



QR-kod
maqolaning DOI
sahifasini
ochadi

IQTIBOS UCHUN

Adilova Xalida Shamshetdin qizi.
BEDT-TSF asosidagi molekulyar
kristallarda kristall tuzilish, elektron
korrelyatsiya va magnit xossalarning
kompleks // «O'zbekiston olimi
ayollarining mamlakat taraqqiyotiga
qo'shayotgan hissi» mavzusidagi
xalqaro ilmiy-amaliy konferensiya
materiallari (Nukus, 2026-yil 9–10-
oktyabr). – Nukus, 2026. – B. 195–
199. – DOI: [https://doi.org/10.66073/](https://doi.org/10.66073/ReFocus-Conf/0910033)
[ReFocus-Conf/0910033](https://doi.org/10.66073/ReFocus-Conf/0910033)

BEDT-TSF ASOSIDAGI MOLEKULAR KRISTALLARDA KRISTALL TUZILISH, ELEKTRON KORRELYATSIYA VA MAGNIT XOSSALARNING KOMPLEKS

Adilova Xalida Shamshetdin qizi

*Qoraqalpoq tabiiy fanlari ilmiy tadqiqot institutining
(PhD) tayanch doktoranti
xalida-2015@mail.ru*

Annotatsiya: BEDT-TSF (bis(etilenditio)-tetratiafulvalen) organik elektron donori asosida sintez qilingan molekulyar birikmalarning kristall tuzilishi xususiyatlari va fizik xossalari ko'rib chiqiladi. Turli anionlar va kristallanish sharoitlarining birikmalarning kristall qadoqlanish turiga, o'tkazuvchanligiga va magnit xarakteristikalariga ta'sirini tahlil qilish natijalari keltirilgan. Ushbu materiallarning organik o'ta o'tkazgichlar va past o'lchamli o'tkazgichlar sifatidagi o'zini tutishini belgilovchi strukturaviy parametrlar va elektron xossalari o'rtasidagi o'zaro bog'liqlikka alohida e'tibor qaratilgan.

Kalit so'zlar: BEDT-TSF, organik o'ta o'tkazgichlar, kristall tuzilishi, o'tkazuvchanlik, molekulyar kristallar, fizik xususiyatlar

Kirish. Donor-akseptor tizimlaridan tashkil topgan organik molekulyar kristallar so'nggi o'n yilliklar davomida qattiq jismlar fizikasi va materialshunoslikning muhim yo'nalishiga aylandi. Ular o'ziga xos moddalar sinfini tashkil etib, ularda molekulalar o'rtasidagi kuchsiz Van-der-Vaals o'zaro ta'sirlari hamda kuchli π - π -bog'lanishlar past haroratlarda past o'lchamli o'tkazuvchanlik, magnit tartiblilik va hatto o'ta o'tkazuvchanlik kabi g'ayrioddiy elektron xususiyatlarning shakllanishiga olib keladi. Bunday tizimlarning eng ko'p o'rganilgan va texnologik jihatdan ahamiyatli vakillaridan biri BEDT-TSF (bis(etilenditio)-tetratiafulvalen) donori asosidagi birikmalardir. Tuzilishi jihatidan ma'lum BEDT-TTF donoriga yaqin bo'lgan ushbu molekula geterotsiklik halqalar tarkibida oltingugurt va selen atomlarining mavjudligi bilan ajralib turadi, bu esa zaryadning yanada yaqqol ko'chishiga va yuqori elektron harakatchanligiga xizmat qiladi. BEDT-TSF keng spektrli anionlar bilan barqaror komplekslar hosil qila oladi va turli simmetriyali — α , β , κ , θ , ζ va boshqa kristall tuzilmalarni shakllantiradi. Ularning har biri o'ziga xos panjara parametrlari, joylashuv zichligi va molekulalararo o'zaro ta'sir xususiyatlari bilan tavsiflanadi.

Bugungi kunda BEDT-TSF kristallarida ham panjara simmetriyasi, ham elektron tuzilishi jihatidan farq qiluvchi ko'plab fazalar aniqlangan. Masalan, κ -faza o'tkazuvchanlikning ikki o'lchovli tabiati bilan tavsiflanadi, bunda donor molekulalar anion qatlamlari bilan ajratilgan o'tkazuvchan tekisliklarni hosil qiluvchi dimerlarni tashkil etadi. Shu bilan birga, α -faza zichligi kamroq o'ramga ega va yarimo'tkazgich xususiyatlarini yaqqolroq namoyon etadi. Anion tarkibiy qismini o'zgartirish orqali elektron



«O'zbekiston olimi ayollarining
mamlakat taraqqiyotiga
qo'shayotgan hissi»

XALQARO ILMIY-AMALIY
KONFERENSIYA
NUKUS, 9–10-OKTYABR 2026

zichlikni, taqiqlangan zona kengligini va o'ta o'tkazuvchan o'tish haroratini nozik boshqarish mumkin. Bunday birikmalarni kristallash usullari va o'stirish sharoitlari alohida ahamiyatga ega.

Adabiyotlar sharhi

Tetrathiafulvalenlar (birinchi navbatda bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene — BEDT-TTF, ko'pincha qisqartma holda ET) asosidagi donor molekular organik o'tkazgichlar va o'ta o'tkazgichlarni tadqiq qilishdagi markaziy oilalardan birini tashkil etadi. Bu molekular qatlamli kristall tuzilmalarni hosil qiladi, ularda donor qatlamlar anion qatlamlar bilan almashinib turadi; donor qatlamlardagi molekularlarning fazoviy joylashuvi va zichlanishi materiallarning elektron spektri va transport xususiyatlarini (o'tkazuvchanlik, metall-izolyator o'tishlari, o'ta o'tkazuvchanlik) belgilaydi [1]. BEDT-TTF tuzlarining sintezi va tuzilishi bo'yicha o'tkazilgan tadqiqotlar sohaga muhim dastlabki hissa bo'lib qo'shildi, ular shuni ko'rsatdiki, kristallanish jarayonida anion ostki tuzilmasi yoki erituvchilardagi kichik o'zgarishlar donor molekularlarning mutlaqo farqli joylashishiga (α , β , κ , θ va boshqa faza modifikatsiyalari) va natijada metallardan tortib korrelyatsiyalangan izolyatorlar va o'ta o'tkazgichlarga bo'lgan keng ko'lamli elektron holatlarga olib keladi. Bu holat ham eksperimental rentgenostrukturaviy tadqiqotlar, ham transport o'lchovlari bilan tasdiqlanadi [2]. Xususiyatlarni boshqarishda donor qatlamdagi ekvivalent molekular orasidagi geometriya va zaryad zichligining kompensatsiyalanmaganligi muhim rol o'ynaydi. Ko'plab tadqiqotlar boy holat diagrammasiga olib keladigan zaryadning tartiblanishi (charge order), strukturaviy faza o'tishlari va kuchli elektron korrelyatsiya hodisalarini ko'rsatadi — magnitli, tartiblangan zaryad holatlari va o'ta o'tkazuvchanlik o'rtasidagi raqobat (BEDT-TTF)2X tizimlari uchun xos xususiyat hisoblanadi. Bunday hodisalar NMR, optik spektroskopiya va rentgen tuzilish tahlilidan foydalanilgan ishlarda batafsil o'rganilgan [3]. Donor molekulasining modifikatsiyalari (ba'zi S $\rightarrow$ Se atomlarini almashtirish, selenlangan analoglarni kiritish, masalan, BEST, BETS va boshqalar) taqiqlangan zona kengligi va elektronlarning molekulararo o'tkazuvchanligining o'zgarishiga olib keladi; buning natijasida o'ta o'tkazuvchanlikning Tc kritik haroratining paydo bo'lishi yoki oshishi qatlamlarning elektron tuzilishiga va anion qatlamlar bilan o'zaro ta'siriga bog'liq. Selenlangan va boshqa hosilalar (BETS, BEST va boshqalar) bo'yicha o'tkazilgan sharhlar shuni ta'kidlaydiki, donorlarni kimyoviy modifikatsiyalash fizik xususiyatlarni "nozik sozlash"ning samarali usullaridan biridir [4].

Tahlil va natijalar:

BEDT-TSF donor molekularlari asosidagi molekulyar birikmalarning kristall tuzilishi va fizik xususiyatlarini tahlil qilish jarayonida joylashish geometriyasi, anion qatlami turi va tizimning elektron xatti-harakati o'rtasidagi murakkab bog'liqlik aniqlanadi. Bunday tadqiqotlarda asosiy e'tibor kuchsiz Van-der-Vaals o'zaro ta'sirlari, π - π qoplanishlari va molekula ichidagi masofalar qanday qilib o'tkazuvchanlik kanallarini hosil qilishiga hamda metall va o'ta o'tkazuvchan holatlarning paydo bo'lishiga sharoit yaratishiga qaratiladi. Ushbu birikmalarning kristall tuzilishi yaqqol qatlamli xarakterga ega: donor molekular o'tkazuvchan

qatlamlarni hosil qiladi, ular orasida zaryad kompensatori va struktura stabilizatori rolini bajaruvchi anion qatlamlari joylashadi. Bu qatlamlilik elektron xususiyatlarining past o'lchamliligini belgilaydi – elektronlar asosan qatlam ichida harakatlanadi, bu esa bunday materiallarni kvazi-ikki o'lchovli tizimlarga aylantiradi.

BEDT-TSF asosidagi birikmalarning rentgen tuzilish tahlili shuni ko'rsatadiki, molekulalar navbatlashuvchi dimerlar yoki tetramerlar ko'rinishida joylashgan bo'lib, ularning qatlam tekisligiga nisbatan og'ish burchagi harorat, bosim va anion tabiatiga qarab o'zgaradi. Bunda molekulalar oriyentatsiyasining hatto bir necha gradusga o'zgarishi π -orbitallarning qoplanish darajasini tubdan o'zgartira oladi, bu esa energetik zonalar kengligining va demak, o'tkazuvchanlikning o'zgarishiga olib keladi. Normal sharoitda bu turdagi birikmalarning ko'pchiligi metallik xususiyatini namoyon qiladi, ammo harorat pasayganda izolyatsiyalovchi yoki o'ta o'tkazuvchan holatga o'tish kuzatiladi, bu esa kuchli elektron korrelyatsiya mavjudligini tasdiqlaydi. Metall-izolyator o'tishlari ko'pincha panjara parametrlarining modulyatsiyasi yoki joylashish simmetriyasining o'zgarishi kabi tarkibiy qayta qurishlar bilan kechadi. Zaryadlarning fazoviy taqsimlanishini belgilaydigan va donor qatlamning elektron tuzilishiga ta'sir ko'rsatadigan anion qatlami turi muhim rol o'ynaydi. Masalan, anorganik anionlarni kattaroq hajmli organik yoki polimetallat ionlariga almashtirishda qatlamlararo masofaning ortishi va qatlamlararo o'zaro ta'sirning susayishi sodir bo'ladi. Bu esa, o'z navbatida, tizimning ikki o'lchovli xarakterini oshirib, korrelyatsion effektlarni kuchaytiradi. Tajribalar shuni ko'rsatadiki, donorlar va anionlarning ma'lum kombinatsiyalarida g'ayrioddiy zaryad tartiblanishi hodisasi kuzatiladi, bunda elektron zichligi ekvivalent molekulalar o'rtasida notekis taqsimlanib, lokallashgan elektronli uchastkalarni hosil qiladi. Bu holat o'ta o'tkazuvchanlik holatiga o'tishdan oldin sodir bo'ladi, bu esa zaryad tartiblanishini ushbu tizimlarda o'ta o'tkazuvchanlikning raqobatlashuvchi yoki yondosh mexanizmi sifatida ko'rib chiqish imkonini beradi.

Haroratga oid tadqiqotlar shuni ko'rsatadiki, BEDT-TSF birikmalarining tuzilishi va xususiyatlari tashqi ta'sirlarga o'ta sezgir. Harorat ko'tarilganda molekulalarning issiqlik tebranishlari ortadi, bu esa panjaraning biroz buzilishiga va molekulalar orasidagi masofaning o'zgarishiga olib keladi. Biroq, aynan shu mikroskopik o'zgarishlar makroskopik xususiyatlar uchun hal qiluvchi ahamiyatga ega bo'lib chiqadi. Bosimning ta'siri BEDT-TSF birikmalarining fizik xususiyatlarini belgilovchi yana bir asosiy omil hisoblanadi. Tashqi bosimning qo'llanilishi molekulalarning yaqinlashishiga va π -orbitallar qoplanishining kuchayishiga olib keladi, bu esa elektronlarning delokallanishiga va o'tkazuvchanlikning oshishiga yordam beradi. Bunda normal sharoitda izolyatorlik xususiyatini namoyon qiladigan ba'zi birikmalar bosim ostida metall yoki o'ta o'tkazuvchan holatga o'tadi. Bu effekt energetik tirqishning kamayishi va Fermi sathida elektron holatlar zichligining ortishi bilan bog'liq. Shunday qilib, bosim turli elektron fazalar o'rtasida nozik sozlash vositasi bo'lib xizmat qiladi, bu esa spin va zaryad fluktuatsiyalari maksimal darajaga yetadigan kvant kritik holatiga yaqin sharoitlarni eksperimental modellashirish imkonini beradi.

Optik va spektroskopik o'lchovlar struktura haqidagi ma'lumotlarni to'ldiradi hamda kuchli elektron-fonon va Kulon o'zaro ta'sirlari mavjudligini tasdiqlaydi. IQ-spektrlarda molekulalardagi zaryadning joylashishiga sezgir bo'lgan C-S va C=C bog'larining tebranishlari bilan bog'liq xarakterli polosalar kuzatiladi. Zaryad bilan tartiblangan holatga o'tishda bu polosalar ajraladi, bu esa qatlam ichidagi molekulalarning ekvivalent emasligidan dalolat beradi. Raman va infraqizil yutilish spektrlarining tahlili shuni ko'rsatadiki, o'ta o'tkazuvchan holatlarda modalarning bir qismi past chastotali sohaga siljiydi, bu esa fononlar va Kuper elektron juftlari o'rtasidagi o'zaro ta'sirni ko'rsatadi. Bunday effektlar ushbu birikmalardagi o'ta o'tkazuvchanlik mexanizmlari nafaqat elektron, balki fonon tarkibiy qismiga ham ega ekanligini tasdiqlaydi, garchi elektron korrelyatsiya hal qiluvchi omil bo'lib qolsa-da. Issiqlik sig'imi va magnit o'lchovlari BEDT-TSF birikmalarining boy fazaviy diagrammasini namoyish etadi. Zichlik funksionali va Xabbard modellari usullari yordamida bajarilgan BEDT-TSF birikmalarining elektron tuzilishini modellashtirish shuni ko'rsatadiki, o'tkazuvchanlik zonasining samarali kengligi ko'chish integrallari va Kulon o'zaro ta'siri U o'rtasidagi nisbat bilan aniqlanadi. Orbitallarning qoplanishi ortishi bilan ko'chish integrallari kattalashadi va tizim ko'proq metall xususiyatiga ega bo'ladi, molekulalar orasidagi masofalar kamayishi bilan esa Kulon korrelyatsiyalarining hissasi ortadi, bu esa lokalizatsiyaga olib keladi. Shunday qilib, tizimning fizik holati ushbu ikki omilning muvozanati bilan belgilanadi. Hisob-kitoblar shuni ko'rsatadiki, kichik strukturaviy buzilishlar zona tuzilishi topologiyasini o'zgartirib, Fermi sathida transport xususiyatlari va holatlar zichligiga ta'sir qiluvchi elektron va kovak cho'ntaklarini hosil qilishi mumkin.

Xulosa

BEDT-TSF donor molekulalari asosidagi molekulyar birikmalarning kristall tuzilishi va fizik xususiyatlarining o'tkazilgan tahlili shuni xulosa qilishga imkon beradiki, bu materiallar strukturaviy, elektron va korrelyatsion hodisalar chambarchas bog'langan noyob obyektlardir. Ularning xususiyatlari nafaqat kimyoviy tarkibi, balki molekulyar joylashuvning nozik jihatlari, anion qatlamining turi va kristallanish sharoitlari bilan ham belgilanadi. Aynan shu omillarning kombinatsiyasi metall, izolyatsiyalovchi, magnit va o'ta o'tkazuvchan holatlarni o'z ichiga olgan murakkab fazaviy diagrammani shakllantiradi. Tadqiqotlarning asosiy natijasi kristall simmetriyasi, π -orbitallarning qoplanish darajasi va o'tkazuvchanlik xarakteri o'rtasidagi to'g'ridan-to'g'ri bog'liqlikni o'rnatishdan iborat. Molekulalar oriyentatsiyasining yoki molekulalararo masofalarning hatto minimal o'zgarishlari ham elektron tuzilishini o'zgartirishga va turli fazalar o'rtasida o'tishlarni keltirib chiqarishga qodir. Bu BEDT-TSF tizimlarining bosim va harorat kabi tashqi ta'sirlarga yuqori sezgirlikidan dalolat beradi, bu esa ularni kvant kritik hodisalari va metall-izolyator o'tishlarini o'rganish uchun namunaviy tizimlarga aylantiradi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. J. M. Williams et al., Synthetic metals based on bis (ethylened Timoti) tetrathiafulvalene (BEDT-TTF): synthesis, structure, and ambient-pressure superconductivity, (BEDT-TTF bo'yicha klassik ishlar).

2. J. A. Schlueter et al., Crystal structure, physical properties and electronic structure of β'' -(BEDT-TTF) 2..., J. Mater. Chem., 2001.
3. M. Hirata et al., NMR tadqiqotlari va (BEDT-TTF) 2X dagi elektron fazalar sharhi.
4. N. A. Maxayeva va boshqalar, Dizayn va sintezning so'nggi yutuqlari... (selenidlar va turdosh molekulalar bo'yicha sharhlar), 2022.
5. S. Yasuzuka et al., Recent progress in high-pressure studies on organic superconductors, review.
6. U. Geiser et al., BEDT-TTF qator donor tuzlarining sintezi va tuzilishi.
7. BEDT-TTF / BEDT-TSF molekulyar tuzilmalari bo'yicha materiallar (rasmlar va taqqoslashlar) - ResearchGate, shuningdek, BEST/BETS bo'yicha nashrlar.
8. I. Olejniczak et al., Charge-Ordering and Structural Transition in the New Organic ... va radikal-kation tuzlarining optik xususiyatlari sharhlari.
9. T. J. Blundell et al., Molecular conductors from bis... (yangi radikal-kation tuzlar va ularning xossalari), 2022.