli Raman səpilməsinin xüsusiyyətləri tədqiq olunmuşdur. Tədqiq olunan maddələrin neytron-difraksiya səpilməsindən alınan təcrübi nəticələrə ƏMK modelləşməsinin tətbiqi nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, bütün izostatik şüşə hallarına uyğun As_xSe_{100-x} ($x=40$ at%), $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$ at%) tərkiblərində orta nizamın varlığı ilə bağlı olan aşağı tezlikli ($\omega=0\div 50$ sm^{-1}) Raman səpilmə spektrlərinin (BP-lər) formalaşmasında As-Se və Se-Se rabitələri həlledici rol oynayır. Stexiometrik $As_xSe_yS_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$ at%) şüşəvari tərkibində BP-nin intensivliyi və yarıməninin aşağı olması onun orta nizam quruluşunun formalaşmasında həlledici rol oynayan As-Se və Se-Se rabitələri ilə bərabər, Se-S heteropolyar rabitələrinin də, iştirak etməsidir. Müəyyən olunmuşdur ki, heteropolyar Se-S rabitələrinin enerjisi 47.47 kcal/mol olmaqla, As-Se və Se-Se rabitələrinin enerjilərindən (41.2 kcal/mol, 44 kcal/mol) böyük olduğundan ümumi təkmil amorf matrisanın qurulmasında və maddənin kohersiv enerjisinin artmasında müstəsna rol oynayır, orta nizamın ölçüsünü artırır, sistemin nizamsızlıq dərəcəsini isə azaldır ki, bu da nəticədə BP-nin intensivliyinin azalması ilə nəticələnir. Lakin, bundan fərqli olaraq, parsial quruluş əmsallarının ($S_{ij}(Q)$) səpilmə vektorundan (Q) asılılıqları göstərir ki, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$ at%) stexiometrik tərkibində orta nizamın formalaşmasında As-Se və Se-Se rabitələrindən əlavə heteropolyar As-Te və Se-Te rabitələrinin qismən iştirakı qeyd olunsa da, onların rabitə enerjiləri zəif olduğundan amorf matrisanın qurulmasında nisbətən aşağı enerjili

homeopolyar rabitələrin (As-As və Te-Te) iştirakı da aşkar olunur ki, bu da defektliliyi, nizamsızlıq dərəcəsini nisbətən artırır. Nəticədə orta nizamın ölçüsü tərkibində kükürd (S) olan maddə ilə müqayisədə azalır, BP-nin intensivliyi isə, nisbətən artır. Neytron-difraksiya səpilməsindən alınan təcrübi nəticələrə ƏMK modelləşməsinin tətbiqindən alınır ki, stexiometriyaya uyğun izostatik $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$ at%) şüşə halından qismən elastik $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=33,3$; $y=33,3$ at%) –şüşə hallarına keçid zamanı BP-nin yarım eninin və intensivliyinin artmasına səbəb yuxarıda qeyd olunan tərkib ardıcılığına uyğun olaraq homeopolyar rabitələrin ümumi nisbi payının 1.18 və 0.56 -dən 1.53 və 0.67 qiymətlərinə qədər artması, heteropolyar rabitələrin ümumi nisbi payının isə 5.89 və 6.48-dən 5.58 və 6.22 qiymətlərinə qədər azalması ilə əlaqələndirilir. Həmçinin modelləşmənin nəticələri əsasında müəyyən olunmuşdur ki, stexiometrik tərkib hallarından qeyri-stexiometrikə keçid zamanı parsial quruluş əmsallarının ($S_{ij}(Q)$) səpilmə vektorundan (Q) asılılıqlarında amorf matrisanın, o cümlədən orta nizamın formalaşmasında həlledici (As-Se) və qismən rol oynayan (As-Te, Se-S, Te-Se) heteropolyar rabitələrin sayəsində müşahidə olunan BKDP-lərinin intensivliklərinin azalması, BP-nin yarım eninin və intensivliyinin artması ilə nəticələnir.

Altıncı fəsildə dissertasiya işində tədqiq olunan maddələrin fırlanan soba üsulu ilə aparılan sintez prosesinin, daxili struktur gərilmələri və sintez olunan maddənin qeyri - bircinsliliyini və onun səthindəki müxtəlif ölçülü qabarcıqları minimuma endirməyə imkan verən optimal sintez rejiminin seçilməsi, sintez olunacaq maddələrin təmiz və nadir torpaq elementləri (Dy, Sm) ilə aşqarlanmış tərkiblərinin alınma prosesləri təsvir olunmuşdur. İlk dəfə olaraq təklif olunmuşdur ki, sintez başa çatdıqdan sonra alınan nümunələrin ağzı bağlı kvarts ampulada şüşələşməyə keçid temperaturundan $40\div 46^\circ C$ aşağı temperaturda termik tablama prosesinin aparılması, soyudulma prosesində daxili struktur gərilmələrinin aradan qaldırılması üçün effektiv temperatur intervalıdır. Həmin fəsildə həmçinin optik tədqiqatların aparılması və sendviç quruluşa malik rütubət sensorlarının alınmasında tətbiq olunan xalkogenid şüşəvari

nazik təbəqələrin alınma üsulları, onların texnoloji və maliyyə baxımdan üstünlükləri, qüsurları təhlil olunmuşdur. Həmin təhlillər göstərir ki, ərimə temperaturu yüksək olmayan, kimyəvi davamlı və məhdudiyətsiz aşqarlanma imkanlarına malik olan əksər binar və mürəkkəb komponentli xalkogenid şüşələrin nazik təbəqələrinin alınmasında vakuumda termik buxarlandırma üsulu aşağı maliyyə məsrəfi və az zaman tələb edir, çox mərhələli kimyəvi proseslərin müdaxiləsinə ehtiyac olmur. Dissertasiya işində termik buxarlandırma üsulu ilə, yüksək keyfiyyətli güzgü səth parlaqlığına (AQM-illə təsdiq olunan aşağı səth nahamarlığına malik) malik nazik təbəqələr alınmışdır.

Bu fəsilə həmçinin neytron-difraksiya səpilməsinin nəticələrinə təbiiq olunan ƏMK modelləşməsinin əsas alqoritmi və tilinin uzunluğu L-olan kubik formalı qutuda atomar sıxlığı tədqiq olunan maddənin sıxlığına bərabər N-sayda virtual atomlar çoxluğundan ibarət real fiziki sistemə bənzər konfigurasiya modelini müəyyənləşdirən mərhələlər əhatə olunmuşdur. Lokal quruluşu xarakterizə edən parametrlərin təyin olunması üçün tərkibə daxil olan hər bir elementin atomlarının koherent neytron səpilmə amplitudları (b_i , b_j) və ya səpilmə uzunluqları, maddədəki komponentlərin molyar çəkirləri (c_i , c_j), həmin tərkiblərə məxsus parsial çəki əmsalları (w_{ij}) hesablanmışdır. Tərkiblərə məxsus parsial çəki əmsalları hesablanarkən Kronecker delta funksiyasının ($\delta_{\alpha\beta}$), $\alpha = \beta$ olduqda $\delta_{\alpha\beta}=1$, $\alpha \neq \beta$ olduqda isə, $\delta_{\alpha\beta}=0$ olduğu nəzərə alınmışdır. Məsələn, tədqiq olunan As-Se-S sistemi üçün $\alpha = \beta$ olduqda, yəni eyni növ atomlar (As-As, Se-Se, S-S) cütü üçün $\delta_{AsAs}=\delta_{SeSe} = \delta_{SS} =1$, lakin müxtəlif növ atomlar (As-Se, As-S, Se-S) cütü üçün $\delta_{AsSe}=\delta_{ASS} = \delta_{SeS} =0$ götürülmüşdür. Anoloji qaydada As-Se-Te sistemini tədqiq edərkən As-As, Se-Se, Te-Te atomlar cütü üçün $\delta_{AsAs}=\delta_{SeSe} = \delta_{TeTe} =1$, As-Se, As-Te, Se-Te cütləri üçün isə, $\delta_{AsSe}=\delta_{ASS} = \delta_{SeS} =0$ olduğu nəzərə alınmışdır. Tədqiq olunan maddənin ayrı-ayrı homeopolyar və heteropolyar rabitəli atomar çütlərinin parsial paylanma funksiyası (PPF) üçün aşağı və yuxarı sərhəd (r_{min} , r_{max}) məsafələrinin, parsial və yekun quruluş əmsallarının ($S_{ij}(Q)$ və $S(Q)$) hesablanma qaydası və onların modelləşmə ilə hesablanan ($S_{RMC}(Q)$) qiymətinin onun

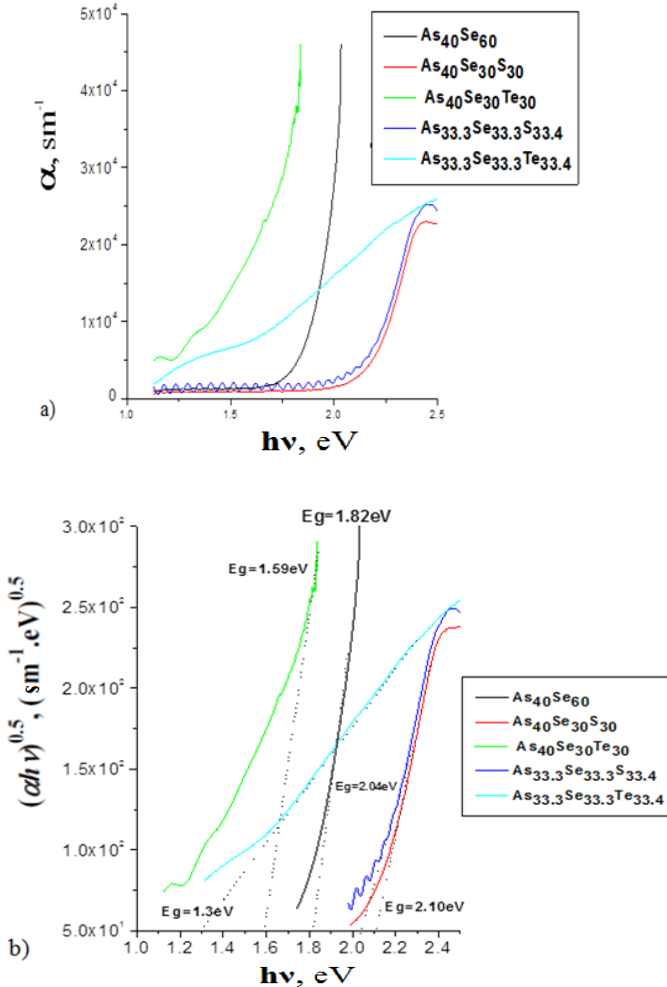
təcrübi qiyməti ilə uyğunluğunun dəqiqliyi müəyyənləşdirilmişdir. Göstərilmişdir ki, uyğunluq əmsalının (χ^2) hər bir yaradılan yeni konfigurasiyaya uyğun qiyməti azalırsa, onda həmin konfigurasiya qəbul olunur və ardıcıl modelləşmə prosesi χ^2 -parametrinin ən minimal qiymət alana qədər həyata keçirilir ki, bu da ən mükəmməl və real atomar konfigurasiyanın alınmasını təmin edir. Dissertasiya işində quruluş əmsalları (S(Q)) xüsusi paket proqramların köməkliyi ilə neytron-difraksiya ölçmələrindən alınmış təcrübi məlumatların əsasında qiymətləndirilmişdir. Alınmış təcrübi məlumatlar mümkün olan atomik konfigurasiyalar haqqında struktur informasiya əldə etmək üçün ƏMK modelləşməsi vasitəsi ilə təhlil olunmuş və bu məqsədlə The software package RMC⁺⁺ <http://www.szfki.hu/~nphys/rmc++/opening.html> proqram paketi istifadə edilmişdir. Burada üç ölçülü atomar konfigurasiyanın qurulmasında istifadə olunan modelləşmənin nəticələri ilə təcrübənin nəticələri, yəni quruluş əmsallarının (S(Q)) qiymətləri arasındakı fərq çox kiçikdir.

Yeddinci fəsilə dissertasiyada tədqiq olunan maddələrin lokal quruluşunun, onlarda elektron hadisələrinin öyrənilməsi üçün müasir tədqiqat metodları və seçilmiş optimal təcrübi şərtlər şərh olunmuşdur. Neytron-difraksiyası və kiçik bucaq altında neytron səpilməsi təcrübələri Macarıstan Elmlər Akademiyasının Budapeşt Neytron Mərkəzində, Raman eksperimentləri Türkiyənin Tubitak Araşdırma Mərkəzində, digər Rentgen-difraksiya, optik tədqiqatlar, maddələrin sintezi və nazik təbəqələrin alınması isə əsasən AMEA-nın Fizika institutunda yerinə yetirilmişdir. Neytron difraksiyasına dair tədqiqatların aparılmasında müasir termal neytronlu iki oxlu monoxromatik neytron difraktometrindən, kiçik bucaqlı neytron səpilməsi tədqiqatlarında isə gücü 10 Mvt olan stasionar tədqiqat reaktorunun soyuq neytron şüaları xəttinə quraşdırılan müasir “Yellow Submarine” markalı kiçik bucaqlı neytron səpilmə qurğusundan, Raman eksperimentlərində isə yüksək dəqiqliyə malik maye azot və ya Peltje effekti əsasında işləyən termoelektrik soyuducu ilə təmin olunmuş 7386-0001 rəqəmsal CCD kameralı Spec-10:400B Spektrograf Princeton Instruments qurğusundan istifadə olunması yüksək dəqiqliyə malik nəticələrin əldə olunmasına

imkan vermişdir. Neytron-difraksiya eksperimentləri səpilmə vektorunun (Q) $Q=0.9\div 1.5 \text{ \AA}^{-1}$ intervalında edilmişdir. Təcrübə zamanı iki oxlu monoxromatik neytron difraktometrin texniki imkanları sayəsində səpilmə vektorunun (Q) yuxarı həddinin $Q_{\max} = 30 \text{ \AA}^{-1}$ -olması $\Delta r = 0.2 \text{ \AA}^{-1}$ yüksək ayırdetmə qabiliyyəti əldə etməyə imkan vermişdir. Bu isə, tədqiq olunan maddənin tərkibinə daxil olan ayrı-ayrı atomlar arasındakı minimal astana məsafələrini müəyyənləşdirmək üçün əhəmiyyətli rol oynayır. Nəticədə, tədqiqat zamanı səpilmə vektorunun (Q) yuxarı həddinin (Q_{\max}) yüksək olması təcrübə nəticəsinin dəqiqlik dərəcəsinin yüksək olmasına səbəb olmuşdur. Optik xassələrin tədqiqi zamanı nazik təbəqəli nümunələrin ölçülən optik buraxma spektrlərinin nəticələri “WINASPEKT” paket proqram təminatından istifadə olunaraq avtomatik rejimdə kompüterə verilmişdir. Nəticələrin kompüterə verilməsi spektrofotometrin RS-232 interfeysinin vasitəsilə əldə edilmişdir. Optik buraxma əmsalı (T) dalğa uzunluğunun $\lambda=190 \div 1100 \text{ nm}$ intervalında tədqiq olunmuşdur. Şüşələşmənin müasir STA-6000 markalı sinxron termik analizatorunda DSK üsulu ilə tədqiqi tərkibdən asılı olaraq şüşələşmə temperaturlarını (T_g) dəqiq ölçməyə və onun qiyməti ilə digər mühüm parametrlər (optik qadağan olunmuş zonanın eni (E_g), kohersiv enerji (KE), orta rabitə enerjisi (E), orta koordinasiya ədədi (Z), kompaktlıq (δ) arasında elmi ədəbiyyatda tamamilə yeni olan korrelyasiya asılılıqlarının müəyyənləşdirilməsinə imkan vermişdir.

Səkkizinci fəsilə izostatik $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ və qismən elastik $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$, $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$ şüşə hallarına uyğun tərkiblərdə optik, o cümlədən Urbax udulmanın xüsusiyyətləri, amorf maddəyə xas quruluş nizamsızlığı və daxili sahənin xaotik fluktuasiyaları ilə əlaqələndirilən Urbax enerjisinin (U), optik qadağan olunmuş zonanın eninin (E_g), optik sındırma (n) və ekstinksiya (k) əmsalının kimyəvi tərkibdən asılılığı, Urbax udulmanın elektron-fonon qarşılıqlı təsiri ilə əlaqələri sistemli şəkildə araşdırılaraq lokal quruluş ilə optik xassələr arasında mövcud elmi tədqiqatların nəticələrində olmayan yeni mühüm korrelyativ asılılıqların mövcudluğu aşkar edilmişdir. Bu məqsədlə izostatik və qismən elastik şüşə hallarına uyğun $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$,

$As_{40}Se_{30}Te_{30}$ və $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$, $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$ xalkogenid şüşəvari maddələrin optik udulma spektrləri şəkil.8.a.-da, Taus qanununa tabe olan üstlü asılılıq oblastından müəyyən olunan $(\alpha h\nu)^{1/2} \sim f(h\nu)$ asılılığı isə şəkil.8.b-də təsvir olunmuşdur.



Şəkil 8. $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$, $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$, $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$ xalkogenid şüşələrin optik udulma spektri (a) və həmin spektrin Taus qanununa uyğun olan udulma oblastı (b).

Göstərilmişdir ki, optik udulma əmsalının (α) fotonun enerjisindən asılılığı üç əsas oblastdan ibarətdir: maddənin nazik təbəqəsi üzərinə düşən fotonun enerjisinin kiçik qiymətlərində zəif udulma oblastı ($\alpha < 1$), Urbax qanununa tabe olan eksponensial udulma oblastı ($\alpha \sim 1 \div 10^3 \text{ sm}^{-1}$) və fotonun enerjisinin nisbətən yüksək qiymətləri oblastını ($h\nu > E_g$) əhatə edən üstlü asılılıq oblastı. Üstlü asılılıq oblastı Taus qanununa tabe olub, aşağıdakı düsturla ifadə olunur:

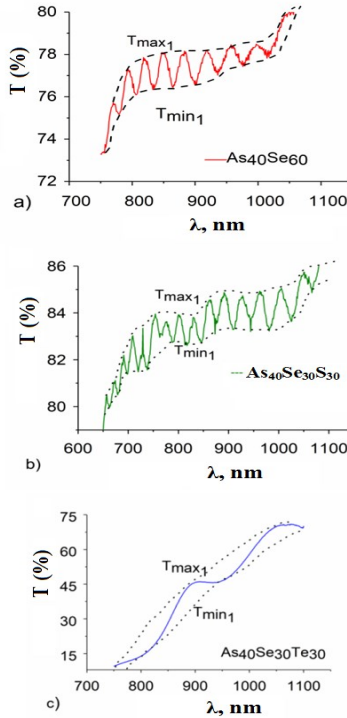
$$\alpha \cdot h\nu = B(h\nu - E_g)^n \quad (1)$$

Burada, E_g -qadağan olunmuş zonanın optik eni, B-üstlü asılılığın meylinə uyğun əmsal, ν - maddənin üzərinə düşən şüalanmanın tezliyi, h - Plank sabitidir. Taus qanununa tabe olan oblastdan udulma spektrlərinin qrafiklərini $(\alpha h\nu)^{1/2} \sim f(h\nu)$ asılılığı şəklində qurub, onların absis oxu ilə kəsişməsinə ekstrapolyasiya edərək, E_g -nin və qrafikin meyindən B-nin qiymətləri təyin olunmuşdur. B-parametri nazik təbəqələrin materialından asılı olub, Taus qaydasına uyğun olan udulma kənarının meyilliyini xarakterizə edir və nizamsızlıq dərəcəsinin ölçüsü kimi qəbul olunur. Müəyyən olunmuşdur ki, $As_{40}Se_{60}$ tərkibində Se-nin S-lə əvəz olunması nəticəsində optik qadağan olunmuş zonanın eni (E_g) artır. Bu halda həmçinin atomların qarlaşma sıxlığı nisbətən sabit qalmasına baxmayaraq, orta rabitə enerjisinin qiymətinin nəzərə çarpan dəyişməyə məruz qalması icazəli zona kənarı hallarının dəyişmələri ilə müşayiət olunmalı idi. Doğrudan da, selen (Se) atomlarının kükürlə (S) əvəzlənməsi halında yüksək enerjili rabitələrlə, tellurla (Te) əvəzlənməsi halında isə aşağı enerjili rabitələrlə əvəz olunur. Bunun nəticəsində tellur tərkibli nümunələrdə qadağan olunmuş zonanın eninin kəskin azalması σ^* -orbitalları və Te-Te, Se-Te rabitələrinin LP-orbitallarının selenin yürüklük aralığına düşərək, əlavə (quyruq) zona kənarı hallarının artmasına səbəb olması ilə izah olunur. Göstərilmişdir ki, tədqiq olunan tərkiblərin kohersiv enerjisi (KE), orta rabitə enerjisinin qiyməti və qadağan olunmuş zonanın eni (E_g) arasında korrelyasiya mövcuddur. Yəni Se-nin S-lə qismən əvəzlənməsi sözü gedən fiziki kəmiyyətlərin birgə artmasına, Te-la əvəzlənməsi isə onların anoloji olaraq azalmasına səbəb olur. Bu nəticələr, stabil optik parametrlərə və geniş tətbiq imkanlarına malik

xalkogenid şüşələrin alınması baxımından yüksək dəqiqliyə əsaslanan mühakimələrin irəli sürülməsinə imkan verir. Qeyd edək ki, udma kənarı yaxınlığında Urbax qaydasını ifadə edən udulma əmsalı (α) əksər xalkogenid şüşələrdə müşahidə olunmuşdur. Urbax qaydasının ödənilməsi halda udulma əmsalının fotonun enerjisindən asılılığı eksponensial olub, ion və kovalent rabitəyə malik materiallarda amorf maddəyə xas olan quruluş nizamsızlığının nəticəsində meydana gələn daxili elektrostatik sahənin xaotik fluktuasiyaları ilə əlaqələndirilir. Urbax udulma kənarı icazəli zonaların sərhədində yerləşən və hal sıxlığı enerjiden eksponensial asılı olan lokal hallar arasındakı elektron keçidləri ilə izah olunur. Urbax udulma kənarının əmələ gəlməsi fotoinduksiyanmış quruluş çevrilmələrindən əhəmiyyətli dərəcədə asılı olan güclü elektron-fonon qarşılıqlı təsiri ilə əlaqədardır. Apardığımız tədqiqatlar göstərir ki, Urbax enerjisinin (U) qiyməti tədqiq olunan XŞY maddələrin kimyəvi tərkibindən asılı olaraq əhəmiyyətli dərəcədə dəyişməyə məruz qalır. Bu nəticələr onu deməyə imkan verir ki, tərkibdən asılı olaraq U -nun dəyişməyə məruz qalması icazəli zonalar kənarında olan lokal hallara uyğun zolağın eni ilə bağlı olub maddənin nizamsızlıq dərəcəsini əks etdirir. Hesab olunur ki, Urbax oblastında udulma bir icazəli zonanın halları ilə digər zonanın eksponensial kənarının (quyruq) lokal halları arasındakı elektron keçidləri ilə əlaqədardır. Müəyyən olunmuşdur ki, tərkibində tellur olan XŞY maddələr üçün Urbax enerjisinin qiyməti $U=609$ meV olub, daha yüksəkdir. Tellurla zəngin olan həmin nümunələr ($As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$) üçün σ^* -orbitalları və Te–Te, Se–Te rabitələrinin LP-orbitalları selenə məxsus yüüklük aralığına düşərək onun qadağan olunmuş zonanın kiçilməsinə və Urbax kənarına məxsus lokal halların artmasına gətirir. Apardığımız optik tədqiqatlar göstərir ki, binar XŞY birləşmələrə iki və üçüncü tərkib komponentinin əlavə olunması onların fiziki xassələri və tətbiq imkanlarını genişləndirməyə imkan verir. As–Se–S və As–Se–Te şüşəvari sistemləri xüsusən geniş şəffaflıq oblastının və yüksək qeyri-xətti optik xassələrinin olması baxımdan cəlbedicidir. Bu maddələrin qeyd olunan xüsusiyyətlərini xarakterizə edən optik sabitlərin təhlili və onların lokal quruluş parametrləri ilə korrelyativ əlaqələrinin

müəyyənləşdirilməsi xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Optik eksperimentlər göstərir ki, tədqiq olunan nümunələrin $d=2\text{mk}$ qalınlıqlı nazik təbəqələrində optik buraxma əmsalının spektral asılılığı dalğa uzunluğunun $\lambda=600\div 1100$ nm intervalında maksimum və minimumlu zolaqlara malik interferensiya mənzərəsi ilə xarakterizə olunur. Göründüyü kimi, interfensiya mənzərəsinin müşahidə oblastı tədqiq olunan maddələrin kimyəvi tərkiblərindən əhəmiyyətli dərəcədə asılıdır. İnterferensiya mənzərəsinin daha aydın formada müşahidə olunması üçün tədqiq olunan maddələrin optik buraxma əmsallarının spektral asılılıqları ($T(\lambda)$) şəkil.9.-a, b, c-də ayrılıqda təsvir olunmuşdur. Şəkil.9.dan göründüyü kimi, bütün tərkiblərin optik buraxma spektrlərində interferensiya mənzərəsi nisbətən uzun dalğa oblastında müşahidə olunur. Digər tərəfdən bütün tərkiblərə məxsus spektrlərin interferensiya mənzərəsi müşahidə olunan oblastında optik şəffaflığın yüksək olduğu müəyyən olunmuşdur. Qeyd olunduğu kimi optik sındırma əmsalının (n) spektrin uzun dalğa oblastındakı (optik şəffaflığın yüksək olduğu oblastda) qiymətləri Swanpoel modelinə əsasən, qısa dalğa oblastındakı qiymətləri isə empirik olaraq təyin edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, bütün tərkiblər üçün sındırma əmsalının dalğa uzunluğundan asılılığı normal dispersiya qanununa təbə olub, dispersiya enerjisi (E_0) ilə qadağan olunmuş zonanın eni (E_g) arasında $E_0 \approx 2E_g$ - münasibəti ödənilir. Göstərilmişdir ki, tədqiq olunan tərkiblərə məxsus optik sabitlər (n_0 , k , E_0 , E_d , E_g) kimyəvi tərkibdən asılı olaraq nəzərəçarpan dəyişmələrə məruz qalır. Selen atomlarının 0,5 at% miqdarında kükürlə əvəz olunması nəticəsində $\text{As}_{40}\text{Se}_{60}$ - tərkibinin optik sındırma (n_0) və ekstinksiya əmsallarının (k) ədədi qiymətləri azalır, tellurla əvəz olunmuşda isə həmin parametrlərin qiymətləri artır. Lakin selenin kükürd və ya tellurla əvəz olunmasının digər optik parametrlərin (E_0 , E_d , E_g) ədədi qiymətlərinə təsiri əks mənzərə ilə müşayiət olunur. Nəticədə, selen atomlarının 0,5 at% miqdarında kükürlə əvəz olunması osilyatorun enerjisini (E_0) və gücünü (E_d), dispersiya və Taus qanununa əsasən təyin olunan qadağan olunmuş zonanın eninin (E_g) ədədi qiymətlərini artırır, tellurla əvəz olunma isə qeyd olunan parametrlərin ədədi qiymətlərini azaldır. Aparılan kompleks araşdırmalar nəticəsində

müəyyən olunmuşur ki, tədqiq olunan maddələrin tərkibdən asılı olaraq sındırma əmsalının dəyişməsi molyar həcmnin dəyişməsi ilə əlaqədardır. Göstərilmişdir ki, kükürd (S) atomlarının iştirakı maddələrin molyar həcmnin azalmasına, tellur (Te) atomları isə artmasına səbəb olur ki, bu da maddənin polyarlaşma qabiliyyətinin və uyğun olaraq sındırma əmsalının dəyişməsi ilə nəticələnir. Beləliklə, alınan nəticələr onu deməyə imkan verir ki, kükürd(S) atomlarının iştirakı maddənin polyarlaşma qabiliyyətinin zəifləməsinə səbəb olduğu halda, tellur atomları onun güclənməsinə gətirir və nəticədə bu mənzərə sındırma əmsalının ədədi qiymətlərində də öz əksini tapır. Yəni, tərkib dəyişməsinin maddələrin ekstinksiya əmsalına (k) təsiri də anoloji yanaşma ilə şərh oluna bilər.



Şəkil 9. Müxtəlif tərkibli arsen xalkogenidləri üçün interferensiya mənzərəsinin müşahidə oblastında optik buraxma əmsallarının spektral asılılıqları ($T(\lambda)$).

Neytron-difraksiya səpilməsinin nəticələrinə əsasən dissertasiya işində artıq qeyd olunmuşdur ki, selenin kükürd atomları ilə qismən əvəz olunması amorf matrisanın təkmilləşməsinə, tellur atomları ilə əvəz olunma isə həmin təkmil matrisanın qismən pozulmasına yəni, nizamsızlıq dərəcəsinin artmasına gətirməsi, uyğun olaraq birinci halda maddənin $As_{40}Se_{60}$ tərkibi ilə müqayisədə daha çox şəffaflaşmasına (k-nın azalmasına), ikinci halda isə şəffaflığın azalmasına (k-nın artmasına) səbəb olur. Bu fəslin 8.9. paraqrafında şüşələşmə prosesi tədqiq olunaraq, şüşələşmə temperaturu (T_g), maddənin sıxlığı(ρ), amorf matrisanın fiziki, kimyəvi və lokal quruluşunu xarakterizə edən termodinamik və digər parametrlər arasındakı korrelyasiyalar araşdırılmışdır. Göstərilmişir ki, xalkogenid şüşəvari maddələrdə şüşələşmə temperaturu elə termik halı xarakterizə edir ki, temperaturun qiyməti ondan yüksək olduqda amorf matris müxtəlif quruluş konfigurasiyalarına malik olduğu halda, aşağı olduqda nisbətən tarazlıq halına doğru məhdudlaşır. Buna görə də, şüşələşmə temperaturunun amorf quruluşun stabilliyini təmin edən elementlər arasında əlaqəliliyi yaranan qüvvələr və amorf matrisanı xarakterizə edən parametrlərlə bağlı olması birmənalı olaraq iddia olunur. Bu parametrlərə orta koordinasiya ədədini (Z), rabitə enerjisinin orta qiymətini ($\langle E \rangle$), kohersiv enerjini (KE) və s. aid etmək olar. Rabitələrin növü və enjilərinin, koordinasiya ədədinin, əlaqəlilik dərəcəsinin funksiyası olan kohersiv enerji və orta rabitə enerjisinin qiymətinin yüksək olması quruluş elementlərinin parçalanması və mobil obyektlərin yaranmasına mane olur. Xalkogenid şüşələrin tərkib variyasiyasının analitik təsviri göstərir ki, şüşələşmə temperaturunun dəyişməsinin səbəbi amorf matrisanın qurulmasında əsas rol oynayan heteropolyar və homeopolyar əlaqələrin orta enerjisi hesabına yaranan sistemin ümumi orta rabitə enerjisinin dəyişməsidir. Binar və üçqat xalkogenid şüşələrdə rabitə enerjisinin orta qiyməti ($\langle E \rangle$) və şüşələşmə temperaturu arasındakı empirik əlaqəni müəyyənləşdirən aşağıdakı

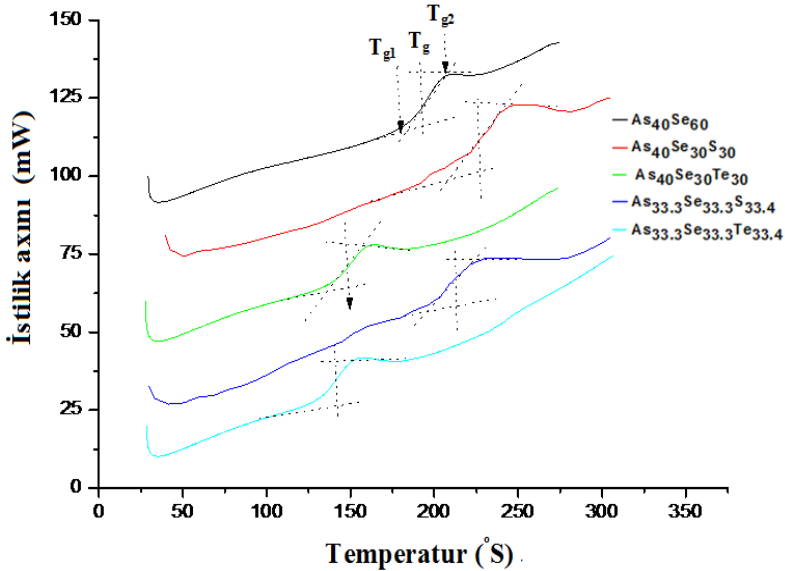
$$T_g = 311[\langle E \rangle - 0,9] \quad (2)$$

düsturundan istifadə edərək şüşələşmə temperaturunun (T_g) empirik, $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$, $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$, $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$

tərkibləri üçün diferensial skanedici kalorimetriya (DSK) əyrilərindən (şəkil.10.) isə təcrübi qiymətləri təyin olunaraq müəyyənləşdirilmişdir ki, onların arasında mükəmməl korrelyasiya mövcuddur. Göstərilmişdir ki, selen atomlarının müəyyən hissəsinin izovalent kükürd və ya tellur atomları ilə əvəz olunması nəticəsində $As_{40}Se_{60}$ şüşəvari tərkibinin şüşələşmə temperaturu nəzərə çarpan dəyişmələrə məruz qalır. Yəni selenin kükürd atomları ilə, əvəz olunması şüşələşmə temperaturunu artırdığı halda, bunun əksinə olaraq tellurla (Te) əvəzləmə- azalmaya gətirir. Göstərilmişdir ki, binar izostatik şüşə halına uyğun $As_{40}Se_{60}$ tərkibində selen atomlarının müəyyən hissəsi izovalent kükürdlə əvəz olunarkən amorf matrisada baş verən dəyişikliklərin, şüşələşmə temperaturunun, rabitə enerjisinin orta qiymətinin, kohersiv enerjinin və qadağan olunmuş zonanın optik eninin (E_g) artması, Raman səpilmə spektrindəki maksimumlar və səpilmə zolaqlarının müşahidə olunmasını təmin edən quruluş elementlərinə ($AsSe_3$, AsS_3) məxsus yüksək enerjili As-S, Se-S, S-S rabitələrinin yaranması ilə əlaqədardır. Kohersiv enerjinin (KE), rabitə enerjisinin orta qiymətinin ($\langle E \rangle$), şüşələşmə temperaturunun (T_g) qiymətlərində müşahidə olunan belə dəyişmələr amorf matrisanı yaradan kimyəvi rabitələrdə baş verən dəyişmələrlə əlaqədardır. $As_{40}Se_{60}$ -tərkibində As-Se və Se-Se kimyəvi rabitələrinin müəyyən hissəsi ilkin olaraq böyük enerjili As-S, S-S, Se-S rabitələri ilə əvəz olunduğu halda, daha sonra aşağı enerjili As-Te, Te-Te və Se-Te rabitələri ilə əvəz olunur. Nəzərə almaq lazımdır ki, ikinci halda qeyd olunan kəmiyyətlərin qiymətlərində daha böyük dəyişmələrin baş verməsi tellur atomlarının iştirakı olan rabitələrin daha aşağı enerjiyə malik olması ilə əlaqədardır. Eyni zamanda məlum olur ki, qeyri-stexiometrik $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,3}$ və $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$ tərkibli nümunələrdə T_g -nin qiyməti stexiometriyaya uyğun olan $As_{40}Se_{30}S_{30}$ və $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ -dən aşağıdır. Bu nəticə qeyri-stexiometrik tərkibli nümunələrdə orta koordinasiya ədədinin qiymətinin ($Z=2,33$) aşağı olması ilə əlaqələndirilir.

Topoloji məhdudiyətlər nəzəriyyəsinə əsasən binar A_xB_{1-x} tərkiblər üçün rabitə gərilməsi (α) və rabitə əyilməsi qarşılıqlı təsir əmsallarını (β_A , β_B) nəzərə alıb, tərkib və şüşəvari şəbəkənin

deformasiya enerjisi (U_s) arasında əlaqə yaradılaraq göstərilir ki, xalkogenid şüşələrin şüşələşmə temperaturu amorf matrisanın səltliyindən, yəni polimer zəncirlərin əlaqəlilik dərəcəsinə asılıdır. Bu halda kovalent rabitə dominantlıq təşkil edən xalkogenid şüşələrin şəbəkə topologiyasının əlaqəliliyinin miqdarca təsvir olunması üçün orta koordinasiya ədədi parametridən (Z) istifadə olunmalıdır. Fiziki olaraq orta koordinasiya ədədi (Z) xalkogenid şüşənin tərkibi ilə onun səltliyi arasındakı korrelyasiyanı müəyyənəlməyə imkan verir. Həmçinin orta koordinasiya ədədi qeyri-kristal maddədə məhdudiyətlərin ümumi sayından (N_{con}), yəni gərilmə (α) və əyilə (β) rabitə qüvvələrinin verdiyi məhdudiyətlərin (N_α və N_β) sayından asılıdır. Həmin nəzəriyyədə göstərilir ki, orta koordinasiya ədədinin (Z) $Z=2,4$ olan kritik qiymətində amorf matrisa elastik haldan (floppy state) səlt hala keçir (rigid state). $Z=2,4$ halı həmçinin izostatik şüşə halı hesab olunur.



Şəkil 10. $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$, $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ xalkogenid şüşəvari maddələrində DSK əyriləri.

Bu halda amorf şəbəkənin qurulmasında qırılmış rabitələr iştirak etmir. Ümumiyyətlə, xalkogenid şüşəvari maddələrdə məhdudiyətlərin sayı mümkün olan sərbəstlik dərəcələrinin sayına bərabədirsə ($N_{\text{con}}=N_d$) “izostatik” şüşə halı əmələ gəlir. Digər tərəfdən izostatik şüşə halında “sıfırıncı” tezlikli rəqs modlarının sayı (M_0) və onların şüşəvari şəbəkədə olan payı (f) sıfıra bərabər olur. Elastik şüşə halının ödənilməsi üçün isə “sıfırıncı” tezlikli rəqs modların payı $f < 0$ şərtini ödəməlidir. Bunun nəticəsində stexiometriyaya uyğun olan tərkiihlərin şüşələşmə temperaturu (T_g) qeyri-stexiometriklərinkindən yüksək qiymətlərə malik olur. Tədqiq olunan maddələrə məxsus kimyəvi rabitələrin nisbi payında gözlənilən dəyişmələr işığın Raman səpilməsində də öz təsdiqini tapır. İşığın Raman səpilməsi spektrinin şərhı göstərir ki, $As_{40}Se_{60}$ tərkibinə xas olan şüşəvari matrisi quruluş elementlərindən, As-Se atomları arasındakı heteropolyar rabitələrdən və az miqdarda selen, arsenium atomları arasındakı homeopolyar rabitələrdən yaranır. Selen atomlarının müəyyən hissəsinin kükürdlə ($As_{40}Se_{30}S_{30}$ və $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$ tərkiblərində) əvəz olunduqda rabitələrinin müəyyən hissəsi yüksək enerjili As-S, Se-S, S-S rabitələri ilə əvəz olunan quruluş elementlərinə xas olan yeni xarakterik maksimumlar və səpilmə zolaqları yaranır. Bu maddələrin amorf matrisasında baş verən dəyişmələr rabitə enerjisinin orta qiymətinin, kohersiv enerjinin, qadağan olunmuş zonanın optik eninin və şüşələşmə temperaturunun artmasına səbəb olur. Selen atomlarının müəyyən hissəsinin tellurla ($As_{40}Se_{30}Te_{30}$ və $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$ tərkibləri) əvəz olunması nəticəsində selen atomlarının iştirak etdiyi quruluş elementlərinə məxsus olan rabitələrin rəqsi ilə əlaqəli olan səpilmə zolaqları zəifləyir və tərkibində daha aşağı rabitə enerjili As-Te, Se-Te, Te-Te rabitələrindən ibarət olan quruluş elementlərinə məxsus səpilmə zolaqları yaranır. Buna görə də, yuxarıda sadalanan parametrlərin əhəmiyyətli dərəcədə azalması baş verir. Şüşəvari matrisanın göstərilən xüsusiyyətlərinin onun energetik xarakteristikalarından (kohesiv enerji, orta rabitə enerjisi və s.) asılılığı ilə yanaşı, mikroquruluş parametrlərindən, o cümlədən atomun ən yaxın qonşularının sayı, növü və qonşu atomlar arası məsafədən də asılıdır. Onların dəyişmələri orta atomar həcm (V_a),

sıxlıq (ρ) və elektromənfiliyin (χ) ədədi qiymətlərinin artmasında öz əksini göstərdiyindən, şüşəvari matrisanın səltliyinin və rabitəlilik dərəcəsinin artmasına gətirir ki, bu da nəticədə şüşələsmə temperaturunun (T_g) artması ilə nəticələnir. Məlum olur ki, $As_{40}Se_{60}$ stexiometrik tərkibində selen (Se) atomlarının yarısının kükürlə əvəzlənməsi ($As_{40}Se_{30}S_{30}$ tərkibi) orta atomar həcm (V_a) zəif azalmasına, elektromənfiliyin (κ) artmasına gətirir. Lakin tellurla izoamorf əvəzləmə ($As_{40}Se_{30}Te_{30}$ tərkibi) bunun əksi ilə nəticələnir. Bu nəticələr $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$ və $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ stexiometrik tərkibli şüşələrdə neytron difraksiya səpilməsinin tədqiqindən alınan nəticələrlə tamamilə uzlaşır. Müvafiq tərkiblərdə neytron-difraksiyası səpilməsinə dair apardığımız tədqiqatlar nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, $As_{40}Se_{60}$ -də selenin kükürlə əvəzlənməsi nəticəsində alınan $As_{40}Se_{30}S_{30}$ tərkibində birinci və ikinci koordinasiya sferasının radiusu (birinci və ikinci tərtib qonşu atomlar arasındakı ən qısa məsafə) və nano-boşluqların diametri kiçilir, tellurla əvəzləmədən alınan $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ -də isə qeyd olunan parametrlər artır.

Doqquzuncu fəsil samariumla aşqarlanmış iki və üçkomponentli şüşəvari xalkogenid yarımkeçiricilər əsasında Al-AsSeTe-Te, Al-AsSeS-Te sendviç strukturlu yeni növ rütubət sensorlarının hazırlanması və onların fiziki, texnoloji imkanlarının müəyyənəşdirilməsinə həsr olunmuşdur. Bu məqsədlə Al- $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$ -Te, Al- $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$ -Te və samariumla aşqarlanmış $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}+1\%Sm$, $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}+2.5\%Sm$ nazik təbəqələri əsasında hazırlanmış sendviç strukturlarında statik rejimdə kontakt potensiallar fərqi nisbi rütubətdən asılılığı və nisbi rütubətin, kontak potensiallar fərqi zaman asılılıqları araşdırılmışdır. Buxarın təsiri ilə həmin sendviç strukturalarda kontakt potensiallar fərqi əmələ gəlməsi hidrosil qrupların üst sensor təbəqə, oksigenin isə alt keçirici kontakt layı tərəfindən adsorbsiyası ilə əlaqələndirilir. Alınmış nəticələr göstərir ki, təqribən nisbi rütubətin qiymətinin 62% -həddinə qədər kontakt potensiallar fərqi nisbi rütubətdən asılılıqları eynidir. Lakin qeyd olunan qiymətdən başlayaraq asılılığın dərəcəsi $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$ tərkibi üçün $n=0,7$ olduğu halda, aşqarın təsiri ilə onun qiyməti $n=0,12$ -ə qədər

azalır. Müəyyən olunmuşdur ki, aşqarsız Al-As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}-Te strukturunda kontakt potensiallar fərqinin 0-dan 10.5 mV-a kimi artması 560 saniyə ərzində baş verir. Samariumla (Sm) aşqarlanmış nümunələrdə bu müddət daha da böyükdür. Tədqiqat göstərir ki, Al-As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}-Te strukturunda nisbi rütubətin artması daha sürətlə baş verir. Lakin termik tablamadan sonra samariumla aşqarlanmış Al-As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}+1%Sm-Te sensor təbəqələrində xarakteristikalar kəskin olaraq təkmilləşir, daha doğrusu termik tablamadan sonra samariumla aşqarlanmış Al-As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}+1%Sm-Te sensor strukturlarında ətalətlilik digər tərkiblərlə müqayisədə 2-4 dəfə kiçilir. Bu təcrübi nəticə Al-As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}+1%Sm-Te-un rütubət sensoru kimi, tətbiq imkanını artırır. Termik tablamadan sonra alınan nəticə aşağıdakı kimi, izah olunur. Fərz olunur ki, Sm ionları amorf matrisaya müsbət ion kimi daxil olduğundan üst sensitiv təbəqədə mənfi hidrosil qruplarını nisbətən neytrallaşdırır. Bunun nəticəsində üst sensitiv təbəqədə adsorbsiya olunan hidrogenlə alt keçirici layda adsorbsiya olunan mənfi oksigen atomlarının hesabına potensiallar fərqi artır. Göstərilmişdir ki, tədqiq olunan xalkogenid şüşələrdə rütubətin təsiri ilə həcmi keçiriciliyin dəyişməsi elektron prosesi olduğundan olduqca sürətli müşahidə olunur və bu maddələrdən hazırlanan sensorların rütubətə qarşı reaksiya və dönərlilik müddəti olduqca kiçikdir (cəmi bir neçə saniyə). Dissertasiya işinin bu fəsilində hazırkı dövrə qədər olduqca məhdud araşdırılan xalkogenid şüşələr əsasında həssaslığı yüksək, ölçüləri kompakt, dəyəri və enerji sərfi aşağı və buxarın adsorbsiyası olduqca nəzərə çarpacaq deformasiyaya məruz qalmayan rütubət sensorların mümkün tətbiq perspektivləri müəyyənləşdirilmişdir. Göstərilmişdir ki, xalkogenid şüşəvari yarımkeçirici (XŞY) materiallar əsasında hazırlanan rütubət sensorları aşağıdakı üstün fiziki və texnoloji xüsusiyyətlərinə görə perspektiv hesab oluna bilər. Xalkogenid şüşələrdən (As₂(Se_{0,9}Te_{0,1})₃, As₂Se₃) nazik amorf təbəqələr şəklində hazırlanan sensorların həssaslığı onların tərkibindən asılı olub, rütubətin təsiri ilə həcmi keçiriciliyin dəyişməsi (elektron prosesi olduğundan) olduqca sürətli baş verir. XŞY maddələr əsasında olan sensorlar həssaslığı yüksək, ölçüləri kompakt, dəyəri və enerji sərfi aşağı

olmaqla bərabər, otaq temperaturunda da işləyir. Xalkogenid şüşəvari nazik təbəqələri əsasında hazırlanan rezistiv sensorlar propilamin ($C_3H_7NH_2$) və azot dioksid (NO_2) mühitinə yüksək dərəcədə həssas olub, rütubətə qarşı mütəhərək reaksiya, yüksək bərpa olunma və dönərlilik xüsusiyyətlərinə malik olduğundan, göstərilən mühitlərin monitorinqi üçün uğurla tətbiq oluna bilər. Yüksək bircinsliliyə malik XŞY-lər və onların əsasında sensorların hazırlanma texnologiyası sadədir. Su buxarının adsorbsiyası zamanı kəskin deformasiya müşahidə olunmur və parametrlər stabildir. Xalkogenid şüşəvari maddələr əsasında olan sensorlar rütubətlə yanaşı, işıqlanmaya və temperaturun dəyişməsinə həssas olduğundan, nadir sənət əsərlərinin saxlandığı müzeylərdə istifadə oluna bilər. Bu maddələrdən hazırlanan sensorların rütubətə qarşı reaksiya və dönərlilik müddəti olduqca kiçikdir (bir neçə saniyə tərtibində).

NƏTİCƏ

1. AsSe(S,Te) xalkogenid şüşəvari yarımkəçiricilərdə korrelyasiya funksiyalarının radial məsafədən asılılıqlarına məxsus təkrarlanan maksimumların və quruluş əmsallarının qrafiklərində birinci kəskin difraksiya piklərinin varlığı orta nizam oblastlarının mövcudluğu ilə əlaqədardır.
2. Neytron-difraksiya səpilməsinin nəticələri göstərir ki, As_xSe_{100-x} tərkibində selenin 0,5 at% nisbətində izovalent kükürd və ya tellur atomları ilə əvəzlənməsi həm homeopolyar, həm də heteropolyar rabitələrin yekun koordinasiya ədədlərinin dəyişməsinə səbəb olur. Birinciləri kükürd artırır (1,12-dən -1,18 -ə qədər), tellur isə azaldır (1,18-dən - 0,56 -ə qədər), ikinciləri isə kükürd azaldır (2,36 –dan 2,27 -ə qədər) tellur isə artırır (2,36 –dan 2,65 - ə qədər). Bu fakt xalkogen atomlarından ibarət olan zəncir və həlqəvi molekulların nisbi miqdarının dəyişməsi ilə izah olunur.
3. Göstərilmişdir ki, bütün stexiometrik tərkiblərdə yekun koordinasiya ədədləri 2.4 olub, Mottun 8-N qaydasını ödəyir və onların məxsusi amorf matrisası əsasən piramidal tipli $AsSe_3$, AsS_3 , $AsTe_3$ quruluş elementlərindən təşkil olunmuşdur.

4. Tədqiq olunan maddələrin amorf matrisasına məxsus homeopolyar və heteropolyar rabitələrin paylanması xaotik xarakter daşdığından qeyri-stexiometrik hala keçid zamanı orta nizam ölçüsünün və birinci kəskin difraksiya piki amplitudunun azalması qalığ xalkogen atomlarının konsentrasiyası və homeopolyar rabitələrin nisbi payının artması ilə əlaqədardır.
5. Xalkogenid şüşəvari $As_{32.3}Se_{32.55}S_{32.65}:Sm_x$, $As_{32.3}Se_{32.55}S_{32.65}:Dy_x$, $As_{31.3}Se_{31.8}S_{31.9}:Dy_x$ ($x=0; 2,5; 5$ at%) tərkiblərinə daxil edilmiş samarium və disprozium atomları yüksək kimyəvi aktivlikləri sayəsində amorf matrisanı əmələ gətirən əsas quruluş elementləri arasında ($AsSe_3$, AsS_3) kimyəvi əlaqə yaradaraq nizamlılıq dərəcəsini, korrelyasiya məsafəsini və kvaziperiodu artırır.
6. Stexiometrik tərkibli $As_{40}Se_{60}$ -də selenin qismən kükürd və ya tellurla əvəz olunması elektron-fonon qarşılıqlı təsirinin artması, xüsusilə Te olan qeyri-stexiometrik tərkiblərdə daha da güclənməsi ilə müşayiət olunur ki, bu da quruluşun nizamsızlıq dərəcəsinin artması ilə, tərkiblərin belə dəyişməsi zamanı eksponensial udma oblastına xas olan Urbax enerjisinin artması və qadağan olunmuş zonanın eninin kiçilməsi isə Urbax enerjisinin icazəli zonaların kənarındakı lokal hallar oblastına aid olması ilə əlaqədardır.
7. Binar $As_{40}Se_{60}$ -də selen atomlarının müəyyən hissəsi izovalent kükürdlə əvəz olunarkən amorf matrisada baş verən dəyişikliklərin, şüşələşmə temperaturunun, rabitə enerjisinin orta qiymətinin, kohersiv enerjinin və qadağan olunmuş zonanın optik eninin (E_g) artması, Raman səpilmə spektrindəki maksimumlar və səpilmə zolaqlarının müşahidə olunmasını təmin edən quruluş elementlərinə ($AsSe_3$, AsS_3) məxsus yüksək enerjili As-S, Se-S, S-S rabitələrinin yaranması ilə, əlaqədardır.
8. Şüşəvari matrisanın fiziki xassələrinin energetik xarakteristikalardan, mikroquruluş parametrlərindən, o cümlədən atomun ən yaxın qonşularının sayı, növü və qonşu atomlararası məsafədən asılılığı, qablaşma sıxlığının (χ) və elektromənfiliyin artması (χ), matrisanın sərtliyinin, rabitəlilik dərəcəsinin və şüşələşmə temperaturunun dəyişməsinə səbəb olur.

9. Müxtəlif tərkibli As_xSe_{100-x} , $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$, $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$; $x=33,3$; $y=33,3$ at%) sistemlərində kiçik bucaq altında neytron səpilməsinin nəticələri və təcrübi təyin olunan sıxlığın ayrı-ayrı komponentlərin sıxlığına əsasən hesablanmış sıxlıqdan kiçik olması həmin maddələrdə sərbəst həcmli mikrooblastların varlığı ilə bağlıdır.
10. As_xSe_{100-x} , $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$, $As_xSe_yS_{100-x-y}$, $As_xSe_yTe_{100-x-y}$ ($x=40$; $y=30$; $x=33,3$; $y=33,3$ at%) sistemlərinə məxsus kiçik bucaq altında neytron səpilməsi intensivliyinin səpilmə vektorundan asılılıqlarında Porod qanunundan qismən kənarçıxmanın səthdən diffuz səpilmə ilə bağlı olduğu, Porod əmsalının qiymətindəki dəyişikliklərin isə qeyri-bircins paylanmış səpici oblastların varlığı ilə əlaqədar olduğu müəyyənləşdirilmişdir.
11. Samariumla aşqarlanma hesabına Porod asılılığının qüvvət üstünün (n) $As_{32,3}Se_{32,55}Te_{32,65}:Sm_x$ ($x=2,5$ at%) şüşəvari tərkib üçün $n=3$, 85-ə kimi azalması səthinin fraktal ölçüləri $3 < n = 6 - D_s \leq 4$ şərtini ödəyən üçölçülü oblastlardan səpilmənin mövcudluğu ilə əlaqədardır.
12. Təmiz və samariumla aşqarlanmış As-Se-S, As-Se-Te yarımkeçiricilərin səth morfoloqiyasının, geniş spektral oblastda optik xassələrinin, sendviç quruluşa malik həmin obyektlərdə statik rejimdə kontakt potensialları fərqinin nisbi rütubətdən asılılığının tədqiqi nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, samariumla aşqarlanmış As-Se-S, As-Se-Te nümunələr lifli optika üçün, sendviç quruluşlu Al- $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}+2,5\%Sm-Te$, Al- $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}+1\%Sm-Te$ təbəqələri isə rütubət sensorları üçün perspektiv materiallardır.

Dissertasiyanın mövzusu üzrə dərc olunmuş işlərin siyahısı

1. Alekberov, R.I. Modification of amorphous film structure of chalcogenide glasslike semiconductors due to the change of their chemical composition/R.I. Alekberov, A. I. Isayev, S.I. Mekhtiyeva, G.A. Isayeva // Chalcogenide Letters,-2013 10(9), - p.335-339.
2. Алекберов, Р.И. Комбинационное рассеяние света в халькогенидных стеклообразных полупроводниках As-Se-S и As-Se-Te /Р.И. Алекберов, С.И. Мехтиева, Г.А. Исаева, А.И. Исаев //ФТП, -2014, 48(6), -с.823-826.
3. Алекберов, Р.И., Роль атомов самария в формировании структуры халькогенидных стеклообразных полупроводников As-Se-S / Р.И. Алекберов, С.И. Мехтиева, А.И. Исаев, Г.А. Исаева, // ФТП, -2014, 48(6), -с.818-822.
4. Алекберов, Р.И. Структурные особенности аморфных полупроводников $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$ и $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$ с добавками самария / Р.И. Алекберов, С.И. Мехтиева, Г.А. Исаева, А.И. Исаев //Физика и Химия Стекла, -2014, 40(5), - с. 725 -728.
5. Алекберов, Р.И. Особенности спектра низкочастотное рассеяние света в халькогенидных стеклообразных полупроводниках As-Se-S и As-Se-Te легированные самарием/ Р.И. Алекберов, С.И. Мехтиева, Г.А. Исаева, А.И. Исаев // АМЕА Хəбərləг, fiz.texn. və riy. ser, -2014, XXXIII, No.2, -s.21-32.
6. Alekberov, R.I. Boson peak and nanostructure of chalcogenide glass-like semiconductors/ R.I. Alekberov, G.A. Isayeva, S.I. Mekhtiyeva [et al.] // Journal of Advances in Physics, -2014, 6(3),-p.1259-1262.
7. İsayeva, G. A., Alekberov, R. İ., Mekhtiyeva, S.İ., İsayev, A.İ. Low-frequency Raman spectra and nanostructure of As-Se-S and As-Se-Te chalcogenide semiconductors doped with samarium// Proc. SPIE Proceedings "Reflection, Scattering and Diffraction from Surfaces",- California, USA:- 5 September,- 2014, -p. 92050C2-92050C7

8. Alekberov, R.I., Isayeva, G.A., Mekhtiyeva, S.I., Isayev, A.I. Boson peak and nanostructure of chalcogenide glass-like semiconductors//The 7th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics,– Chisinau, Republic of Moldova: –16 September –19 September, –2014,–p.206.
9. Алекберов, Р.И.Влияние химического состава на спектр комбинационного рассеяние света в халькогенидных стеклообразных полупроводниках/ Р.И. Алекберов, С.И. Мехтиева, Г.А. Исаева, А.И. Исаев // АМЕА Хəбərlər, fiz.texn. və riy. ser., –2015, №2, – s.16-22.
10. Isayev, A. I. The influence of doping by samarium on the structure and surface morphology of the $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ chalcogenide glass semiconductor films/ A. I. Isayev, S.I. Mekhtiyeva, R.I. Alekberov, N.T.Hasanov //7th international conference “Amorphous and Nanostructured Chalcogenides”,– Cluj-Napoca, Romania: –5 July –10July, – 2015, -p.17.
11. Isayev, A. I., Mekhtiyeva, S. I., Alekberov, R. I. The influence of doping by samarium on the structure and surface morphology of the $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ chalcogenide glass semiconductor films //Journal of optoelectronics and advanced materials, –2016, 18(1), – p. 39-43.
12. Alekberov, R.I. The study of humidity sensors having sandwich structure based on chalcogenide glasses// Journal of Advances in Physics, –2016, 12(1), 2016, – p.4148-4152.
13. Alekberov, R.I., Mekhtiyeva, S.I., Isayev, A.I., Fabian, M., Almasy, L., Tian, Q. The local structure of As-Se-S and As-Se-Te chalcogenide glasses doped by samarium // The 8th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics, – Chisinau, Republic of Moldova,–2016,–p.231.
14. Alekberov, R.I., Fabián, M., Isayev, A. I., Mekhtiyeva, S.I. The local structure and optical properties of $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ chalcogenide glasses// The 8th International Conference on “Amorphous and Nanostructured Chalcogenides” , –Sinaia, Romania: –2 July–5 July,– 2017, – p.14.

15. Alekberov, R.I. / Small angle neutron scattering and raman measurements As-Se-S and As-Se-Te chalcogenide glassy semiconductors doped by samarium / R.I. Alekberov, A.I. Isayev, S.I. Mekhtiyeva, M. Fabian, Q. Tian, L. Almasy // Chalcogenide Letters, –2017, 14(3), –p.79-85.
16. Alekberov, R.I. The local structure of As-Se-S chalcogenide glasses studied by neutron diffraction and Raman scattering / R.I. Alekberov, S. I. Mekhtiyeva, A.I. Isayev, M. Fabian // J. Non - Crystalline Solids, –2017, 470(15), –p.152-159.
17. Alekberov, R.I., Isayev, A.I., Mekhtiyeva, S.I., Akberov, H.K. Optical properties of As-Se-Te(S) chalcogenide glasses //14th International Conference on “Technical and Physical Problems of Electrical Engineering”,– Nakhchivan State University: –15 October–17 October, –2018, –p.119-123.
18. Alekberov, R.I., Isayev, A.I., Mekhtiyeva, S.I., Fabian, M. Neutron diffraction study of $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ chalcogenide glasses// Academician G.B. Abdullayev Centenary International Conference and School “Modern Trends in Condensed Matter Physics” (MTCMP-2018),–Baku: –24 September–26 September, –2018, –p.32.
19. Alekberov, R.I., Isayev, A.I., Mekhtiyeva, S.I. The analysis of optical constants for $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ compositions//“Аморфные и микрокристаллические полупроводники “ Сборник трудов Международной конференции”, – Санкт-Петербург, Российская Федерация: –19 ноября –21 ноября, –2018, – p.110-111.
20. Alekberov, R.I. Local structures and optical properties of As-Se-Te(S) chalcogenide glasses/ R.I. Alekberov, A.I. Isayev, S.I. Mekhtiyeva, M. Fábíán // Physica B: Condensed Matter, –2018, 550(1), –p.367-375.
21. Alekberov, R.I. Neutron diffraction study of $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ chalcogenide glasses/ R.I. Alekberov, A.I. Isayev, S.I. Mekhtiyeva, M. Fabian // -Bakı: Azerbaijan Journal of Physics, –2018, 24(3), –p.21-23.

22. Alekberov, R.I. Optical properties of As-Se-Te(S) chalcogenide glasses./ R.I. Alekberov, A.I. Isayev, S.I. Mehdiyeva, H.K. Akberov// International Journal on “Technical and Physical Problems of Engineering” (IJTPE), - 2019, 11(3), –p.18-22.
23. Mekhtiyeva, S. I., Isayev, A.I., Alekberov, R.I. The optical and energy parameters of $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ chalcogenide glasses/9th International Conference on “Amorphous and Nanostructured Chalcogenides”,– Chisinau, Republic of Moldova:–30June-04July, –2019, -p.49-50.
24. Ələkbərov, R.İ. As-Se, As-Se-S və As-Se-Te şüşəvari xalkogenid yarımkeçirici sistemlərinin optik xassələri. //-Bakı: Azerbaijan Journal of Physics, –2019, 25(2),–p.2-9.
25. Ələkbərov, R.İ. As-Se, As-Se-S və As-Se-Te şüşəvari sistemlərin optik xassələri və onlarda elektron fonon qarşılıqlı təsiri//-Bakı: AMEA Xəbərləri. Fizika-Texnika və Riyaziyyat elmləri seriyası. Fizika və Astronomiya, –2019, 39(5),–p.129-134.
26. Ələkbərov, R.İ. Samarium və disproziumla legirələnmiş qeyri-stexiometrik $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$ şüşəvari tərkibində birinci kəskin difraksiya pikinin tədqiqi// AMEA Xəbərləri. Fizika-Texnika və Riyaziyyat elmləri seriyası. Fizika və Astronomiya, –2019, XXXIX(5), –p.51-55.
27. Ələkbərov, R.İ. Şüşəvari xalkogenid As-Se, As-Se-S və As-Se-Te yarımkeçirici sistemlərinin şüşələşmə temperaturları ilə fiziki parametrləri (V_a, κ, Z, E) arasında korrelyasiya//-Bakı: Azerbaijan Journal of Physics, –2019, 25(2),–p.9-12.
28. Alekberov, R. İ., Isayev, A.I., Mekhtiyeva, S.İ. Features of the optical absorption, phonon spectrum and glass transition in As-Se, As-Se-S, As-Se-Te chalcogenide semiconductors// Journal of Optoelectronics and Advanced materials, –2020, 22(11), –p.596-605

29. Alekberov, R. İ., İsayev, A.I., Mekhtiyeva, S.İ. Features of Raman scattering and X-ray diffraction in As-Se-Te(S) chalcogenide glasses doped by samarium// XII International Conference "Electronic Processes in Organic and Inorganic Materials" (ICEPOM-12),- Kamianets-Podilsky, Ukraine:-1-5 June,-2020, -p.93.
30. Alekberov, R. İ., İsayev, A.I., Mekhtiyeva, S.I. Features of Raman scattering and X-ray diffraction in As-Se-Te(S) chalcogenide glasses doped by samarium// Molecular Crystals and Liquid Crystals,-2021, 717(1),- p24-31.
31. R.I. Alekberov, A.I. Isayev, S.I. Mekhtiyeva. Study of the glass transition for the various As_40Se_{60} , $As_40Se_{30}S_{30}$, $As_40Se_{30}Te_{30}$, $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$, $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$ glass compositions/ XII Международной конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники»,-Санкт-Петербург, Российская Федерация: -5 июля-5 июля, -2021, - с.79

Dissertasiyanın müdafiəsi 06 aprel 2022-ci il tarixində saat 11⁰⁰ da Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya şurasının iclasında keçiriləcək.

Ünvan: Az-1143, Bakı şəh., H. Cavid pr. 131

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

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

Avtoreferat 03 Mart 2022-ci il tarixində zəruri ünvanlara göndərilmişdir.

Çapa imzalanıb: 01.03.2022

Kağızın formatı: A5

Həcm:80189

Tiraj: 100