

DOI: <https://doi.org/10.36719/2663-4619/114/256-262>

Aysel Həmzəyeva

Gəncə Dövlət Universiteti

fizika üzrə fəlsəfə doktoru

<https://orcid.org/0009-0002-3219-6776>

ayselhemzeyeva15@gmail.com

ASPE+xhəcm%Bi₂Te₃ kompozitlərin optik sabitlərinin hesablanması

Xülasə

Məqalədə aşağı sıxlıqlı polietilenə Bi₂Te₃ birləşməsindən əlavələr etməklə alınmış kompozitlərdə optik sabitlərin tədqiqi barədə məlumatlar verilmişdir. Tədqiqatda kompozit materialların sındırma əmsalının həqiqi (n) və xəyali (k) hissələri, udma (α) və qayıtma (R) əmsalları, elektrik enerji itkiləri, optik elektrik keçiriciliklərinin həqiqi və xəyali hissələrinin tezlikdən asılılığının nəzəri üsulla nəticələri hesablanmışdır. Alınan nəticələr göstərir ki, Bi₂Te₃ doldurucusunun konsentrasiyası artdıqca kompozit materialların dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinə əsasən hesablanmış optik sabitlər müəyyən dəyişikliklərə məruz qalır. Çox ehtimal ki, bu Bi₂Te₃ doldurucusunun həcm payının artması ilə kompozitin səthində onlara düşən payı, yəni onların yaratdıqları klasterlərin artmasının nəticəsi kimi izah oluna bilər. Kompozit materialların optik sabitlərinin düzgün hesablanması, bu materialların daha səmərəli şəkildə istifadə olunmasını təmin edir və onların optik texnologiyalarda fotonika, optik kabellər, lazer sistemləri və günəş enerjisi tətbiqlərində effektivliyini artırır.

Açar sözlər: *aşağı sıxlıqlı polietilen, Bi₂Te₃, kompozit materiallar, optik sabitlər*

Aysel Hamzayeva

Ganja State University

PhD in Physics

<https://orcid.org/0009-0002-3219-6776>

ayselhemzeyeva15@gmail.com

Calculation of Optical Constants of ASPE+xvol%Bi₂Te₃ Composites

Abstract

The article provides information on the study of optical constants in composites obtained by adding Bi₂Te₃ compounds to low-density polyethylene. In the study, the real (n) and imaginary (k) parts of the refractive index of composite materials, absorption (α) and reflection (R) coefficients, electrical energy losses and frequency dependence of the real and imaginary parts of optical electrical conductivity were theoretically calculated. The obtained results show that as the concentration of Bi₂Te₃ filler increases, the optical constants calculated according to the real and imaginary parts of the dielectric permittivity of composite materials undergo certain changes. Most likely, this can be explained by the increase in the volume fraction of Bi₂Te₃ filler and the increase in their share on the composite surface, i.e. the clusters they form. Correct calculation of optical constants of composite materials allows more efficient use of these materials and increases their effectiveness in optical technologies, photonics, optical cables, laser systems and solar energy applications.

Keywords: *low-density polyethylene, Bi₂Te₃, composite materials, optical constants*

Giriş

Məlum olduğu kimi, dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsi işığın udulması ilə birbaşa əlaqədardır. Elektronlar həv enerjili fotonu udduqda dalğa vektorlu elektronların valent zonasından keçirici zonaya keçməsi baş verir. Tamamilə aydındır ki, işığın udulması bu keçidlərin ehtimalı ilə

birbaşa əlaqədardır. Ona görə də, dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsi optik tezlik diapazonunda valent zonası ilə keçiricilik zonası arasındakı optik keçidlərinin hal sıxlıqlarını təyin etməyə imkan verir. Kompleks dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsinin tezlikdən asılılığını təyin etmək üçün (Lushcheykin, Petrov, 1981)-də təklif olunan münasibətdən və (Kafarova, Kerimova, Safarova, et al., 2004)-də təklif olunan üsuldən istifadə edilmişdir.

$$\varepsilon_i(E) = \frac{N}{E^2} \sum_{k \in BZ} \sum_{v,c} |\vec{e} \cdot \vec{M}_c(\vec{k})|^2 \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - E) \quad (1)$$

burada M_e -elektronun kütləsi, e -yükü, E -düşən elektromaqnit dalğasında fotonun enerjisi, $\vec{k}$ -dalğa vektoru, $\vec{e}$ -vahid vektor (polyarlaşma vektoru),

$M_{cv}(\vec{k}) - (\vec{p} = -i\hbar\nabla)$ impuls operatorunun matris elementidir.

$$\vec{e} \cdot \vec{M}_{cv}(\vec{k}) = \langle \psi_{ck}(\vec{r}) | \vec{e} \cdot \vec{p} | \psi_{vk}(\vec{r}) \rangle = \vec{e} \cdot \int \psi_{cv}^*(\vec{r}) (-i\hbar\nabla) \psi_{vk}(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (2)$$

ψ_{ck} və ψ_{vk} müvafiq olaraq keçiricilik və valent zonalarında elektronların hal funksiyaları, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$; h -Plank sabitidir. V və C - indeksləri valent və keçiricilik zonalarını ifadə edir (Khayal, Muheddin, Mohammed, Ezat, Murad, Ahmed, Hussen, Ahmed, Hamad, Abdullah, Aziz, 2024). N -normalaşdırıcı vuruğu aşağıdakı normalama şərtindən tapılır:

$$\int_0^\infty E \varepsilon_i(E) dE = \frac{\pi}{2\hbar^2} \omega_p^2 = \frac{\pi}{2\hbar^2} \cdot \frac{4\pi n_e e^2}{m_e} \quad (3)$$

burada ω_p -elektronlar üçün plazmon tezliyi, m_e - elektronun kütləsi, n_e -kristalda elektronların orta sıxlığıdır. Histoqramma təxminən 0.2eV addımla qurulmuş və 6eV enerjiyə qədər bütün $V \rightarrow C$ keçidləri nəzərə alınmışdır (Chiang, Leung, Tse, 1997), (Voshchinnikov, Il'in, Henning, 2005). 6eV-dan yüksək enerjilərdə $\varepsilon_i(E)$ asılılığı məlum $\varepsilon_i(E)|_{E \rightarrow \infty} \approx E^{-3}$ düsturu ilə ekstrapolyasiya edilmişdir. Dielektrik nüfuzluğunun real hissəsi Kramers-Kroniqin integral dispersion münasibəti ilə hesablanmışdır (Hlubina, Ciprian, Lunacek, 2009; Ren, Chow, Meng, Wang, Lu, Ma, Wang, Xu, Gambling, 2001).

$$\varepsilon_r(E) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty E' \varepsilon_i(E') \cdot \frac{dE'}{E'^2 - E^2}, \quad (4)$$

burada P -simvolu ilə integralın baş qiyməti ifadə edilir (Ponyavina, Kachan, Tselesh, 2012). $E \leq \hbar\omega$ enerjili keçidlərdə iştirak edən bir atoma düşən valent elektronlarının effektiv sayı

$$n_{eff}(E) = \frac{m_e}{2\pi^2 e^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n_a} \int_0^E \varepsilon_i(E') E' dE' \quad (5)$$

düsturu ilə hesablanı bilər (Potter 1965; Sajnani, Hegde, Shetty, 2014; Brako 1997). Burada n_a -kristalda atomların sıxlığını ifadə edir. Əsas sındırma əmsalı (sındırma əmsalının həqiqi hissəsi)

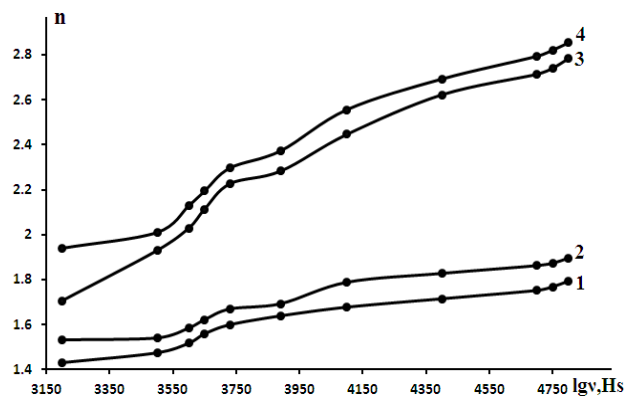
$$n = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\varepsilon_r + \sqrt{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2} \right)} \quad (6)$$

ASPE+xhəcm%Bi₂Te₃kompozitlərin sındırma əmsalının həqiqi qiymətinin tezlikdən asılılığı şəkil 1-də verilmişdir. Kompozitlərin sındırma əmsalının həqiqi qiymətinin tezlikdən asılılıqları (Abeles, 1978).

$$\rho_{Bi_2Te_3} \frac{\varepsilon_{Bi_2Te_3} - \varepsilon_{ef}}{\varepsilon_{Bi_2Te_3} + 2\varepsilon_{ef}} + \rho_{PE} \frac{\varepsilon_{PE} - \varepsilon_{ef}}{\varepsilon_{PE} + 2\varepsilon_{ef}} = 0$$

düsturu ilə hesablanmışdır.

Tədqiqatlar 5, 10, 15 və 20 həcm % Bi₂Te₃ tərkibli kompozitlərdə aparılmışdır. Şəkildən görüldüyü kimi sındırma əmsalı bütün tezlik oblastında (0-5)kHs oblastında artır. Bu artma tezliyi 3500-3730 Hs intervalında nisbətən kəskin olur, amma ümumilikdə sındırma əmsalı bütün tezlik diapazonunda artır.

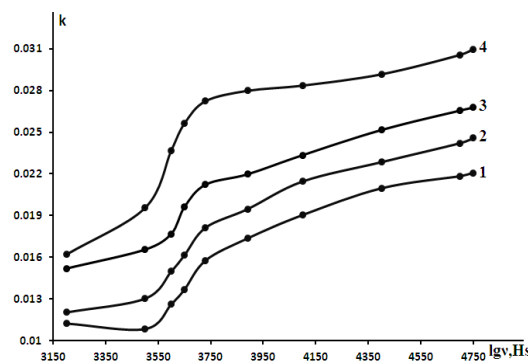


Şəkil 1. ASPE+xhəcm%Bi₂Te₃kompozitlərin sındırma əmsallarının həqiqi hissəsinin tezlikdən asılılıqları: 1-x=5; 2-x=10; 3-x=15; 4-x=20;

Kompozitlərin sındırma əmsalının xəyali qiymətinin tezlikdən asılılıqları aşağıdakı düstur ilə hesablanmışdır:

$$k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(-\varepsilon_r + \sqrt{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2} \right)} \quad (7)$$

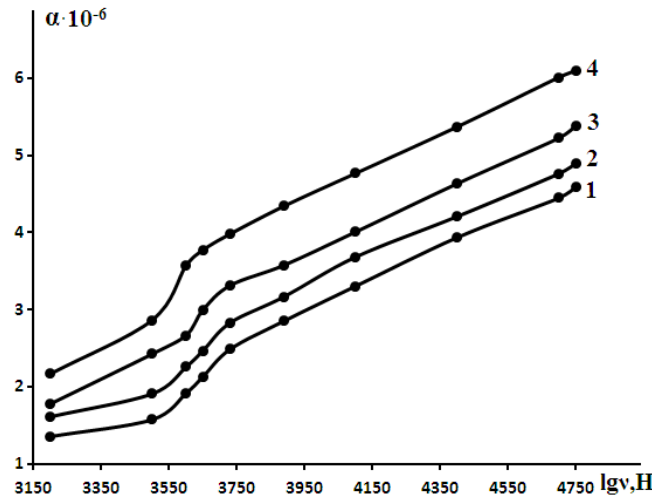
Sındırma əmsalının xəyali hissəsi üçün də artma bütün tezlik diapazonunda müşahidə edilir (şəkil 2). Amma 3500-3730 Hs tezlik diapazonunda k-nın artması kəskin olur, digər tezlik diapazonlarında k-nın monoton olaraq artması müşahidə edilir.



Şəkil 2. ASPE+xhəcm%Bi₂Te₃kompozitlərin sındırma əmsallarının xəyali hissəsinin tezlikdən asılılıqları: 1-x=5; 2-x=10; 3-x=15; 4-x=20;

Udma əmsalı (8) düsturu ilə hesablanmış və alınmış nəticələr şəkil 3-də verilib. Göründüyü kimi tədqiq olunan tezlik diapazonunda, 3500-3730 Hs tezlik diapazonu istisna olmaqla bütün tezlik diapazonunda $\alpha(\nu)$ asılılığı xəttidir.

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi}{\lambda} k(\omega) = \frac{2}{c} \omega k \quad (8)$$

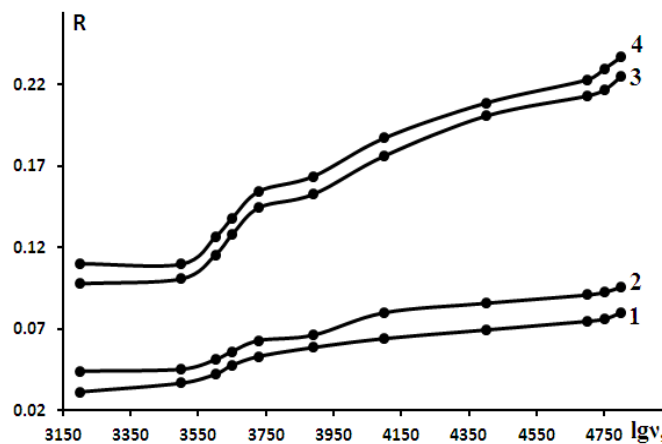


Şəkil 3. ASPe+xhəcm%BizTe₃kompozitlərin udma əmsallarının tezlikdən asılılıqları: 1-x=5; 2-x=10; 3-x=15; 4-x=20;

Kompozitlərin (R) qaytarma əmsalı

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (9)$$

düsturu ilə hesablanmışdır. Şəkil 4-də verilmiş nəticələrə görə tərkibində 5, 10həcm%BizTe₃ doldurucusu olan kompozitlər üçün R(ν) asılılığının xarakteri eynidir. Yəni, tədqiq olunan bütün tezlik diapazonunda qaytarma əmsalı tezliyin artması ilə xətti qanunla artır. Amma tərkibində BizTe₃ doldurucusunun miqdarı 15, 20həcm%BizTe₃ olan nümunələrdə yüksək 3730-4800 Hs tezlik diapazonunda qaytarma əmsalının daha kəskin artması aşkar edilib. 4800Hs tezlikdə tərkibində 5 həcm%BizTe₃ əlavəsi olan kompozitin qaytarma əmsalı 0,08 olduğu halda, eyni həmin tezlikdə 20



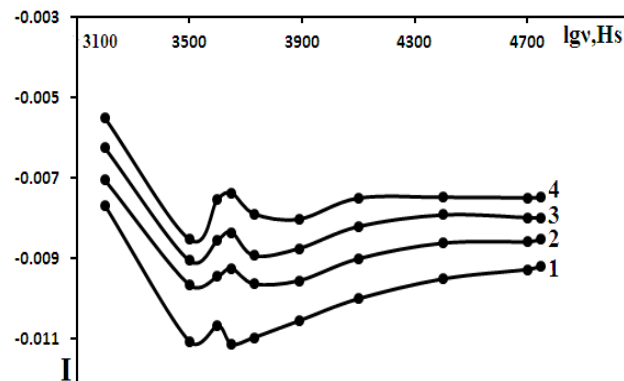
Şəkil 4. ASPe+xhəcm%BizTe₃kompozitlərin qaytarma əmsallarının tezlikdən asılılıqları: 1-x=5; 2-x=10; 3-x=15; 4-x=20;

həcm%Bi₂Te₃-ə uyğun kompozitdə bu əmsal 0,24 olmuşdur.

Elektronların enerji itkisinin xarakterik funksiyasının tezlikdən asılı olaraq dəyişməsi ASPE+xhəcm%Bi₂Te₃ kompozitləri üçün şəkil 5-də verilmiş və

$$-I_m \left(\frac{1}{\varepsilon} \right) = \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2} \quad (10)$$

düsturu ilə hesablanmışdır.



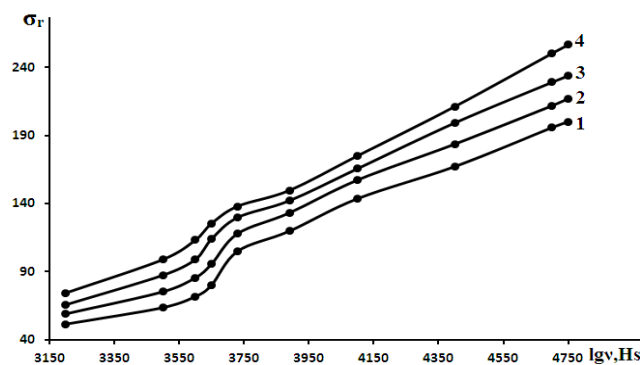
Şəkil 5. ASPE+xhəcm%Bi₂Te₃ kompozitlərin elektrik enerji itkilərinin tezlikdən asılılıqları: 1-x=5; 2-x=10; 3-x=15; 4-x=20;

Göründüyü kimi tədqiq olunan bütün kompozitlər üçün tezliyin 3200-3500 Hs intervalında dəyişməsi zamanı enerji itkisinin kəskin azalması, 3600 Hs tezliyi ətrafında xarakterik olaraq bütün nümunələrdə aydın ifadə olunmuş maksimumlar, tezliyin sonrakı artması halında isə enerji itkisinin cüzi dəyişməsi aşkar edilmişdir.

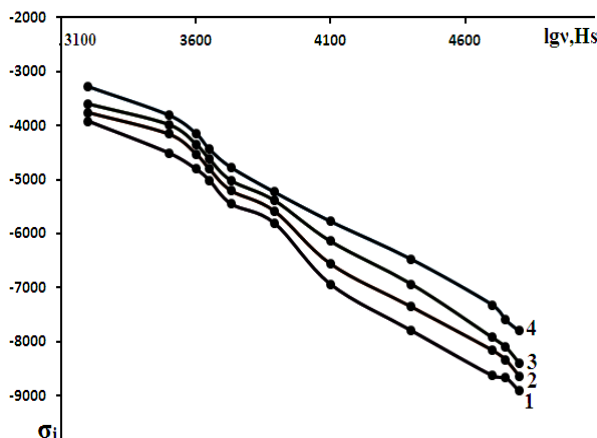
Dielektrik nüfuzluğunun məlum qiymətlərinə əsasən kompozitlərin optik elektrik keçiriciliklərinin həqiqi və xəyali hissələri də hesablanmışdır. Hesablamalar (11) və (12) düsturları ilə aparılmış və nəticələr şəkil 6 və 7-də verilmişdir.

$$\sigma_r = \frac{\omega \varepsilon_i}{4\pi} \quad (11)$$

$$\sigma_i = -\frac{\omega \varepsilon_r}{4\pi} \quad (12)$$



Şəkil 6. ASPE+xhəcm%Bi₂Te₃ kompozitlərin optik keçiriciliklərinin həqiqi hissələrinin tezlikdən asılılıqları: 1-x=5; 2-x=10; 3-x=15; 4-x=20;



Şəkil 7. ASPE+xhəcm%Bi₂Te₃kompozitlərin optik keçiriciliklərinin xəyali hissələrinin tezlikdən asılılıqları: 1-x=5; 2-x=10; 3-x=15; 4-x=20;

Göründüyü kimi elektrik keçiriciliklərinin həqiqi hissəsi tezliyin 3600-3730Hs intervalında nisbətən kəskin artma, digər tezlik diapazonunda isə səlis(xətti) qanunla artma müşahidə edilmişdir. Analoji asılılıq elektrik keçiriciliklərinin xəyali hissəsi üçündə xarakterikdir. Belə ki, elektrik keçiriciliklərinin xəyali hissəsi tədqiq olunan bütün tezlik oblastında mütləq qiymətəcə xəttiyyə bənzər qanunla azalmışdır.

Nəticə

Qeyd olunmalıdır ki, kompozitlərin dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinə əsasən hesablanmış optik sabitlərin qiymətləri kompozitin tərkibində Bi₂Te₃ doldurucusunun miqdarı artdıqca artmışdır. Çox ehtimal ki, bu doldurucunun həcm payının artması ilə kompozitin səthində onlara düşən payı, yəni onların yaratdıqları klasterlərin artmasının nəticəsi kimi izah oluna bilər.

Ədəbiyyat

1. Abeles, B. (1978). Optical properties of composite materials. *Research Article*, 40(1), 222-224. <https://doi.org/10.1063/1.31138>
2. Brako, R. (1997). Dielectric and optical properties of composite media. *Journal of Physics: Solid State Physics*, 12(6). <https://doi.org/10.1088/0022-3719/12/6/025>
3. Chiang, H.-P., Leung, P. T., Tse, W. S. (1997). Optical properties of composite materials at high temperatures. *Solid State Communications*, 101(1), 45-50.
4. Hlubina, P., Ciprian, D., Lunacek, J. (2009). Spectral interferometric technique to measure the ellipsometric phase of a thin-film structure. *Optics Letters*, 34(17), 2661-2663. <https://doi.org/10.1364/OL.34.002661>
5. Kafarova, D. M., Kerimova, R. A., Safarova, S. I., et al. (2004). Synthesis and growth of single crystals of ternary compounds of the type. In *Proceedings of the IV International Conference "Amorphous and Single-Crystal Semiconductors*. Russian Academy of Sciences, A.F. Ioffe Physical-Technical Institute, 387-389.
6. Khayal, K. A., Muheddin, D. Q., Mohammed, P. A., Ezat, G. S., Murad, A. R., Ahmed, B. Y., Hussien, S. A., Ahmed, T. Y., Hamad, S. M., Abdullah, O. Gh., Aziz, S. B. (2024). A brief review on optical properties of polymer composites: Insights into light-matter interaction from classical to quantum transport point of view. *Results in Physics*, 56.
7. Lushcheykin, G. A., Petrov, V. M. (1981). *Production and application of ferroelectric and*

- piezoelectric materials in the national economy*. Moscow: Knowledge, 48.
8. Ponyavina, A. N., Kachan, S. M., Tselesh, E. E. (2012). Effective optical constants of composite materials with an arbitrary volume concentration of nanoinclusions. *Journal of Applied Spectroscopy*, 79(5). <https://doi.org/10.1007/s10812-012-9667-2>
 9. Potter, R. F. (1965). Reflectometer for determining optical constants. *Applied Optics*, 4(1), 53–57. <https://doi.org/10.1364/AO.4.000053>
 10. Ren, Q., Chow, Y. T., Meng, F. Q., Wang, S. W., Lu, Z. H., Ma, C. B., Wang, H., Xu, D., Gambling, W. A. (2001). Optical constants of the nano-crystal and polymer composite thin film PbTiO₃/PEK-c. *Journal of Materials Science*, 36, 1857–1861.
 11. Sajnani, A., Hegde, M. N., & Shetty, C. (2014). Optical properties of composites. *International Journal of Pharmacy & Therapeutics*, 5(1), 9–13.
 12. Voshchinnikov, N. V., Il'in, V. B., & Henning, Th. (2005). *Modelling the optical properties of composite and porous interstellar grains*. *Astronomy & Astrophysics*, 429, 371–381.

Daxil oldu: 28.11.2024

Qəbul edildi: 03.03.2025