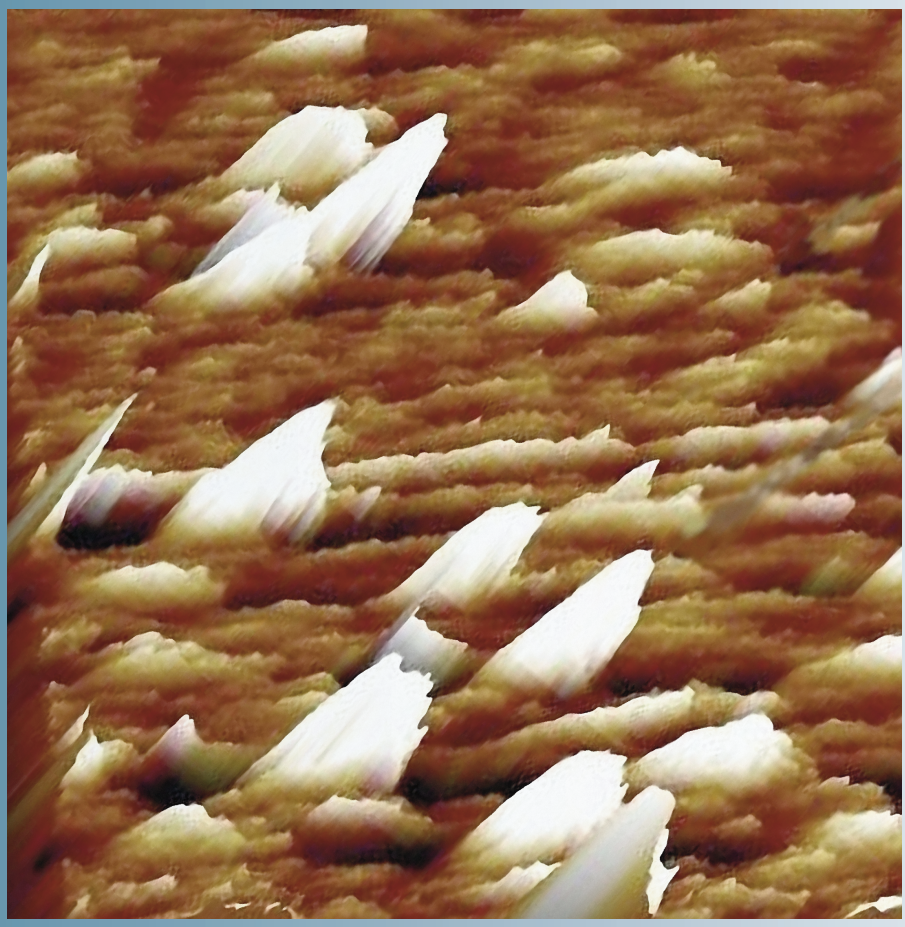
ISSN 1028-8546

Volume XVII, Number 2
Section: Az
June 2011

Azerbaijan Journal of Physics

Fizika



www.physics.gov.az

G.M. Abdullayev Institute of Physics
Azerbaijan National Academy of Sciences
Department of Physical, Mathematical and Technical Sciences

Published from 1995

ISSN 1028-8546
vol. XVII, Number 2, 2011
Section: Az

Azerbaijan Journal of Physics

Fizika

G.M.Abdullayev Institute of Physics
Azerbaijan National Academy of Sciences
Department of Physical, Mathematical and Technical Sciences

HONORARY EDITORS

Arif PASHAYEV **Mahmud KERIMOV**

EDITORS-IN-CHIEF

Arif HASHIMOV
Chingiz QAJAR

SENIOR EDITOR

Talat MEHDIYEV

INTERNATIONAL REVIEW BOARD

Ivan Scherbakov, Russia
Kerim Allahverdiyev, Turkey
Mehmet Öndr Yetiş, Turkey
Gennadii Jablonskii, Buelorussia
Rafael Imamov, Russia
Vladimir Man'ko, Russia
Eldar Salayev, Azerbaijan
Dieter Hochheimer, USA
Victor L'vov, Israel
Vyacheslav Tuzlukov, South Korea
Majid Ebrahim-Zadeh, Spain
Firudin Hashimzadeh, Azerbaijan
Anatoly Boreysho, Russia
Mikhail Khalin, Russia
Hasan Bidadi, Tebriz, East Azerbaijan, Iran
Mamed Emin Shahtakhtinskii, Azerbaijan
Maksud Aliyev, Azerbaijan
Bahram Askerov, Azerbaijan
Vali Huseynov, Azerbaijan
Javad Abdinov, Azerbaijan
Bagadur Tagiyev, Azerbaijan
Tayar Djafarov, Azerbaijan
Natiq Atakishiyev, Mexico
Talat Mehdiyev, Azerbaijan
Nazim Mamedov, Azerbaijan
Emil Guseynov, Azerbaijan
Ayaz Bayramov, Azerbaijan
Tofiq Mammadov, Azerbaijan
Salima Mehdiyeva, Azerbaijan
Shakir Naqiyev, Azerbaijan
Rauf Guseynov, Azerbaijan
Almuk Abbasov, Azerbaijan
Yusif Asadov, Azerbaijan

TECHNICAL EDITORIAL BOARD

senior secretary Elmira Akhundova, Narmin Babayeva, Nazli Guseynova, Sakina Aliyeva, Nigar Akhundova, Elshana Tarlanova

PUBLISHING OFFICE

33 H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, G.M.Abdullayev Institute of Physics

Tel.: (99412) 439-51-63, 439-32-23
Fax: (99412) 447-04-56
E-mail: joph@physics.ab.az; jophphysics@gmail.com
Internet: www.physics.gov.az/journals

It is authorized for printing: 06.30.2011

Published at: **"ŞƏRQ-QƏRB "**
17 Ashug Alesger str., Baku
Typographer :Aziz Gulaliyev

Sent for printing on: __ 07.2011
Printing approved on: __ 07.2011
Physical binding:_____
Number of copies:_____200
Order:_____

ENERGETİKA SİSTEMLƏRİNİN EKOLOJİ PROBLEMLƏRİNİN HƏLLİNDƏ ELEKTROFİZİKİ PROSESLƏR

A.M. HƏŞİMOV, K.B. QURBANOV, H.C. HÜSEYNOV
AMEA akademik H.M. Abdullayev adına Fizika İnstitutu,
Az-1143, Bakı, H.Cavid prospekti, 33.

Güclü elektrik sahəsinin və elektrik qazboşalmalarının təsirlərindən istifadə edərək, adsorbsiya proseslərinin tətbiqi vastəsilə energetika sistemlərinin ekoloji problemlərinin həlli üzrə təcrübi tədqiqatlar yerinə yetirilərək, müəyyən edilmişdir ki, qazboşalmalarının təsirləri nəticəsində adsorbsiya proseslərinin effektivliyi nəzərə çarpacaq dərəcədə yüksəlir.Tədqiatların nəticələri əsasıda təbii qazın, sənaye tullantı suların, mazut maddəsinin aşqarlardan təmizlənməsi üzrə yeni effektiv texnoloji proseslər təklif olunmuşdur.Məqalədə eyni zamanda atmosferin ozon qatına təsir edən amillərin araşdırılması, qapalı sistemlərdə atmosfer mühitinin tənzimlənməsinə dair nəticələr,odluq qurgularının effektiv istismarına dair təkliflər və müvafiq texnoloji proseslər verilmişdir

Açar sözlər: energetika, ekologiya
UOT: *620.9:502.1*

Energetikanın, kimya sənayesinin və dünya ölkələrinin digər xalq təsərrüfat sahələrinin inkişafı XX əsrin sonunda bir sıra həlli tələb olunan ekoloji problemləri əmələ gətirmişdir. Bunların sırasına yer kürəsinin ozon qatının zəifləməsi, qlobal istiləşmə və turşu tərkibli yağışların yağmasını mühüm məsələlər kimi daxil etmək olar. Dünyavi əhəmiyyət kəsb edən bu məsələlərin həlli üzrə inkişaf etmiş ölkələrin elmi mərkəzləri mükəmməl elmi-tədqiqat işləri apararaq, qeyd olunan ekoloji problemlərin həllinə çalışırlar [1].

Ədəbiyyatda [2-4] qeyd olunur ki, ozon qatının zəifləməsinə səbəb olan istehsal sahələrinin, Vena konvensiyasına (1985-ci il) və Monreal Protokoluna (1987-ci il) əsaslanaraq, məhdudlaşdırılması və yaxud tam dayandırılması ilə yaxın 50-70 il ərzində yerin ozon qatı bərpa oluna bilər. Qeyd etmək lazımdır ki, ozon qatı yerin flora və faunasını günəşin ultrabənövşəyi şüalanmasından mühafizə etməsi ilə yanaşı eyni zamanda yerin infraqırmızı şüalanmasının da qarşısını alır. Təsərrüfat sahələrindən ətraf mühitə atılan NO, metan, CO və digər birləşmələr yerin ozon qatının zəifləməsinə səbəb olur.

Turşu tərkibli yağışlar davamiyyətli illər ərzində ətraf mühitin lokal və regional çirkləndiriciləri hesab olunurlar. Bunun səbəbi istehsal sahələrindən ətraf mühitə yayılan kükürd və azot oksidləridir. Bu tullantıların çox hissəsi istilik elektrik stansiyalarının istismarı zamanı əmələ gəlir. Odur ki, kükürd və azot oksidlərinin zərərsizləşdirilməsi mühüm tədqiqat istiqaməti olaraq günün aktual problemləri sırasına daxildir [5,6].

Metan qazının yanacaq kimi istifadə edilməsi ekoloji baxımdan tələbləri təmin edir. Metan qazının tərkibində H_2S və kükürdün digər birləşmələri mövcud olarsa qazın yandırılmazdan əvvəl təmizlənməsi vacib məsələdir. Təbii qazın istehsalı və nəqli proseslərində atmosfer mühitinə yayılması atmosferdə bir sıra kimyəvi qaz reaksiyalarının reallaşmasına səbəb olur, odur ki, metan qazının atmosfer mühitində monitorinqi mühüm əhəmiyyət kəsb edir [7].

Yuxarıda qeyd edilənləri nəzərə alaraq, təqdim olunan işdə elektrik qazboşalmalarının təsiri şəraitində reallaşan adsorbsiya proseslərinin tətbiqi vasitəsilə energetikanın ekoloji problemlərinin həlli istiqamətində tədqiqat işləri yerinə yetirilmişdir.

İşdə əsas məqsəd olaraq, ətraf mühitin mühafizəsi istiqamətində energetika sistemlərinin ətraf mühitə zərərli təsirlərinin araşdırılması, enerji istehsalı sahələrinin tullantı qazlarının, sularının və enerji daşıyıcılarının tərkib hissəsinin zərərli maddələrdən təmizlənməsinin effektiv üsullarının işlənilməsi, yeni üstün göstəricilərə malik, iqtisadi səmərəli, ekoloji təminatlı texnoloji proseslərin elmi əsaslarının inkişaf etdirilməsindən ibarətdir.

Yuxarıda qeyd olunan məqsədlərə nail olmaq üçün aşağıdakı məsələlərin həllinə baxılmışdır:

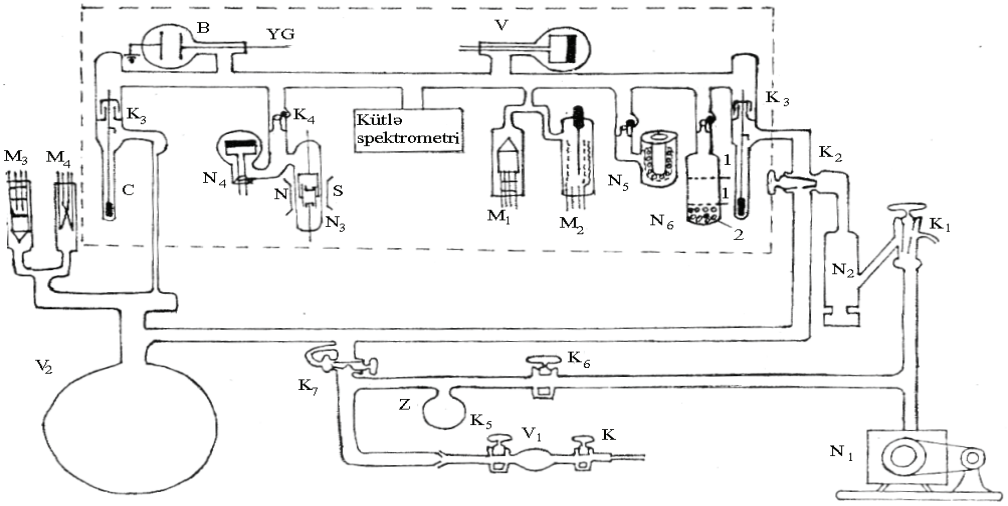
- Təbii qazın tərkib hissəsinin H_2S molekulundan təmizlənməsi;
- Mazut yanacağının kükürd birləşmələrindən təmizlənməsi;
- Tüstü qazlarının SO_x, NO_x, CO, CO_2 qazlarından təmizlənməsinin yeni üsullarının işlənilməsi;
- Atmosferin ozon qatına təsir edən amillərin təcrübi tədqiqi;
- Sənaye tullantı sularının effektiv təmizlənməsi məqsədilə yeni texnoloji proseslərin işlənilməsi;
- Elektrik qazboşalmalarının təsirləri şəraitində adsorbsiya – desorbsiya proseslərinin tədqiq edilməsi;
- Adsorbentlərin səthində reallaşan elektron – ion proseslərinin araşdırılması;
- Materiallarda elektrik yüklü vəziyyətlərin əmələ gəlməsinin qanunauyğunluqlarının öyrənilməsi.

Qarşıya qoyulan məsələləri həll etmək üçün tədqiqat üsulu olaraq, əsasən, MSX-4 markalı kütlə - spektrometrindən istifadə edilmişdir. Materialların elektrik yüklü vəziyyətləri və digər xassələrinin tədqiqi laboratoriyanın əməkdaşları tərəfindən işlənilmiş və hazırlanmış təcrübi qurğularda yerinə yetirilmişdir. Tədqiqatlarda yüksək təmizlik dərəcəsi əldə etmək üçün və qaz reaksialarını məhdudlaşdırmaq məqsədilə təcrübələr P~10^{-6}-10^{-7}Pa ifrat-yüksək vakuum şəraitində yerinə yetirilmişdir. Tədqiqatlar ətraf mühitə zərərli təsir göstərən CH_4, H_2S, CO, CO_2, NO_x, SO_x və müxtəlif qaz qarışıqlarından ibarət mühitlərin atmosfer mühitindən təmizlənməsi və yaxud həmin qazların sənaye obyektləri tərəfindən atmosferə atılmasının qarşısının alınması istiqamətində yerinə yetirilmişdir.

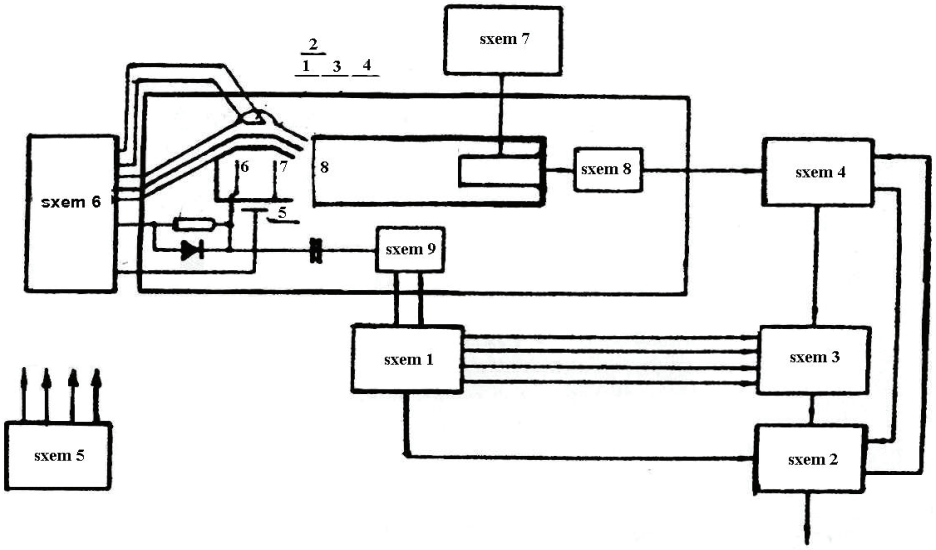
İşdə KCM markalı silikagel, klinoptilolit və NaX markalı seolitlərdən istifadə edərək elektrik qazboşalmalarının təsirləri şəraitində adsorbsiya–desorbsiya proseslərі tədqiq edilmişdir.

Şəkil 1-də tədqiqatlarda istifadə edilən ifrat yüksək vakuum qurğusunun sxemi təqdim edilmişdir. Qurğuda vakuum texnikasının müasir elementlərini tətbiq edərək 10^{-6}-10^{-7}Pa tərtibində vakuum əldə etmək mümkün olmuşdur. Qurğu, bu və ya digər tətbiq edilən qazın bəsitliyini böyük dəqiqliklə təmin etməyə imkan vermişdir.

Şəkil 2-də müxtəlif kütləyə malik olan ionları dreyf məsafəsində uçuş müddətinə görə fərqləndirən MSX markalı kütlə-spektrometrinin blok sxemi təqdim olunmuşdur. Kütlə-spektrometri ətalətsiz işləyərək, qaz tərkibində yüksək sürətli dəyişmələri qeydə alaraq, istənilən zaman kəsiyində qaz tərkibinin qeydə alınmasına imkan vermişdir. Kütlə-spektrometri 13,3-13.3·10^{-8}Pa təzyiq intervalında işləyərək 1-600 atom kütlə vahidlərinə malik olan ionları qeydə ala bilir.



Şəkil 1. İfrat yüksək vakuum qurğusu.



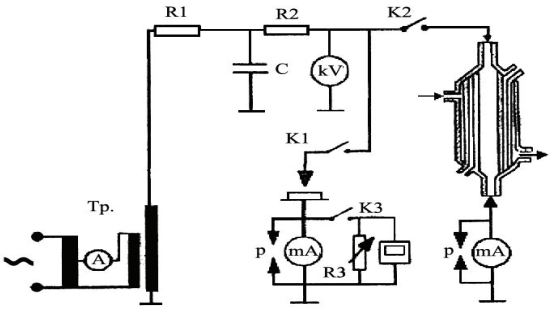
Şəkil 2. Kütlə spektrometrinin blok-sxemi.

İşdə aktivləşdirici təsir olaraq yüksək gərginlikli elektrik qazboşalmalarının təsirlərindən istifadə olunmuşdur. Qazboşalmalarının müxtəlif növlərinin aktivləşdirici təsirləri tədqiq edilən məsələlərdə sınaqdan keçirilərək tac, məşəl şəkilli və arakəsməli növlərinin daha tətbiqyönümlü və effektiv təsirlərə malik olması qeydə alınmışdır. Şəkil 3 və şəkil 4-də müvafiq olaraq arakəsməli və məşəl şəkilli qazboşalmasının elektrik dövrələri təqdim olunmuşdur.

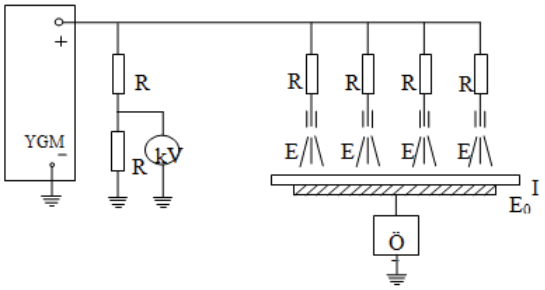
Tədqiqatların ilkin mərhələsində qazboşalmasının təsirləri vasitəsilə aktivləşdirilmiş adsorbentlərdən istifadə edərək təbii qazın tərkibinin bir sıra aşqarlardan təmizlənməsi prosesləri tədqiq edilərək elektroaktivasiyanın adsorbsiya prosesinin effektivliyinin nəzərə çarpacaq dərəcədə yüksəlməsinə səbəb oldugu müəyyən edilmişdir.

Əldə edilən nəticəni izah etmək məqsədilə növbəti mərhələdə elektrik qazboşalmalarının təsirlərinə məruz qalan adsorbentlər tədqiq edilərək müəyyən olunmuşdur ki, elektrik təsirləri nəticəsində adsorbentlərin səthində və həcmində elektrik yükləri toplanır və adsorbent elektrik yüklü vəziyyətə keçir. Qazboşalmalarının təsirlərinə məruz qalan adsorbentlərdən termostimullaşmış cərəyanlar qeydə alınmışdır.

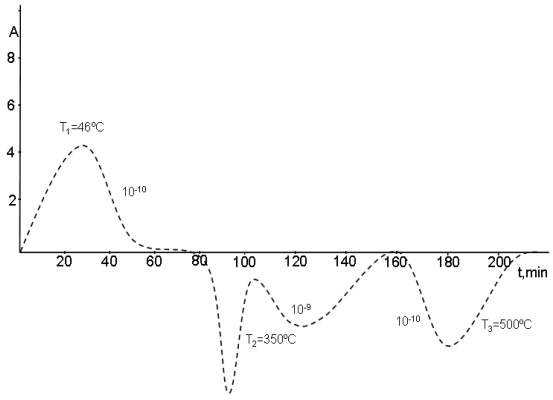
Şəkil 5-də 10 dəqiqə müddətində arakəsməli elektrik qazboşalmalarının təsirlərinə məruz qalan NaX seolitin termostimullaşmış spektri təqdim olunmuşdur.



Şəkil 3. Arakəsməli elektrik qazboşalmasının sxemi. Sxemə qida mənbəyi olaraq yüksək gərginlik transformatoru, qazboşalması reaktoru (ozonator), milliampermetr, boşaldıcılar və digər müvafiq elementlər daxil edilmişdir.



Şəkil 4. Məşəl qazboşalmasının elektrik dövrəsi.
YGM – yüksək gərginlikli qida dövrəsi;
R_0, Rg – gərdinlik bölən müqavimətlər;
$R_1, R_2, ..., R_n$ – tormozlayıcı müqavimətlər;
$E_1, E_2, ..., E_n$ – qazboşalması əmələ gətirən elektrodlar.



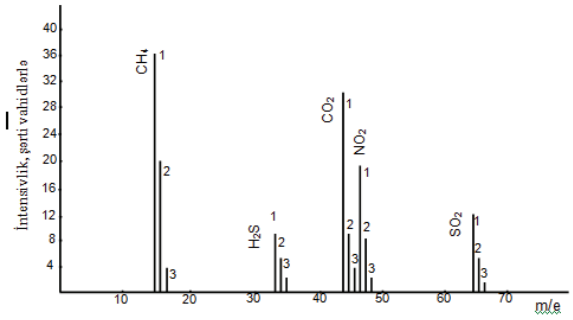
Şəkil 5. Seolit adsorbentinin termostimullaşmış cərəyan əyrisi.

Şəkil 5-dən göründüyü kimi spektrdə üç maksimum qeydə alınmışdır. Spektr:–alçaq temperaturlu maksimum (~46°C) və yüksək temperaturlu maksimumlarla (350°C, 500°C) xarakterizə olunur. Spektrdə birinci maksimuma müvafiq elektrik yükü $Q_1=4\cdot10^{-7}Kl$, ikinci maksimuma müvafiq elekrik yükü $Q_2=6\cdot10^{-6}Kl$ və üçüncü – $Q_1=2\cdot10^{-7}Kl$ təşkil edir. Qeyd etmək lazımdır ki, təcrübələrin çoxsaylı təkrarlanmasından alınan nəticələr eynilik təşkil etmişdir. Sonrakı təcrübələrdə müəyyən edilmişdir ki, qazboşalmasının adsorbentlərə bir dəqiqəlik təsiri də kifayət edir ki, onlarda yuxarıda göstərilən miqdarlarda elektrik yükləri toplansın və bu da öz növbəsində adsorbsiya proseslərinin effektivliyinin yüksəlməsinə səbəb olmuşdur.

Qeyd etmək lazımdır ki, analoji təcrübələr silikagel və təbii seolit-klinoptilolit adsorbentlərindən istifadə edərək yerinə yetirilərkən adsorbsiya proseslərinin effektivliyinin qazboşalmalarının təsirlərindən yüksəlməsi müşahidə olunmuşdur.

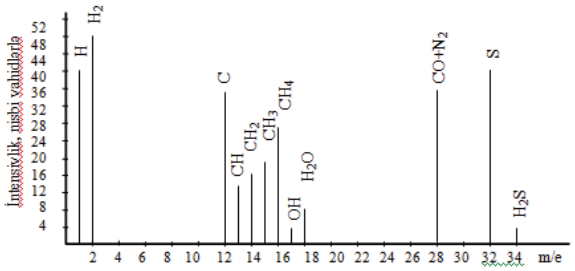
Spektrdə yüksək temperaturlu maksimumların qeydə alınması elektrik yüklərinin adsorbentin həcmində müəyyən dərinliyə diffuziya etməsini təsdiq edir.

Şəkil 6-da təbii qazın H_2S, CO_2, NO_2 və SO_2 qazlarından qazboşalmalarının təsirləri ilə aktivləşdirilmiş, adsorbentlə təmizlənməsi üzrə aparılan təcrübələrin nəticələri verilmişdir. Kütlə-spektroqramından görünür ki, qazboşalmalarının təsirləri adsorbentin adına qabiliyyətinin kifayət qədər yüksəlməsinə səbəb olmuşdur.



Şəkil 6. Təbii qazın azot, kükürd, karbon dioksidlərindən və H_2S qazından təmizlənməsi prosesinin kütlə-spektroqramması.1- İlkin qaz kütləsinin tərkibi; 2- Termoaktivləşdirilmiş adsorbentlərlə təmiz lənmə; 3-Termo və elektrik təsirilə aktivləşdirilmiş adsorbentlərlə təmizlənmə.

Təbii qazın tərkibinin hidrogensulfiddən təmizlənməsi qaz sənayesinin mühüm məsələsi olduğundan təcrübələr CH_4 qazının H_2S qazından bəsit şəkildə təmizlənməsi tədqiq edilmişdir. Təcrübələrin nəticələri şəkil 7-də təqdim edilmişdir.



Şəkil 7. "CH_4+H_2S" qaz qarışığının tərkib dəyişikliklərini əks etdirən kütlə-spektroqramı

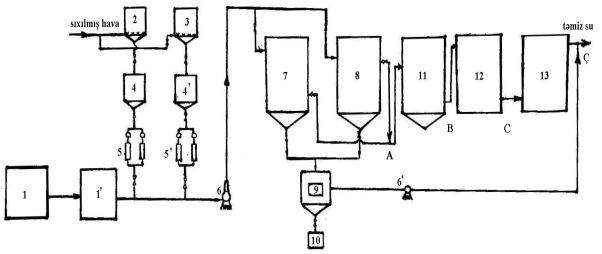
Tədqiqat işində sənaye istehsal sahələrinin tullantı sularının təmizlənməsinin tədqiqi məqsədilə texnoloji qurğu layihələndirilmiş, hazırlanmış və müxtəlif tərkibli tullantı suların təmizlənməsi prosesləri vastəsilə sınaqdan keçirilmişdir. Texnoloji qurğu mexaniki, fiziki, kimyəvi təmizləyici sistemlərdən təşkil olunmuşdur.

Şəkil 8-də qurğunun prinsipial sxemi təqdim olunmuşdur.

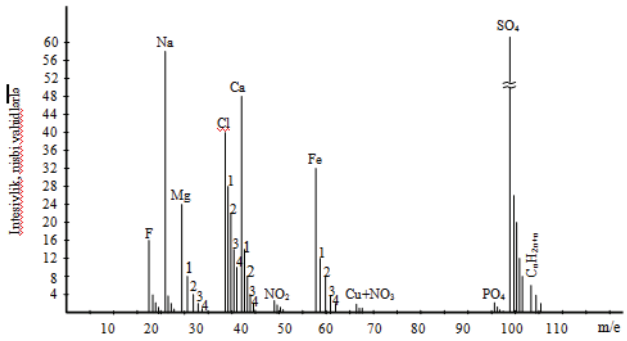
Tədqiqatlarda sənaye tullantı su nümunələri olaraq istilik elektrik stansiyasının, Mingəçevir "İzolit" şirkətinin tullantı suları və laboratoriya şəraitində hazırlanmış bu və ya digər maddələrlə aşqarlanmış sulardan istifadə olunmuşdur. Qurğunun iş prinsipi təbii çökmə, kimyəvi çökdürmə, adsorbsiya prosesi və elektrik qazboşalmalarının təsirlərinə əsaslanır.

Cədvəl 1-dən göründüyü kimi istilik elektrik stansiyalarının tullantı sularının tərkibində müxtəlif duzlar, qələvi, turşu, metal birləşmələri, karbohidrogen tərkibli yağlar və digər qarışıqlar mövcud olur.

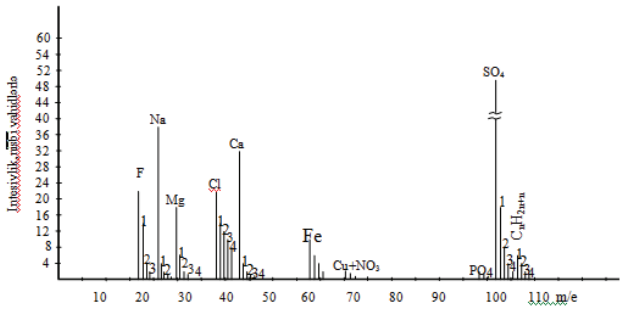
Texnoloji qurğunun A, B, C, Ç çıxışlarından qəbul olunmuş su nümunələrinin kütlə-spektrometri vasitəsilə tədqiqindən alınan nəticələr şəkil 9 və şəkil 10-da təqdim olunmuşdur.



Şəkil 8. Su təmizləyici texnoloji qurğunun blok sxemi



Şəkil 9. İstilik elektrik stasiyasının tullantı sularının təmizlənməsi üzrə nəticələr.



Şəkil 10. Mingəçevir "İzolit" zavodunun tullantı suların təmizlənməsi üzrə nəticələri

Tədqiqatların nəticələrindən məlum olur ki, qazboşalmalarının adsorbentlərə təsiri nəticəsində adsorbentlərdə cəmlənən elektrik yükləri onlarda əlavə adsorbsiya mərkəzlərinin yaranmasına səbəb olaraq adsorbsiya proseslərinin effektivliyinin yüksəlməsi ilə nəticələnir. Digər tərəfdən qazboşalmalarının su maddəsinə təsiri nəticəsində çirkləndiricilərin dissosiasiya prosesinə uğraması, çirkləndirici maddələrin atom və molekullarının həyəcanlanması, ionlaşması onların elektrik neytral vəziyyətdən elektrik aktiv vəziyyətə gətirilməsi öz növbəsində adsorbsiya prosesinin effektivliyinin yüksəlməsinə səbəb olur. Təmizləyici qurğuda ozon qazının təsirlərinin tətbiqi təmizləyici qurğunun yüksək effektivliyini təmin etmiş olur. Qeyd etmək lazımdır ki, laboratoriya şəraitində hazırlanmış, müxtəlif çirkləndirici maddələri olan su nümunələrinin tədqiqi təmizləyici qurğuda istifadə olunan kimyəvi reagentlərin və adsorbentlərin seçilməsini müəyyənləşdirməyə imkan verir.

Tədqiqatın növbəti mərhələsində laboratoriya şəraitində tərkibində xlor, sulfat turşuları, NaOH, KOH qələviləri, xrom və Fe_2O_3 maddələri olan su nümunəsi hazırlanmış və suyun bu maddələrdən təmizlənməsi prosesi tədqiq edilmişdir.

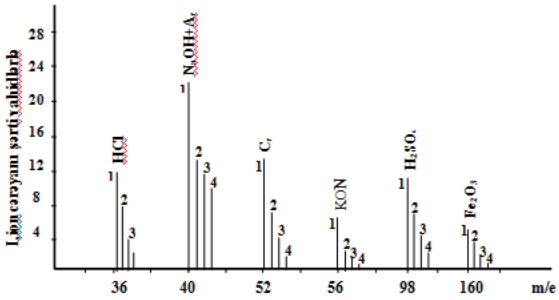
Təmizləyici qurğunun A, C, Ç hissələrindən götürülmüş suyun tərkibinin tədqiqindən alınmış nəticələr şəkil 11–də verilmiş kütlə-spektroqramında təqdim olunmuşdur.

Kütlə-spektroqramından göründüyü kimi təbii çökdürmə və kimyəvi üsullardan sonra (A hissəsindən götürülmüş su nümunələri) suyun çirkləndiricilərdən 40-60% təmizlənməsi müşahidə olunduğu halda, qurğunun bütün hissələrinin işə salınması halında (çıxışda) su çirkləndiricilərdən tam şəkildə təmizlənmiş olur.

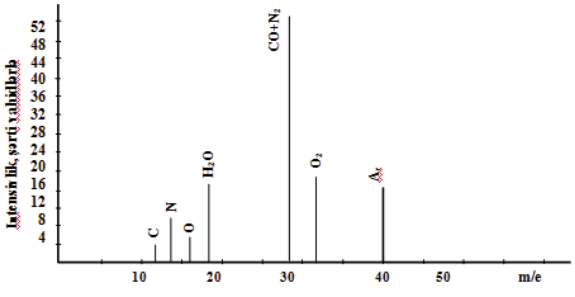
Beləliklə, işdə yerinə yetirilən çoxsaylı təcrübələr göstərmişdir ki, mürəkkəb tərkibə malik suyun təmizlənməsi, təklif olunan təmizləmə texnologiyasının imkanları daxilindədir. Nisbətən bəsit tərkibə malik suların təmizlənməsi qurğunun yalnız bu və ya digər hissəsinin işə qoşulması vasitəsilə daha sadə və iqtisadi səmərəli şəkildə aparıla bilər. Bütün hallarda təmizləmə üsulunun seçimi təcrübələrin aparılması vasitəsilə müəyyən edilməlidir.

İşdə arakəsməli elektrik qazboşalmasının CO qazına təsiri təcrübi olaraq tədqiq edilmişdir.

Təcrübələrdə elektrik təsir vasitəsi olaraq ozonator modelindən istifadə edilmişdir. Ozonatorun qazboşalması aralığında $P=7\cdot10^{-6}Pa$ qiymətində təzyiq əldə etdikdən sonra qazboşalması aralığı atmosfer təzyiqinə qədər CO qazı ilə doldurulmuşdur. Qazboşalması aralığının qaz tərkibi şəkil 12-də nümayiş etdirilən kütlə-spektroqramında verilmişdir.

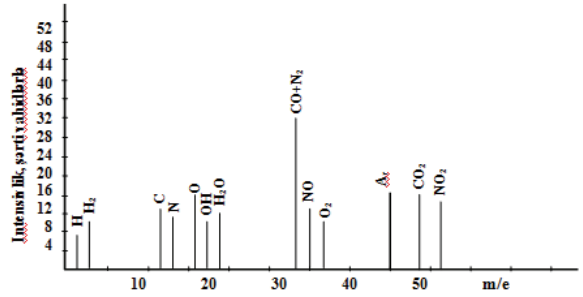


Şəkil 11. Laboratoriya şəraitində hazırlanmış müxtəlif çirkləndirici təşkiledicilərə malik su nümunəsinin təmizlənməsini əks etdirən kütlə-spektroqramı
1- İlkin suyun tərkibi
2- Qurğunun A hissəsindən olan suyun tərkibi
3- Qurğunun C hissəsindən olan suyun tərkibi
4- Çıxışdan olan suyun tərkibi



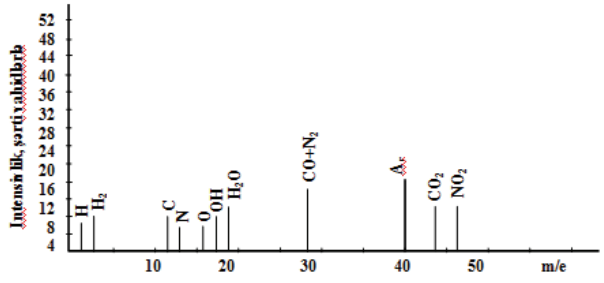
Şəkil 12. Sistemdə karbon oksidinin kütlə-spektroqramı.

Kütlə-spektroqramından göründüyü kimi sistemdə karbon oksidindən əlavə olaraq atmosfer havasının qalıq qazlarının atom və molekullarıda özünə yer almışdır. Bu mühitə arakəsməli elektrik qazboşalması vasitəsilə təsir etdikdə, qaz mühitinin tərkibində baş verən dəyşikliklər şəkil 13-də verilmiş kütlə-spektroqramında əks olunmuşdur. Spektroqramdan göründüyü kimi qazboşalmasının təsiri nəticəsində molekulların dissosiasiyaya uğraması və qaz reaksiyalarının reallaşması nəticəsində sistemdə yeni CO_2, NO, NO_2 kimi molekulların əmələ gəlməsi və ümumiyyətlə mühitdə kəmiyyət və keyfiyyət dəyişmələri müşahidə olunur.

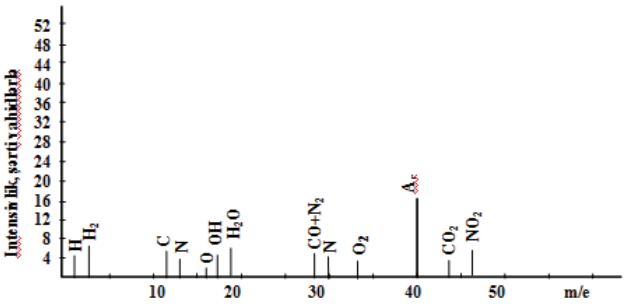


Şəkil 13. Qazboşalmasının təsiri nəticəsində qaz mühitində baş verən dəyişiklikləri əks etdirən kütlə spektroqramı.

Tədqiqatlar nəticəsində, seolit və silikagel cütlüyünü adsorbsiya prosesində tətbiq etməklə atmosfer havasının CO, CO_2, NO, NO_2 qazlarından kifayət qədər effektli təmizlənməsinə nail olunmuşdur. Elektrik qazboşalmasının parametrlərini, qazın dinamik rejimdə axin sürətini, təzyiqi və qurğunun digər parametrlərini tənzimləməklə adsorbsiya-desorbsiya proseslərini optimallaşdırmaq mümkün olmuşdur. Prosesin nəticələrini əks etdirən kütlə-spektroqramları şəkil 14 və şəkil 15-də təqdim olunmuşdur.



Şəkil 14. Atmosfer havasının CO, CO_2, NO, NO_2 qazlarından, adsorbsiya üsulu ilə təmizlənməsinin kütlə-spektroqramı



Şəkil 15. Arakəsməli elektrik qazboşalmasının təsiri şəraitində atmosfer havasının CO, CO_2, NO, NO_2 qazlarından, adsorbsiya üsulu ilə təmizlənməsinin kütlə-spektroqramı

Adsorbsiya proseslərində tətbiq olunan məsaməli adsorbentlər əsasən kimyəvi tərkibi, strukturu, müxtəlif qaz atom və molekullarına qarşı həssaslıqları, digər parametrləri və xüsusiyyətləri ilə fərqlənirlər. Texnoloji proseslərdə tətbiq olunan adsorbentlərdə, prosesin məhsuldarlığından, adsorbsiya olunan qaz və ya mayenin xüsusiyyətlərindən asılı olaraq, müəyyən zamandan sonra doyma halı müşahidə olunur və bu halda adsorbenti yenidən aktivləşdirmək üçün desorbsiya prosesinin aparılması zəruriyyəti irəli gəlir. Desorbsiya prosesini xarakterizə edən əsas xüsusiyyətlər, prosesin qısa zamanda aparılması, adsorbentin əvvəlki aktiv vəziyyətə tam şəkildə qaytarılması, desorbsiya üsulunun iqtisadi səmərəliliyi və sairə bu kimi parametrlərdir.

"Adsorbsiya-desorbsiya" prosesləri sənaye tullantı suların, məişətdə istifadə olunan suların, karbohidrogen mənşəli mayelərin, yağların, təbii və digər qazların təmizlənməsi və sairə bu kimi proseslərdə geniş istifadə olunduğundan bu proseslər əsasında hazırlanmış texnologiyaların təkmilləşdirilməsi, yeni texnologiyaların işlənilməsi, proseslərin idarə olunma mexanizmlərinin müəyyənləşdirilməsi, iqtisadi səmərəliliyinin təminatı günün aktual məsələləri sırasına daxil edilir.

Müasir texnoloji proseslərdə desorbsiya prosesi adsorbentlərin təmiz su vasitəsilə yuyulması, adsorbentlərə, bu və ya digər üsulla, müvafiq yüksək temperaturların təsiri vasitəsilə yerinə yetirilir. İstifadə olunan adsorbentlərin miqdarı az olan halda, prosesin effektivliyini yüksəltmək məqsədilə temperatura təsirləri qapalı həcmlərdə vakuum şəraitində aparılır.

Qeyd etmək lazımdır ki, yuxarıda göstərilən üsullar ümumən qəbul olunmuşdur, sənayenin tələblərinə kifayət qədər cavab verir, lakin adsorbentlərin əvvəl adsorbsiya olunmuş atom və molekullardan tam şəkildə azad olunmasını təmin etmir və əksər hallarda prosesin yerinə yetirilmə müddətləri qaneedici olmur.

Təqdim olunan işdə desorbsiya prosesinin, prinsip etibarı ilə yeni texnologiyası və bu texnologiyanın tədqiqindən alınmış nəticələr verilmişdir.

Tədqiqatlarda yataqları Respublikanın ərazisində yerləşən, təbii seolit-klinoptilolitdən istifadə edilmişdir. Diametri 2-3 mm olan klinoptilolit dənələri seçilərək 400°C temperaturda 4 saat müddətində, vakuum şəraitində regenerasiya prosesinə məruz qaldıqdan sonra həmin adsorbentlərdə, tərkibində 5% həcmi H_2S molekulu olan metan qazı atmosferində, doyma halına qədər, adsorbsiya prosesi aparılmışdır. Adsorbentin doyma halı kütlə-

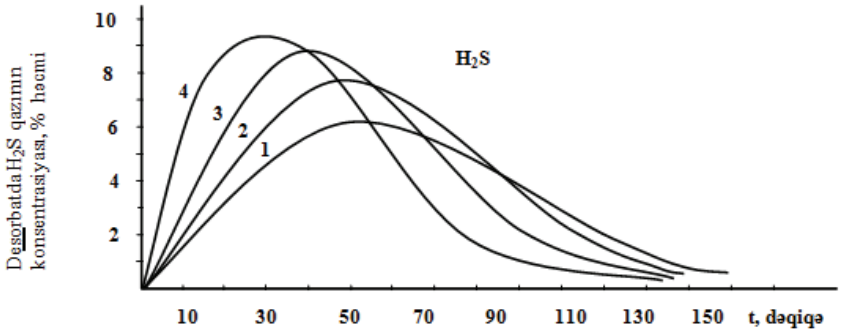
spektrində H_2S molekuluna müvafiq maksimumun əmələ gəlməsilə müəyyənləşdirilmişdir. Təcrübələrdə regenerasiya qazı olaraq rütubətdən azad olmuş və 400°C temperatura malik azot qazından istifadə olunmuşdur. Təcrübənin növbəti mərhələsində, adsorbent arakəsməli elektrik qazboşalması əmələ gətirən reaktorun qazboşalması aralığında yerləşdirilərək, elektrik qazboşalması təsir etmədiyi halda və qazboşalmasının elektrik sahə intensivliyinin müxtəlif qiymətlərinə uyğun təsiri olan hallarda adsorbentin regenerasiya prosesi yerinə yetirilmişdir. Regenerasiya qazının temperaturu 400°C təşkil etmişdir.

Cədvəl

Tullantı suların təmizlənməsi üzrə nəticələr

№	Su maddəsinin təşkiledicilə	elektrik stansiyasının ... şirkətinin tullantı suları		Müxtəlif mərhələlərdə suyun təmizlənməsi №1				Müxtəlif mərhələlərdə suyun təmizlənməsi №2			
		№1	№2	1	2	3	4	1	2	3	4
1	kalsium, mq/l	86,2	62,5	20,4	12,6	6,3	<1	8,4	3,2	2,7	<0,2
2	maqnium, mq/l	42	12,7	9,8	4,5	2	<0,5	4,3	1,1	0,5	<0,1
3	natrium+kalium, mq/l	183	52	10,6	3,2	1,4	<0,01	3,4	2,1	0,1	<0,01
4	sulfatlar, mq/l	354	158	1278	93	60	40,5	50,7	30,2	28,4	<20
5	xloridlər, mq/l	75	37	60,8	56,4	44,3	39,7	22,5	19,8	19,8	18,3
6	ammonium birləşmələri, mq/l	400	150	120	30,8	20,4	<1,0	20,8	16,3	16,0	<0,6
7	nitratlar, mq/l	1,3	1,0	0,5	0,3	0,3	<0,2	0,4	0,1	0,1	<0,1
8	Nitritlər, mq/l	0,42	0,1	0,19	0,19	0,19	<0,1	0,06	0,01	0,01	<0,01
9	ümumi qələvilik, mq/l	3,5	2,7	2,2	1,9	1,6	<1	1,4	0,8	0,3	0,1
10	ümumi codluluq, mq ekv./l	24,2	11,8	10,8	8,2	3,2	0,23	2,9	1,4	0,8	0,16
11	neft məhsulları, mq/l	12	8	3,5	2,6	2,0	0	1,6	0,4	0,4	0
12	fosfatlar, mq/l	1÷4	0,5÷2	0,8	0,5	0,5	<0,3	0,2	0,1	0,1	0
13	fenollar, mq/l	1,2	0,8	0,58	0,42	0,3	0,001	0,23	0,1	0,1	0,001
14	asılqan şəkilli qarışıqlar, mq/l	1,8	1,4	0,4	0,2	0,2	0	0,2	0,2	0,1	0
15	kimyəvi O_2-nin sərfinə görə üzvi qarışıqlar, mq/l	2.400	980	730	300	120	<20	200	75	47	<10
16	Bioloji O_2-nin sərfinə görə üzvi qarışıqlar, mq/l	1060	640	130	60	60	<10	50	30	22	<5
17	dəmir, mq/l	58	20,5	8,7	3,5	3,5	<1	4	2,3	1	0
18	mis, mq/l	0,8	0,3	0,2	0,1	0,1	0,01	0,1	0	0	0
19	İonların cəmi mq/l	6.150	575	2,340	650	140	0	240	62	10	0
20	quru qalıq, mq/l	6.032	486	300	240	240	86	130	70	70	30

Desorbsiya olunmuş H_2S qazının regenerasiya qazında konsentrasiyanın dəyişməsi şəkil 16-da təqdim olunmuşdur.

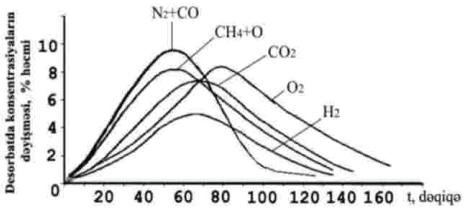


Şəkil 16. Desorbsiya olunmuş H_2S qazının regenerasiya qazında konsentrasiyanın dəyişməsi. 1.Qazboşalmasının təsir etmədiyi hal. 2. E = 40 kV/sm.3. E = 50 kV/sm. 4. E = 60 kV/sm.

Şəkil 16-da verilmiş nəticələrin araşdırılmasından məlum olur ki, elektrik qazboşalmasının gücünün yüksəlməsi desorbsiya prosesinin daha qısa zamanda və daha tam şəkildə reallaşmasına səbəb olur. Elektrik qazboşalmasının prosesə təsir etmədiyi hala müvafiq 1 və maksimal güclə təsir etdiyi hala müvafiq 4 əyrilərinin müqayisəsindən məlum olur ki, elektrik qazboşalmasının təsiri desorbsiya prosesinin kinetikasına əhəmiyyətli təsir göstərərək prosesin dərinliyini 45% həcmi yüksəltmiş olur.

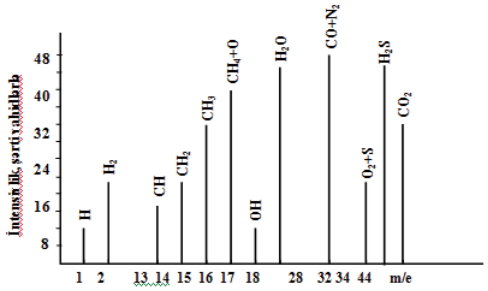
Qeyd etmək lazımdır ki, analoji nəticələr desorbsiya olunan hər bir qaz halında müşahidə edilmişdir.

Şəkil 17-də elektrik qazboşalmalarının təsiri şəraitində müxtəlif qazların desorbsiya prosesini xarakterizə edən nəticələr təqdim olunmuşdur.



Şəkil 17. Qazboşalmalarının təsiri şəraitində (E=60kV/sm) müxtəlif qazların desorbsiyası zamanı regenerasiya qazında konsentrasiyalarının dəyişməsi. Re generasiya qazının temperaturu, t=400^{0}C təşkil etmişdi.

Tədqiqatlarda regenerasiya qazının tərkibinin təşkiledicilərini müəyyənləşdirmək üçün MSX-4 markalı, uçuş müddətli kütlə-spektrometrindən istifadə edilmişdir. Şəkil 18-də adsorbentdən CH_4+H_2S qaz qarışığının elektrik qazboşalmasının təsiri şəraitində desorbsiya prosesini xarakterizə edən kütlə-spektroqramı verilmişdir.



Şəkil 18. Desorbsiya prosesinin kütlə-spektroqramı (E=60kV/sm)

Kütlə-spektroqramından göründüyü kimi CH_4 və H_2S qazları eyni zamanda onların təşkiledicileri şəklində də desorbsiya prosessinə uğramış olurlar. Əlavə olaraq adsorbentdən CO, CO_2, OH, H_2O molekullarının desorbsiyası müşahidə olunur. Desorbsiya proseslərinin tədqiqatlarına dair çoxsaylı təcrübələrdən alınmış nəticələrin araşdırılmasından məlum olur ki, elektrik qazboşalmalarının desorbsiya proseslərinə təsir mexanizmi bir proseslə məhdudlaşmayaraq aşağıda qeyd olunan bir sıra fiziki-kimyəvi proseslərlə xarakterizə olunur:

- Elektrik qazboşalmalarının adsorbentlərə təsiri nəticəsində adsorbentlərdə lokal qızma halı mümkün olur;
- Qazboşalmasının təsirləri adsorbentin məsamələrinin səthi üzrə atom və molekulların adsorbentdən kənara diffuziya prosesi sürətlənir;
- Qazboşalmalarının təsiri nəticəsində desorbant molekullarının dissosiasiyaya uğrayaraq, təşkiledici atomlara parcalanması;
- Qazboşalmalarının təsiri ilə atom və molekulların adsorbentlə hidrogen, ion, kovalent və digər əlaqələrinin qırılması: - atom və molekulların sistemdə bağlı haldan həll olunmuş hala keçməsi;
- Qazboşalmalarının təsirləri nəticəsində adsorbentin səthindən ikinci növ ion emissiyası prosesinin mövcudluğu.

Beləliklə yuxarıda qeyd olunan proseslərin reallaşması son nəticədə desorbsiya prosesinin intensivliyinin yüksəlməsinə səbəb olur.

Tədqiqatların nəticələti adsorbsiya üsulu ilə karbohidrogen mənşəli qazların, mayelərin, sənaye tullantı suların və digər istehsalat sahələrinin ekoloji problemlərinin həllində mühüm əhəmiyyət kəsb edə bilər.

Təqdim olunan işdə ozon üzrə yüksək məhsuldarlığa malik elektron-ion texnologiyasına daxil olan ozonator qurğusu layihələndirilmiş və onun müvafiq hesabatı verilmişdir. Ozonator üzrə işlənilmiş layihə və hesabat ozon qazı üzrə müxtəlif məhsuldarlığa malik ozonatorların hazırlanmasında baza sənədi kimi istifadə oluna bilər.

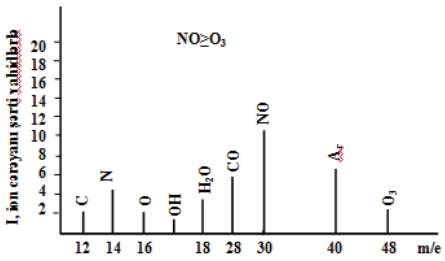
Dissertasiya işində atmosferin ozon qatına təsir edən amillərin təcrübi tədqiqatları yerinə yetirilmişdir. Bu məqsədlə CO mühitində NO qazının konsentrasiyasından asılı olaraq O_3 molekulun miqdarının dəyişməsi tədqiq edilmişdir.

Tədqiqatların nəticələri şəkil 19 və şəkil 20-də təqdim olunmuşdur.

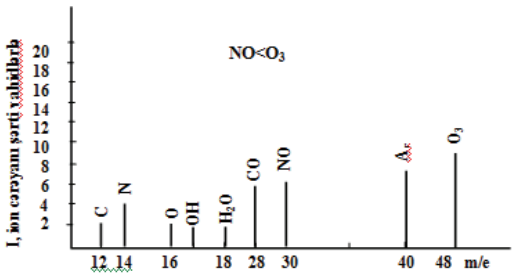
Tədqiqatlarda müəyyən edilmişdir ki, NO qazının konsentrasiyası O_3 qazının konsentrasiyasından çox olduqda CO qazı O_3 molekulunu parcalayaraq sistemdə ozon qazının miqdarını kəskin olaraq azaldır, NO qazının konsentrasiyası O_3 qazının konsentrasiyasından az olan halda isə CO qazı sistemdə əlavə ozon molekulasının yaranmasına səbəb olur şəkil 20.

Bu halda sistemdə reallaşan kimyəvi qaz raeaksiyalarının son nəticəsi aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$CO + O_3 \rightarrow CO_2 + O_2 \qquad NO \geq O_3$$
$$CO + 2O_2 \rightarrow CO_2 + O_3 \qquad NO \leq O_3$$



Şəkil 19. Sistemdə $NO \geq O_3$ şərti daxilində qaz mühitinin tərkibini əks etdirən kütlə spektri.



Şəkil 20. Sistemdə $NO<O_3$ şərti daxilində qaz mühitinin tərkibini əks etdirən kütlə spektri

Beləliklə tədqiqatların nəticələri əsasında atmosferdə ozon qazının miqdarının dəyişməsində həlledici əhəmiyyət kəsb edən enerji sistemlərinin ətraf mühitə tullantı qazlarının təsirlərinin müəyyənləşdirilməsinə nail olunmuşdur.

İstilik elektrik stansiyalarında, istilik mərkəzlərində və digər müvafiq sənaye və kommunal-məişət təsərrüfatlarında istifadə olunan odluq qurğularının effektivliyini, faydalı iş əmsalını və yanma prosesinin ekoloji tələblərini təmin etmək məqsədilə hazırda müxtəlif imkanlardan istifadə olunur.

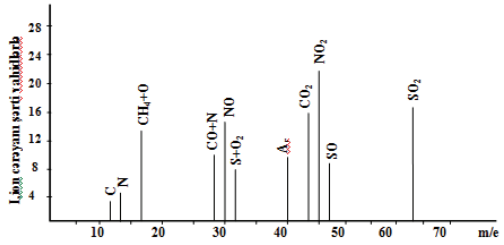
İşdə maye və qaz yanacaqdan istifadə olunan odluq qurğularında yanma prosesinə qazboşalması vastəsilə təsir edərək, yanma prosesinin tüstü qazlarının effektiv təmizlənməsinə baxılmışdır.

Odluq qurğusunda yanma prosesinin ekoloji problemlərinin həlli ilə əlaqədar olaraq təcrübələr aşagıdakı hallarda yerinə yetirilmişdir:

- Odluq qurğusuna verilən atmosfer havasına yanmadan əvvəl məşəl şəkilli elektrik qazboşalması vasitəsilə təsir göstərərək;
- Yanmada istifadə edilən hava-təbii qaz yanacağına qazboşalması vasitəsilə təsir göstərilən və eyni zamanda alova elektrik sahəsi ilə təsir göstərilən hal;

Yuxarıda qeyd olunan variantlar üzrə təcrübələr yerinə yetirilərkən tüstü qazlarının tərkibinə kütlə-spektrometri vasitəsilə nəzarət edilmişdir.

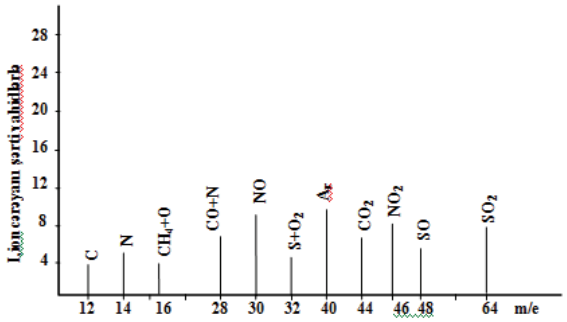
Təbii qaz-hava yanacağından istifadə edərək, elektrik təsirləri edilmədən yanma prosesinin tüstü qazlarının tərkibini əks etdirən kütlə-spektroqramı şəkil 21-də verilmişdir.



Şəkil 21. Yanma prosesinin tüstü qazlarının kütlə-spektroqramı

Şəkildən göründüyü kimi tüstü qazlarının tərkibində ətraf mühitə zərərli təsir göstərən qazlar müşahidə olunur.

Təcrübələrin növbəti mərhələsi odluq qurğusuna verilən havanın yanmadan əvvəl məşəl şəkilli qazboşalması vasitəsilə təsir göstərərək davam etdirilmişdir. Şəkil 22-də təcrübədən qeydə alınmış kütlə-spektroqramı verilmişdir.

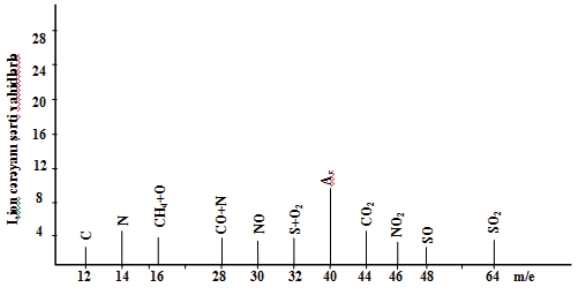


Şəkil 22. Odluq qurğusuna ionlaşmış hava verilərkən qeydə alınmış kütlə-spektroqramı.

Şəkildən göründüyü kimi odluq qurğusuna ionlaşmış hava daxil edildikdə tüstü qazlarında CH_4-metan qazının miqdarı kəsgin azalır ki, bu da yanacağın effektiv yanmasını təsdiq etməklə eyni zamanda metan qazının atmosferdə digər qazlarla reaksiyaya girərək ekoloji duruma zərər gətirməsinin qarşısını alır. Spektroqramda digər zərərli qazların da miqdarının azalması müşahidə olunur

Təcrübələrdə yanma prosesində istifadə edilən atmosfer havası təbii qaz yanacağına qazboşalması vasitəsilə təsir etdikdə və eyni zamanda alovun özünə elektrik sahəsilə təsir edilən hallarda tadqiqatlar yerinə yetirilmişdir. Bu halda elektrik təsirlərinin yanma prosesinin effektivliyinin yüksəlməsini və ekoloji duruma mənfi təsir göstərən amillərin azalmasını təsdiq edən nəticələr müşahidə olunmuşdur.

Bu tədqiqatların nəticələri şəkil 23-də verilmiş kütlə-spektroqramında təqdim olunmuşdur.



Şəkil 23. Yanacağa məşəlqazboşalması vasitəsilə və alova elektrik sahəsi ilə təsir edildikdə çıxışdakı qaz tərkibini əks etdirən kütlə-spektroqramı.

Qazboşalmasının yanacağa və elektrik sahəsinin alova təsirləri halında, yanacağın tam yanmasına səbəb, su buxarlarının dissosiasiyası nəticəsində yanmanın əlavə aktiv mərkəzlərinin əmələ gəlməsidir. Su buxarının dissosiasiyası elektrik sahəsinin, elektronların və temperaturun eyni zamanda təsiri ilə reallaşır. Kütlə-spektroqramlarının araşdırılmasından elektrik təsirləri nəticəsində aşağıdakı reaksiyaların mümkünlüyü məlum olur;

$$H_2O + e \rightarrow H + OH$$
$$H_2O + e \rightarrow O^- + 2H$$
$$H^- + O_2 \rightarrow O_2^- + H$$
$$H^- + O_2 \rightarrow OH^- + O$$

Həcmdə H, O, OH kimi yanmanın aktiv mərkəzlərinin yaranması sonradan yanma prosesinin zəncirvarı reaksiyasının gedişini və həcmini təmin etmiş olur. Eyni zamanda tüstü qazlarının tərkibində mövcud olan NO qazının konsentrasiyasının azalması atmosferdə əlavə ozon (O_3) qazının əmələ gəlməsinə səbəb olur ki, bu da öz növbəsində atmosferdə ozon qatının güclənməsinə gətirir.

Qazboşalmalarının yanma prosesinə təsirləri nəticəsində tüstü qazlarının tərkibində OH və HO_2-nin radikallarının əmələ gəlməsi, tərkibdə katalizator əhəmiyyəti daşıyaraq tüstü qazlarının tərkibində mövcud olan sülfidlərin oksidləşməsinə səbəb olur və bununla da qazların zərərli sulfid birləşmələrindən təmizlənməsini təmin etmiş olur. Bu üsulla atmosferdə turşu tərkibli yağıntıları

zəiflətməyə nail olunur. Qeyd etmək lazımdır ki, qazboşalmalarının təsirləri nəticəsində atmosferdə CH_4 və CO qazlarının konsentrasiyasının azalması eyni zamanda bu qazların mövcudluğu şəraitində gedən reaksiyalarda atmosferdə OH radikallarının azalmasının da qarşısı alınır.

Qeyd etmək lazımdır ki, günəşin ultrabənövşəyi şüalarının təsirləri şəraitində müxtəlif sənaye sahələrinin tüstü qazlarının müxtəlifliyi atmosferdə müxtəlif konsentrasiyalara malik qaz tərkibi yaradır ki, bu da öz növbəsində konversiya mexanizmi vasitəsilə reallaşan sürətli qaz reaksiyalarına səbəb olur. Nəticədə atmosferdə müxtəlif tərkibli zərərli birləşmələr müşahidə olunur ki, bu da ekoloji durumun tənzimlənməsində yeni effektiv üsulların işlənməsini, kompleks tədbirlərin tətbiq olunmasını tələb edir.

Beləliklə tədqiqatların nəticələri əsasında təsdiq olunur ki, məşəl şəkilli elektrik qazboşalmasının təsirlərindən istifadə edərək odluq qurğularında yanma prosesinin effektivliyini yüksəltməklə yanaşı eyni zamanda odluq qurğularının ekoloji təminatlı istismarını həyata keçirmək olar. Yanacağın və tüstü qazlarının qaz tərkibindən asılı olaraq elektrik qazboşalmasının bu və ya digər təsir halını tətbiq etmək olar.

Tədqiqatların nəticələri Neft-qaz, neft kimyası, energetika, su hazırlığı təsərrüfatı və digər müvafiq sənaye sahələri ücün əhəmiyyət kəsb edir.

[1] *K.M. Abdullayev, R.K. Məmmədov, Y.İ. Lətifov*. Enerji ehtiyatları. Elektrik enerjisi istehsalı və ətraf mühit, II cild. Bakı, ″Zaman-3″, 2007.

[2] *Н.Ф. Еланский, О.И. Смирнова.* Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 1997. Т. 33. №5. с.597-611.

[3] *Е.А. Кадышевич, Н.Ф.Еланский.* Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 1993. Т. 29 №3. с.346-352

[4] *И.К. Ларин.* Изв. РАН. Энергетика. 1996, №6. с.24

[5] *А.Н.Ермаков, Г.А.Поскребышев, А.П.Пурмаль*. Изв. РАН. Энергетика. 1996. №6. с.30-40.

[6] *Ю.А. Израэль, И.М. Назаров, А.Я. Пресман и др.* Кислотные дожди. Ленинград: // Гидрометеоиздат, 1983, с.206.

[7] *И.К. Ларин, А.А. Угаров.* Климатический прогноз на 2000-2010 годы и роль атмосферных химических процессов I. Оценка возможного глобального потепления в XXI веке. Химическая физика. 2002

А.М. Гашимов, К.Б. Курбанов, Г.Дж. Гусейнов

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В РЕШЕНИИ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ПРОБЛЕМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

В настоящей работе приведены результаты исследования процессов очистки природного газа и жидкостей углеводородной природы употребляющихся в качестве горючего материала в производстве электроэнергии. В этой связи рассмотрены следующие вопросы: активация и модифицирование поверхности адсорбентов различными воздействиями, в частности с помощью электрического разряда; управление сорбционными процессами; интенсификация процессов очистки газов и жидкостей; активация реагентов; изучение адсорбционных и десорбционных процессов происходящих в условиях воздействия электрических разрядов.

A.M. Gashimov, K.B. Kurbanov, G.J. Guseynov

ELECTROPHYSICAL PROCESSES IN ECOLOGICAL PROBLEM SOLUTION OF POWER SYSTEMS

The investigation results of purification processes of natural gas and hydrocarbon nature liquids, which are used in the capacity of combustible material in the power generation, are given in the present work. According to this fact the following questions: activation and modification of adsorbent surfaces by different influences, in particular, by electric charge; the control of sorption processes; intensification of gas and liquid process purification; reagent activation; study of adsorption and desorption processes taking place in the conditions of electric charge influence, are considered.

Qəbul olunma tarixi: 04.05.2011

TƏMƏL PRİNSİPLƏRDƏN β-GaS KRİSTALI ÜÇÜN HAL TƏNLİYİ PARAMETRLƏRİNİN TƏYİNİ

Z.A. CAHANGİRLİ*, H.S. ORUCOV, N.T. MƏMMƏDOV
AMEA akademik H.M. Abdullayev adına Fizika İnstitutu, Az-1143, Bakı, H.Cavid prospekti, 33.
**e-mail: cahanzakir@yahoo.com*

Təməl prinsiplərdən ABINIT proqramlar paketi və LAPW metodu istifadə olunmaqla tam enerjinin minimuma gətirilməsi yolu ilə β-GaS laylı yarımkeçiricisi üçün kristal quruluşu optimizasiya olunmuşdur. Bu kristalın Murnaghan və Birch-Murnaghan hal tənliklərinin bütün parametrləri təyin edilmişdir. Hesablamadan alınmış və Murnaghan hal tənliyinə görə təyin edilmiş qiymətlər əsasında tam enerjinin həcmdən asılılıq əyrisi qurulmuşdur.

Açar sözlər: ABINIT, LAPW, Murnaghan, Birch-Murnaghan hal tənlikləri
UOT: 6166 Dk; 6320 Dj

Fonon spektrləri kristalların strukturları, faza keçidləri zamanı struktur dəyişmələri və atomlararası qarşılıqlı təsir haqqında infomasiya daşıdığından onların eksperimental və nəzəri tədqiqi mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Qeyd etmək lazımdır ki, ion və qəfəs relaksasiyasının dəqiq təyin edilməsi qəfəs dinamikasının korrekt hesablanması üçün vacibdir. Kristalda kimyəvi rabitənin, elektron və fonon strukturlarının müfəssəl tədqiqi üçün kristal qəfəsin parametrlərinin – qəfəs sabitlərinin və elementar qəfəsdə atomların koordinatlarının optimallaşdırılmış qiymətini hesablamaq aktual məsələdir.

Təqdim olunan məqalədə əvvəlcə WİEN2k proqramlar paketi [1] ilə LAPW metodu [2] tətbiq olunmaqla β-GaS laylı birləşməsi üçün təməl prinsiplərdən tam enerjinin minimuma gətirilməsi yolu ilə kristalın tarazlıq halı hesablanaraq quruluş parametrləri təyin edilmiş (bax, cədvəl II.3.), sonra Murnaghan [3] və Birch-Murnaghan [4] hal tənliklərinin parametrləri (həcmi deformasiya modulu - B_0, onun təzyiqə görə birinci tərtib törəməsi B_0') təyin edilmişdir. Qəfəs parametrlərinin optimizasiyası həmçinin ABİNİT proqramlar paketi [5,6] vasitəsilə normanı qoruyan Hartwigsen-Goedecker-Hutter (HGH [7] və Troullier-Martins (TM) [8] ion psevdopotensiallarından istifadə olunmaqla Funksional Sıxlıq Həyəcanlaşma Nəzəriyyəsinin [9] Lokal Sıxlıq Yaxınlaşmasında [10] yerinə yetirilmişdir. Korelyasiya effektləri Ceperley-Alder-Perdew-Zunger [11] sxemi üzrə nəzərə alınmışdır. Dalğa funksiyalarının ayrılışında enerjiləri 40 *Ha*-ni aşmayan müstəvi dalğalardan istifadə olunmuşdur. Brilluen zonası üzrə inteqrallama 8x8x4 bölgülərlə Monkhorst-Pack sxem ilə aparılmışdır. Tarazlıq strukturu qəfəs parametrlərinə nəzərən tam enerjinin, atom koordinatları isə Helmann-Feynman qüvvələrinin minimizasiyası vasitəsilə təyin edilmişdir. Minimizasiya prosesi qüvvələrin modulunun $\left|\vec{F}\right|$ <10^{-7}Ha/Bohr şərtini ödənməsinə qədər davam etmişdir. Kristal qəfəsin parametrləri təyin edilərkən elementar qəfəsin həcminin dəyişməsi ±8% təşkil etmişdir.

β-GaS yarımkeçirici kristalı S-Ga-Ga-S ardıcıllığı ilə düzülmüş bir-birilə zəif əlaqədə olan dörd atom müstəvilərindən ibarətdir [12]. Lay daxilində hər bir metal atomu üç halkogen və bir metal atomları ilə tetraedrik əhatə olunmuşdur və onlarla ion-kovalent kimyəvi rabitəsi əmələ gətirir. β-GaS monokristalı qrup simmetriyası D_{6h}^4 olan heksaqonal struktura malikdir. Elementar qəfəs hər biri iki formula vahidindən təşkil olunmuş iki laydan ibarətdir. İnversiya əməliyyatı layın birini digərinə keçirir. Atomlar standart 4(f) Uaykopf vəziyyətində yerləşir.

Məlumdur ki, kristala xaricdən hər hansı bir qüvvə ilə təzyiq göstərildikdə o deformasiyaya uğrayır. Bu zaman onun qəfəs parametrləri, atom koordinatları və uyğun olaraq elektron buludunun paylanması dəyişikliyə uğrayır. Deformasiyaların böyük qiymətlərində kristalın tarazlıq halını almaq üçün ionların və həmçinin elektron buludunun yenidən paylanmasını hesablamalarda nəzərə almaq lazım gəlir. Ona görə təzyiqin (deformasiyanın) verilmiş qiymətində bu parametrlərin təyin edilməsi aktual məsələdir.

Tam enerjinin həcmə görə (sabit entropiyada) törəməsi vasitəsilə təzyiqi

$$P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S \qquad (1)$$

təzyiqin həcmə görə (sabit temperaturda) törəməsi vasitəsilə isə həcmi deformasiya modulunu təyin edək,

$$B = -V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T \qquad (2)$$

Həcmi deformasiya modulunun təzyiqə görə törəməsi

$$B' = \left(\frac{\partial B}{\partial P}\right)_T \qquad (3)$$

təzyiqin kiçik dəyişməsinə görə təyin edilir. Əgər $B' = B_0'$ olduğunu qəbul etsək, onda $B = B_0 + B_0' P$ olacaq, burada B_0 $P=0$ qiymətində həcmi deformasiya modulunun qiymətidir. Beləliklə, həcminin dəyişməsini təzyiqin dəyişməsilə aşağıdakı şəkildə ifadə etmək olar:

$$\frac{dV}{V} = -\frac{dP}{B_0 + B_0' P}. \qquad (4)$$

(4) ifadəsini inteqrallasaq nəticədə alarıq:

$$P(V) = \frac{B_0}{B_0'}\left(\left(\frac{V_0}{V}\right)^{B_0'} - 1\right) \qquad (5)$$

Bu ifadədən isə

$$V(P)=V_0\left(1+B_0'\frac{P}{B_0}\right)^{-1/B_0'} \qquad (6)$$

taparıq, burada V_0 - kristalın elementar özəyinin tarazlıq həcmidir.

Məlumdur ki, kristal üçün tam enerjinin həcmdən

$$E(V)=E_0+\left[\frac{B_0V}{B_0'}\left(\frac{(V_0/V)^{B_0'}}{B_0'-1}+1\right)-\frac{B_0V}{B_0'-1}\right]\frac{1}{14703.6}, \qquad (7)$$

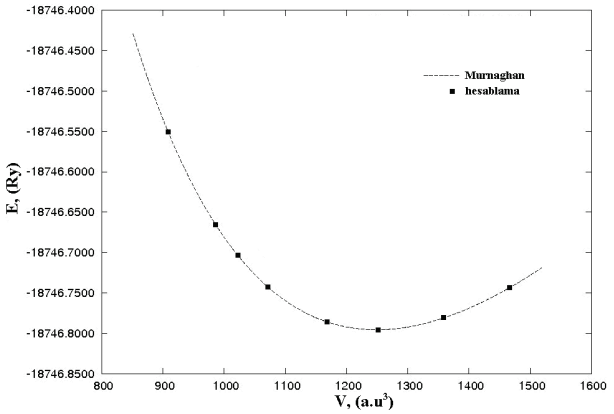
Birch-Murnaghan hal tənliyi [4] isə

$$E(V)=E_0+\frac{9\cdot V_0B_0}{16}\left\{\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{2}{3}}-1\right]^3B_0'+\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{2}{3}}-1\right]^2\left[6-4\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{2}{3}}\right]\right\}\frac{1}{147036} \qquad (8)$$

şəklində ifadə olunur. Təzyiqin həcmdən asılılığı:

$$P(V)=\frac{3B_0}{2}\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{7}{3}}-\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{5}{3}}\right]\left\{1+\frac{3}{4}(B_0'-4)\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{2}{3}}-1\right]\right\} \qquad (9)$$

Şəkil 1.-də laylı kristalı üçün LAPW metodu ilə hesablamalardan alınmış və Murnaghan hal tənliyinə görə təyin edilmiş tam enerjinin həcmdən asılılıq qrafiki verilmişdir.



Şəkil 1. β-GaS üçün tam enerjinin həcmdən asılılığı.

Şəkildən göründüyü kimi hesablamalardan alınmış və həm Murnaghan, həm də Birch-Murnaghan hal tənliyinə görə təyin edilmiş tam enerjinin həcmdən asılılıq əyriləri böyük dəqiqliklə üst-üstə düşür.

Cədvəl 1.-də Hellman-Feynman qüvvələrinin minimizasiyası vasitəsi ilə kristalın daxili vəziyyətini təyin edən parametrləri relaksasiya edərək hesablanmış tam enerjinin elementar özəyin həcmindən asılılığına görə, habelə Murnaghan və Birch-Murnaghan hal tənliklərini fiksasiya etməklə hesablanmış V_0, B_0 və B_0' parametrləri verilmişdir. Elementar qəfəsdə atom koordinatlarının və kristal qəfəsin parametrlərinin hesablanmış qiymətləri (cədvəl 2.) ədəbiyyatda verilən [12] qiymətlərlə yaxşı uzlaşır. Qeyd etmək lazımdır ki, alınan nəticələr gələcəkdə β-GaS kristalının fonon spektrinin hesablanmasında, deformasiyanın elektron və optik xassələrə təsirinin tədqiq olunmasında istifadə oluna bilər.

Cədvəl 1.

β-GaS üçün Murnaghan və Birch-Murnaghan hal tənliklərini ödəyən parametrlər.

Parametr	*β-GaS*	
	Murnaghan	Birch-Murnaghan
V_0 (a.u.)	1249.0274	1247.7238
E_0 (*Ry*)	-18746.795672	-18746.795810
B_0 (*GPa*)	50.1190	50.7100
B_0'	3.0121	3.2547

Cədvəl 2.

β-GaS -in ABINIT və LAPW metodları ilə hesablanmış qəfəs parametrləri

Qəfəs parametrləri	LAPW	ABINIT		Eksper. [12]
		HGH	TM	
a, Å	3.463	3.485	3.425	3.587
c, Å	15.254	15.261	15.155	15.492
z (Ga)	0.172	0.172	0.172	0.171
z (S)	0.6028	0.6023	0.6031	0.6016

[1] *K. Schwarz, P.Blaha, G.K.H Madsen*. Computer Physics Communications, 2002, v.147, p.71-76.

[2] *K. Schwarz. and P. Blaha*. Quantum Mechanical Computations at the Atomic Scale for Material Sciences. WCCM V, Vienna, Austria , July 7-12, 2002, ISBN 3-9501554-0-6.

[3] *F.D. Murnaghan*. The Compressibility of Media under Extreme Pressures. Proceedings of the

National Academy of Sciences, 1944, v.30, p.244-247.
[4] *F. Birch*. Physical Review, 1947, v.71, p.809-824.
[5] *X. Gonze, J.M. Beuken, R. Caracas et al.* Comput. Mater. Sci., 2002, v.25, p.478-492.
[6] The ABINIT code is a common project of the Universite Catholique de Louvain, Corning Incorporated, and other contributors (http: www.abinit.org).
[7] *C. Hartwigsen, S. Goedecker, and J. Hutter*. Phys. Rev. B, 1998, v.58, N7, p.3641-3662.
[8] *N. Troullier and J. Martins.* Phys. Rev. B, 1991, v.43, p.1993-2006.
[9] *P. Hohenberg, W. Kohn.* Phys. Rev., 1964, v.136, p.B864-B871.
[10] *W. Kohn W. and L. Sham.* Phys. Rev., 1965, v.140, p.A1133-A1138.
[11] *J.Perdew and A. Zunger*. Phys. Rev. B, 1981, v.23, p.5048-5078.
[12] *T.J. Wieting, J.L. Verble*. Phys.Rev. B, 1972, 5, p.1473

З.А. Джахангирли, Г.С. Оруджев, Н.Т. Мамедов

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЙ β-GaS ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Используя расчеты из первых принципов в рамках пакет-программ ABINIT и LAPW, минимизацией полной энергии, оптимизирована кристаллическая структура слоистого полупроводника β-GaS. Определены все параметры уравнений Мурнагана и Бирч-Мурнагана, описывающих равновесное состояние этой кристаллической структуры. На основе данных, полученных из расчетов и из уравнения состояния Мурнагана, построен график зависимости полной энергии от объема.

Z.A. Jahangirli, H.S. Orudzhov, N.T. Mamedov

CALCULATION OF THE EQUATION OF STATES OF THE β-GaS FROM FIRST PRINCIPLES

Minimizing total energy, the crystal structure of layered semiconductor β-GaS was optimized using first principle calculations within ABINIT and LAPW program packages. All parameters of Murnaghan and Birch-Murnaghan equations defining the equilibrium state of the crystal structures are determined. Using results received from calculations and from the equation of states of Murnaghan, the dependence of total energy from volume is drawn.

Qəbul olunma tarixi: 04.05.2011

$Rb_{0,95}Cs_{0,05}NO_3$ MONOKRİSTALINDA III→II POLİMORF ÇEVRİLMƏNİN KİNETİKASI

V.İ. NƏSİROV, A.F. HƏZİYEVA, Y.Q. ƏSƏDOV, R.C. ALIYEVA
Azərbaycan MEA akademik H.M. Abdullayev adına Fizika İnstitutu, Az-1143, Bakı, H.Cavid prospekti, 33

Optik mikroskopiya üsulu ilə $Rb_{0.95}Cs_{0.05}NO_3$ monokristallarında III→II polimorf çevrilmənin kinetikası tədqiq olunaraq II modifikasiya kristalının böyümə sürətinin temperaturdan $\upsilon=(-0,375\Delta T+0,465\Delta T^2-0,0019\Delta T^3)\cdot 10^{-2}$sm/san funksional asılılığı müəyyən olunmuşdur. Alınan nəticələr əsasında III→II çevrilmənin aktivləşmə enerjisi hesablanaraq $E_{III\to II}=124,7$ kC/mol alınmışdır.

Açar sözlər: polimorf çevrilmə, modifikasiya, morfologiya
UOT: 544 344

Məlumdur ki, otaq temperaturundan ərimə temperaturuna kimi ($T_{ər}$=587K) rubidium nitratda dörd polimorf modifikasiya mövcuddur. Otaq temperaturunda IV modifikasiya kristalı P31 simmetriyalı romboedrik qəfəsə malik olub, qəfəs parametrləri a=10.48 Å, c=7.45Å [1]-dir. T>437K temperaturda romboedrik IV-modifikasiya $Pm\bar{3}m$ simmetriyalı, a=4.35Å parametrli kubik modifikasiyaya [2], T>492K temperaturda həmin kubik modifikasiya $Pm\bar{3}m$ simmetriyalı a=5.48Å, c=10.71Å parametrli romboedrik modifikasiyaya [3] və nəhayət T>546K temperaturda bu romboedrik modifikasiya da öz növbəsində $Fm\bar{3}m$ simmetriyalı və a=7.32 Å parametrli kubik modifikasiyaya çevrilir [4]. Rubidium nitratda baş verən bu çevrilmələr enantiotropdur. Başqa sözlə desək, nümunə soyudularkən həmin ardıcıllıqla əks çevrilmələr baş verir.

Sezium nitratda isə otaq temperaturundan ərimə temperaturuna kimi ($T_{ər}$=687K) iki polimorf modifikasiya mövcuddur. Otaq temperaturunda o, P3/m (II modifikasiya) simmetriyalı, a=10.87Å, b=7.76Å parametrli rombik psevdotriqonal qəfəsdə kristallaşır [5]. T>434K temperaturda bu qəfəs Pa3 simmetriyalı, a=8.98 Å parametrli kub qəfəsə (I modifikasiya) çevrilir [6]. Bu maddədə də baş verən polimorf çevrilmə enantiotropdur.

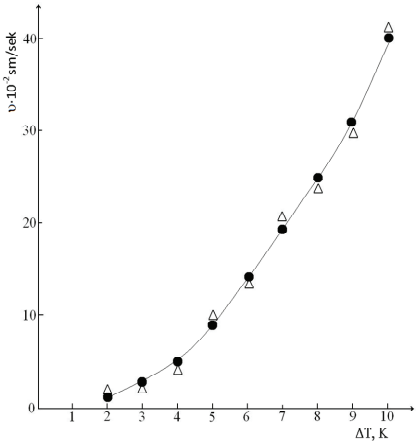
[7,8]-də rubidium və sezium nitrat kristallarında polimorf çevrilmələr zamanı kristal böyümələrinin morfologiyası tədqiq olunmuş, təcrübələr nəticəsində həmin kristallarda yeni x-modifikasiyanın mövcudluğu müəyyən edilmişdir. Eyni zamanda rubidium və sezium nitrat kristallarında polimorf çevrilmələrin mexanizminin ümumi qanunauyğunluqlara malik olduğu müəyyən olunmuşdur.

[9]-a görə kifayət qədər yüksək təzyiqlərdə rubidium nitratın yüksək temperaturlu II və I modifikasiyaları sıradan çıxır və yüksək temperatur modifikasiyası kimi kristalda III modifikasiya qalır. [10]-a görə isə sezium nitratın rubidium nitratdakı bərk məhlulunda sezium duzlarının ~25mol% konsentrasiyasında da I və II modifikasiyalar aradan çıxır.

Molekulyar-dinamik modelləşdirmə ilə rubidium və sezium nitrat kristallarında quruluş faza çevrilmələri tədqiq olunmuş [11], $RbNO_3$-$CsNO_3$ sisteminin faza diaqramı qurulmuş [12], habelə rubidium nitratda IV↔III↔II↔I polimorf çevrilmələri zamanı qarşılıqlı çevrilən modifikasiyalar arasında kristalloqrafik istiqamət əlaqələri araşdırılmışdır [13].

Təqdim olunan bu iş sezium nitratın rubidium nitratda bərk məhlullarında polimorf çevrilmələrin mexanizminin tədqiqinə həsr olunmuş tədqiqat işlərinin davamı olub [14-15], işdə $Rb_{0.95}Cs_{0.05}NO_3$ monokristallarında III→II polimorf çevrilmənin kinetikasının tədqiqinin nəticələri verilmişdir.

Təcrübələr [16]-da verilən metodika üzrə aparılmış, III→II çevrilməsi zamanı II-modifikasiya kristalın böyümə sürəti temperaturdan asılı olaraq böyüyən kristalın eyni (hkl) üzündə ölçülmüşdür. Təcrübələr zamanı ölçüləri 1x0.5x15mm olan nümunələrdən istifadə olunmuş, ölçmələr müxtəlif temperaturlarda kristalın seçilmiş müxtəlif hissələrində aparılmışdır. Kristal istilik izolyatoru vasitəsilə örtülərək ölçmələr zamanı temperatur sabit saxlanılmışdır. Nümunənin temperatur lehimi kristal səthinə toxunan termocüt vasitəsilə ölçülmüşdür. Temperatur ölçmələrinin xətası 100K-də ~0.5K olmuşdur.



Şəkil 1.

Təcrübə zamanı okulyar toru vasitəsilə kristalda 1mm uzunluqlu hissə ayrılaraq və temperatur $T_1=T_0+\Delta T_1$-ə qaldırılmışdır. Burada T_0- II və III modifikasiya kristalları arasında tarazlıq temperaturu, ΔT_1 isə temperatur yubanmasıdır. $Rb_{0,95}Cs_{0,05}NO_3$ kristallar üçün II və III modifikasiyalar arasında tarazlıq temperaturu T_0=550±1 K-dir. Kristalda III→II çevrilməsinə sürəti ölçüldükdən sonra temperaturu $T_2=T_0+\Delta T_2$-yə qaldırılmışdır, haradakı $\Delta T_2>\Delta T_1$-dir. Yenidən III→II çevrilmənin sürəti ölçülmüş və bu qaydada proses davam etdirilmişdir. Beləliklə, ardıcıl olaraq kristalın eyni üzünün böyümə sürətini temperaturdan asılı olaraq ölçülmüşdür. Dörd kristalda aparılmış ölçmələrin nəticələri ən kiçik kvadratlar metodu ilə işlənərək III→II polimorf çevrilməsi zamanı

II-modifikasiya kristalının böyümə sürətinin temperaturdan $\upsilon=(-0.375\Delta T + 0.465\Delta T^2 - 0.0019\Delta T^3)\cdot 10^{-2}$sm/san funksional asılılığı müəyyən edilmişdir. Burada, irəlidə qeyd etdiyimiz kimi $\Delta T=T_{çev}-T_0$-dir. $T_{çev}$- polimorf çevrilmə temperaturu, T_0- tarazlıq temperaturudur.

Təcrübi nəticələr cədvəl 1-də verilmişdir. Qrafikdən görünür empirik düsturdan və təcrübədən alınan nəticələr bir-biri ilə kifayət qədər yaxşı uzlaşır.

Şəkil 1-də isə II-modifikasiya kristalının böyümə sürətinin temperatur asılılığı üçün təcrübədən və empirik düsturdan alınan nəticələrin qrafiki verilmişdir.

Cədvəl 1.

$Rb_{0,95}Cs_{0,05}NO_3$ kristallarında III→II çevrilməsi zamanı II-modifikasiya kristalının böyümə sürətinin temperatur asılılığı üçün alınan təcrübi nəticələr.

ΔT, K	$\frac{1}{T_0\Delta T}\cdot 10^{-4}\,K^{-2}$	$\bar{\upsilon}_{təc}$ x10^{-2} sm/san	$\bar{\upsilon}_{emp}$ x10^{-2} sm/san	l$n\upsilon$
3	6.06	2.95	3.008	-3.503
4	4.5	4.36	5.818	-2.844
5	3.6	10.8	9.512	-2.352
6	3.03	13.58	14.079	-1.960
7	2.59	21.32	19.508	-1.634
8	2.27	24.48	25.787	-1.355
9	2.02	30.7	32.904	-1.111
10	1.8	41.64	40.85	-0.845

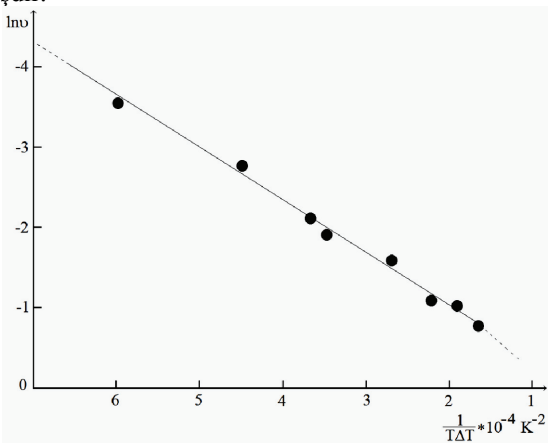
Cədvəl 1-dən görünür ki, ΔT artdıqca $Rb_{0,95}Cs_{0,05}NO_3$ kristallarında III→II polimorf çevrilmənin sürəti də böyüyür. Eyni zamanda tədqiq olunan bərk məhlulda bu sürət təmiz rubidium nitratdakından böyükdür. Belə ki, $RbNO_3$-də ΔT=8K-də $\upsilon = 5.215\ \frac{sm}{san}$ olduğu halda [8] $Rb_{0,95}Cs_{0,05}NO_3$-də bu sürət $\upsilon = 24.48\ \frac{sm}{san}$, yəni ~5 dəfə böyük olmuşdur. Buradan belə nəticəyə gəlmək olar ki, $RbNO_3$-də Rb^{1+} ionlarının Cs^{1+} ionları ilə qismən əvəz olunması III→II çevrilməsinin sürətinin artmasına səbəb olur.

Təcrübi nəticələr Folmerin maye fazadan ikiölçülü rüşeymli böyümə üçün verdiyi düsturla yaxşı uzlaşır [17]:

$$\upsilon = k_1 \exp(-\frac{k_2}{T_0}) \exp(-\frac{k_3}{T_0 \Delta T})$$

Bu düsturu polimorf çevrilmə zamanı kristal böyüməsinə tətbiq etdikdə k_2- molekulların ana kristaldan yeni böyüyən kristal səthinə keçməsi üçün lazım olan enerji həddini nəzərə alan sabit olub $k_2 = \frac{E}{R}$ -dir. Burada E-1mola düşən aktivləşmə enerjisi, R- universal qaz sabitidir. T_0- modifikasiyalar arasında tarazlıq temperaturu, ΔT- temperatur yubanması olacaqdır. k_1=Bvd, burada v-molekulların rəqs tezliyi, d-atomlararası məsafə, B- ana kristaldan böyüyən kristal səthinə keçən molekulların sayı, k_3- kristalın ikiölçülü rüşeyminin yaranmasına sərf olunan enerjidir.

Şəkil 2-də $ln\upsilon$-nin $\frac{1}{T_0 \Delta T}$ -dən asılılığı verilmişdir. Qrafikdən göründüyü kimi bu asılılıq xəttidir. Yəni təcrübi nəticələr bir düz xətt üzərindədir. Qrafikdən k_3=6122dər^2 və k_2=15011dər təyin edilərək $Rb_{0,95}Cs_{0,05}NO_3$ kristallarında III→II polimorf çevrilmənin aktivləşmə enerjisi hesablanmış və $E = 124.7\ \frac{kC}{mol}$ alınmışdır.



Şəkil 2.

Müqayisə üçün qeyd edək ki, rubidium nitratda III→II çevrilmənin aktivləşmə enerjisi $E = 114.38\ \frac{kC}{mol}$ -dur. Deməli rubidium nitratda Rb^{1+} ionları ilə qismən izomorf əvəzedilməsi III→II polimorf çevrilmənin aktivləşmə enerjisinin böyüməsinə səbəb olmuşdur.

[1] *R.N.Brown, A.C.Mclaren*. Acta Cryst., 15, 977, 1962.

[2] *R.N.Brown, A.C.Mclaren.* Proc.Roy.Soc. A266, 239, 1962.

[3] *U. Korhonen.* Ann. Acad. Sci. Fennical, A1, 37, 1951.

[4] *L.Pauling, J.Sherman.* Z.Krist. Kristalgeom, 84, 213, 1933.

[5] *C.Finback, O.Hassel.* Z.Phyzik. 5, 460, 1937.

[6] *U.Korhonen.* Ann. Acad. Sci. Fennical., A1, 150, 1953.

[7] *В.И Насиров., Ч.М.Алекперов, Ф.Г.Магерамова*. Изв.Пед.Унив. 1995, Т.1-2, с.70.

[8] *Ч.М. Алекперов, В.И. Насиров, Ф.Г. Магеррамова, Ю.Г. Асадов*. Препринт №4, ИФАН Азербайджана, 1990, с.38.
[9] *B.Cleaver, J.F.Williams*. J.Phys.Chem. Sol., 29, 877, 1968.
[10] *E.S.Schlemper, W.C.Hamilton.* J. Phys.Chem. Sol., 45, 4498, 1966.
[11] *J.Lin, C.Duan, M. Ossowski, W. Mei, R. Smith, J. Hardy.* J.Sol.State Chem.2001,v.60, №1,p.222
[12] *E.A.Secco, R.A. Secco.* J.Phys and Chem. of Solids 2002, v.63, p.433.
[13] *M. Shamsuzzohe, B.W. Lucas*. Canad. J. Chem., 1988, v.66, p.819.
[14] *А.Ф.Хазиева, Ю.Г.Асадов, В.И.Насиров.* Докл. НАН Азерб., 65,№2, 66, 2009
[15] *В.И.Насиров, А.Ф.Хазиева, Ю.Г.Асадов.* Изв. НАН Азерб. 29, №5, 157, 2009
[16] *Ю.Г.Асадов, В.И.Насиров.* Изв. РАН Кристаллография, 5, 991, 1972
[17] *M.Volmer.* Kinetik der phasen, Drezden and Leipsig, v.3, p.38, 1939.

В.И.Насиров, А.Ф.Хазиева, Ю.Г.Асадов, Р.Дж.Алыева

КИНЕТИКА III→II ПОЛИМОРФНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ $Rb_{0,95}Cs_{0,05}NO_3$.

Методом оптической микроскопии измерена скорость роста кристаллов II-модификации от температуры при превращении III→II в монокристаллах $Rb_{0,95}Cs_{0,05}NO_3$. Показано, что скорость роста II-модификации в зависимости от температуры при превращении III→II описывается эмпирической формулой $\upsilon=(-0{,}375\Delta T+0{,}465\Delta T^2-0{,}0019\Delta T^3)\cdot 10^{-2}$ см/сек. Вычислена энергия активации процесса III→II превращение, которая равна E=124.7кДж/мол.

V.I.Nasirov, A.F.Hazieva, Yu.G.Asadov, R.C.Alieva

KINETICS OF THE POLYMORPHIC III→II TRANSITION IN $Rb_{0,95}Cs_{0,05}NO_3$ SINGLE CRYSTALS

The growth rate of the II-modification optical microcopy have been measured as a function of the temperature during the III→II transition in $Rb_{0,95}Cs_{0,05}NO_3$ single crystals. It was found that the growth rate of the II-modification during the III→II transition is described by the empirical equation: $\upsilon=(-0{,}375\Delta T+0{,}465\Delta T^2-0{,}0019\Delta T^3)\cdot 10^{-2}$sm/sec. Calculated activation energy for the III→II transition, which is equal.

Qəbul olunma tarixi:18.05.2011

SAMUX RAYONUNDAN GÖTÜRÜLMÜŞ NEFT NÜMUNƏSİNİN REOLOJİ VƏ TERMİK XASSƏLƏRİ

E.A. MƏMMƏDOV, B.G. PAŞAYEV*, M.A. HÜSEYNOV, İ.E. QƏDİMQULUYEV
Azərbaycan Texniki Universitetinin
"Neft və neft məhsullarının istilik-fiziki xassələrinin tədqiqi" E.T.L.
**Bakı Dövlət Universitetinin Fizika Problemləri İnstitutu*
Neftoil.az@rambler.ru

İşdə Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin normal atmosfer təzyiqində müxtəlif gərginlik və temperaturlarda özlülük əmsalı və müxtəlif temperaturlarda sıxlığı təcrübi təyin edilmişdir. Təcrübi nəticələr əsasında özlü axının aktivləşmə parametrləri və istidən genişlənmə əmsalı hesablanmış, bu parametrlərin temperatur asılılıqlarında müşahidə olunan qanunauyğunluqlar müəyyən edilmişdir.

Açar sözlər: Neft, özlülük, özlü axının aktivləşmə parametrləri
PACS: 89.30.Aj, 82.60.Lf, 66.20.Ej, 06.30.Dr

Müasir dövrdə dünyanın qlobal problemlərindən biri də enerji resurslarından ekoloji və iqtisadi səmərəli istifadə etmək yollarının öyrənilməsidir. Dünyada maye yanacaqların istehsalına olan tələbatlar getdikcə artır. Bu baxımdan neft ölkələri sırasına daxil olan respublikamızın müxtəlif regionlarında tapılan neftin fiziki-kimyəvi xassələrinin tədqiqi olduqca zəruridir [1].

İşdə qarşıya qoyulan məqsəd normal atmosfer təzyiqində Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin müxtəlif gərginlik və temperaturlarda özlülük əmsalını və müxtəlif temperaturlarda sıxlığını təcrübi təyin etmək, təcrübi nəticələr əsasında özlü axının aktivləşmə parametrlərini ($\Delta G_\eta^{\neq}$, $\Delta H_\eta^{\neq}$, $\Delta S_\eta^{\neq}$) və istidən genişlənmə əmsalını (α_P) təyin etmək, bu parametrlərin temperatur asılılıqlarında müşahidə olunan qanunauyğunluqları müəyyənləşdirmək olmuşdur.

Mayelərin özlülüyü, laminar axın prosesində laylararası molekulların qarşılıqlı təsirləri nəticəsində bir layının qonşu layın axmasına göstərdiyi müqaviməti xarakterizə edir. Mayelərin özlülüyü mayeni təşkil edən molekulların quruluşundan və kimyəvi tərkibindən asılıdır. Bu səbəbdən neft və neft məhsullarının özlülük əmsalının tədqiqi olduqca vacibdir. İşdə özlülük əmsalı fırlanma viskozimetri ilə ölçülmüşdür.

İstifadə olunan fırlanma viskozimetri R_1 və R_2 radiusa malik h hündürlüklü iki koaksial silindrdən ibarətdir. Maye halında olan neft nümunəsi bu silindrlərin arasında yerləşdirilir. Xarici silindr fırlandıqda sürüşmə deformasiyası alınır. Deformasiyanın sürəti olaraq

$$\dot{\gamma} = \frac{d\gamma}{dt} = \frac{d}{dt}\frac{\varphi R_1}{R_2 - R_1} \qquad (1)$$

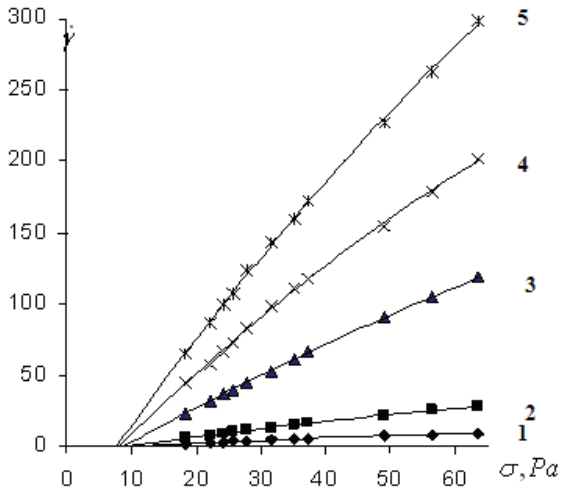
kəmiyyəti götürülür, φ- xarici silindrin dönmə bucağıdır.

Fırlanmaya səbəb olan mexaniki gərginlik (σ) diskret yüklər vasitəsi ilə yaradılır və

$$\sigma = \frac{mg}{2\pi R_1 h} \qquad (2)$$

düsturu ilə təyin olunur. m- yükün kütləsi, g- sərbəstdüşmə təcilidir.

İşdə qeyd olunan metodun köməyi ilə Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin bəzi reoloji xassələri–axının baş verdiyi kritik gərginlik, həmçinin plastik və zahiri özlülüklər təyin edilmişdir. Bu kəmiyyətlərin qiymətləri neftin axın əyrisindən alınır (şəkil 1). Qeyd edək ki, axın əyrisi dedikdə sürüşmə deformasiyasının sürətinin neftə tədbiq olunan mexaniki gərginlikdən asılılığı - $\dot{\gamma}(\sigma)$ nəzərdə tutulur.



Şəkil 1. Normal atmosfer təzyiqində Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin müxtəlif temperaturlarda axın əyrisi 1-293,15 K, 2-303,15 K, 3-313,15 K, 4-323,15 K, 5-333,15 K

Axın əyrisinin təhlili göstərir ki:

1) axın astana xarakteri daşıyır, yəni tətbiq olunan gərginliyin müəyyən bir qiymətindən sonra neft axmağa başlayır;

2) axın əyrisi müəyyən bucaq əmsalına malik olan düz xətdən ibarətdir: yəni neftə Bingham «bərk cismi» kimi baxmaq olar. Xatırladaq ki, Binqam mayesinin axın əyrisi

$$\sigma = \eta_p \dot{\gamma} + \sigma_0 \qquad (3)$$

tənliyi ilə təsvir olunur. Burada σ_0 neftin axmasının astana gərginliyi (neftin qırılma gərginliyi), η_p isə plastik özlülük adlanır.

Cədvəl 1-də normal atmosfer təzyiqində Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin müxtəlif temperaturlarda astana gərginliyi (σ_0) və 18,39 Pa gərginlikdə plastik özlülüyü (η_p) verilmişdir.

Cədvəl 1

Normal atmosfer təzyiqində Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin müxtəlif temperaturlarda astana gərginliyi (σ_0) və 18,39 Pa gərginlikdə plastik özlülüyü (η_p)

T, K	293.15 K	303.15 K	313.15 K	323.15 K	333.15 K
σ_0, Pa	9,91	9,06	8,78	8,23	7,59
η_p, mPa·san	4,807	1,586	0,408	0,229	0,167

Cədvəl 1, və şəkil 1-dən görünür ki, σ_0 temperaturun artması ilə azalır. Yəni temperatur artdıqca σ_0 sıfıra yaxınlaşır ($\sigma_0 \to 0$). Bunu onunla izah etmək olar ki, yuxarı temperaturlarda tədqiq etdiyimiz neft özünü Binqam mayesi kimi yox Nyuton mayesi kimi aparacaq.

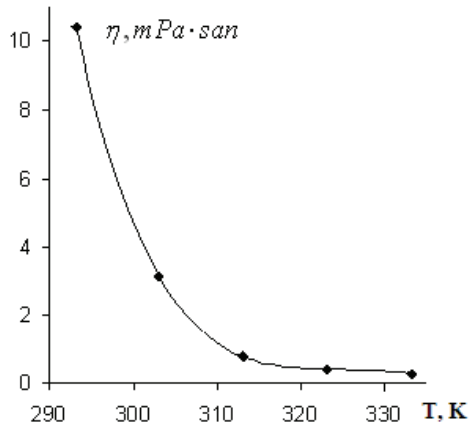
$$\eta = \frac{\sigma}{\dot{\gamma}} \qquad (4)$$

nisbəti isə zahiri özlülük və ya stuktur özlülüyü adlanır. Cədvəl 2-də Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin müxtəlif temperatur və gərginliklərdə struktur özlülüyünün qiymətləri verilmişdir.

Cədvəl 2

Normal atmosfer təzyiqində Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin müxtəlif gərginlik və temperaturlarda özlülüyü (η, mPa·san).

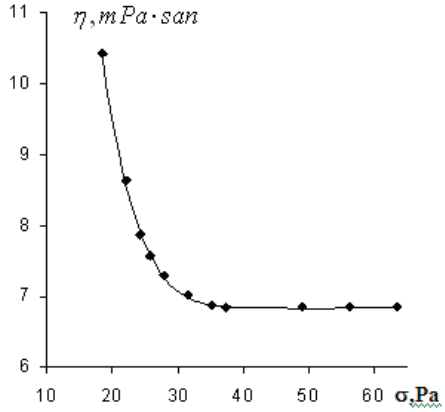
σ, Pa	293.15 K	303.15 K	313.15 K	323.15 K	333.15 K
18,39	10,423	3,127	0,782	0,414	0,285
22,01	8,646	2,785	0,693	0,382	0,253
24,24	7,869	2,667	0,663	0,364	0,242
25,64	7,564	2,564	0,642	0,353	0,240
27,87	7,290	2,480	0,623	0,337	0,226
31,49	7,022	2,362	0,598	0,321	0,220
35,11	6,873	2,282	0,571	0,318	0,219
37,34	6,845	2,259	0,560	0,317	0,217
49,04	6,843	2,256	0,544	0,316	0,216
56,29	6,842	2,254	0,540	0,315	0,214
63,53	6,841	2,252	0,537	0,315	0,213



Şəkil 2. Normal atmosfer təzyiqində Samux payonundan götürülmüş neft nümunəsinin 18,39 Pa gərginlikdə struktur özlülüyünün temperaturdan asılılığı.

Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin struktur özlülüyünün 18,39 Pa gərginlikdə temperaturdan asılılığı şəkil 2-də, 293,15 K temperaturda gərginlikdən asılılığı isə şəkil 3-də göstərilmişdir.

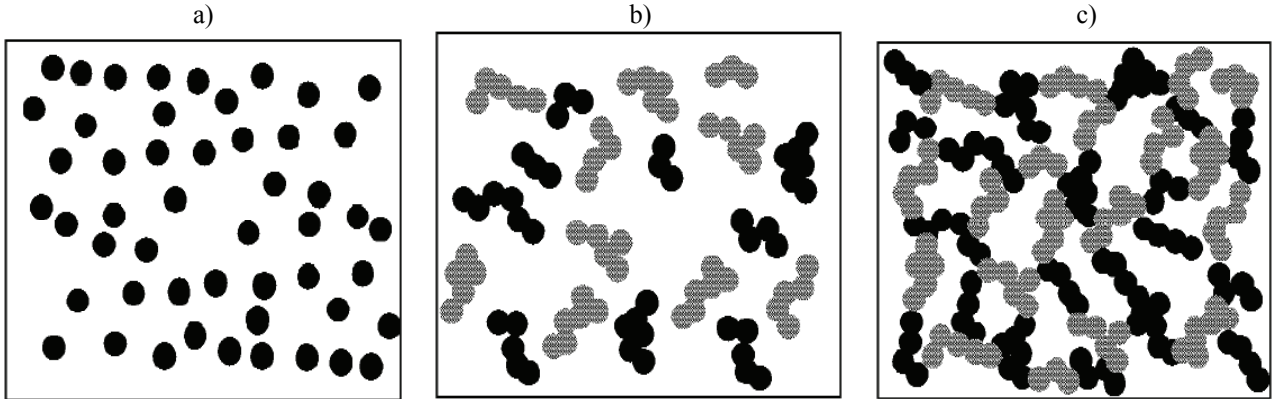
Gözlənildiyi kimi gərginlik artdıqca özlülük azalır (axın asanlaşır) və böyük gərginliklərdə özlülüyün qiyməti sabit bir qiymətə yaxınlaşır. Özlülüyün bu qiyməti ən kiçik Nyuton özlülüyü (η_∞) adlanır. Özlü mayelərdə müşahidə olunan ən böyük Nyuton özlülüyü bizim qrafikdə görünmür, çünki σ_0-dan kiçik gərginliklərdə axın olmadığından özlülüyü ölçmək mümkün deyil.



Şəkil 3. Normal atmosfer təzyiqində Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin 293,15 K temperaturda struktur özlülüyünün gərginlikdən asılılığı.

Alınan nəticələri izah etmək üçün neftə kolloid sistem kimi baxaq. Kiçik konsentrasiyalarda neftin tərkibin-

dəki kolloid hissəciklər bir-birindən uzaq məsafələrdə yerləşdiyindən zəif qarşılıqlı təsirdə olurlar (şəkil 4 **a)**). Konsentrasiyanın artması ilə bu hissəciklər arasındakı məsafə kiçilir və onlar arasındakı zəif qarşılıqlı təsir hissəciklərin birləşərək assosiatlar yaratmasına səbəb olur (şəkil 4 b)). Daha böyük konsentrasiyalarda assosiatlar birbirinə o qədər yaxınlaşır ki, öz aralarında birləşərək vahid fəza toru əmələ gətirir (şəkil 4 c)) [2].



Şəkil 4. Kolloid sistemin hissəciklərinin konsentrasiyasından asılı olaraq sistemdə mövcud olan müxtəlif mikrostrukturlar

Neftin dönməyən deformasiyası (axması) ona tədbiq olunan gərginliyin qiyməti müəyyən kritik həddi (σ_0) aşdıqda qeyd olunan struktur elementlərinin bir-birinə nəzərən dönməyən yerdəyişməsi, yəni fəza torunun qismən və ya tam dağılması ilə izah olunur.

Mayelərin özlülüyü kimi sıxlığı da mayeni təşkil edən molekulların quruluşundan və kimyəvi tərkibindən asılıdır. Bu səbəbdən neft və neft məhsullarının sıxlığının da tədqiqi olduqca vacibdir. İşdə neftin sıxlığı piknometr ilə ölçülmüşdür.

Cədvəl 2

Normal atmosfer təzyiqində Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin müxtəlif temperaturlarda sıxlığı.

T, K	293.15	298.15	303.15	308.15	313.15	318.15	323.15	328.15	333.15
ρ, $\frac{kg}{m^3}$	1000.1	995.3	989.5	984.1	978.4	972.6	966.8	960.2	953.9

İşdə təcrübənin xətası özlülülük əmsalı (η) üçün 1-2%, sıxlıq (ρ) üçün isə 0.05-0.07% olmuşdur.

XX əsrin axırlarından [3, 4] məlum olmuşdur ki, özlülüyün

$$\eta = \eta_0 \exp\left(\frac{\Delta G_\eta^{\neq}}{RT}\right) = \eta_0 \exp\left(\frac{\Delta H_\eta^{\neq} - T\Delta S_\eta^{\neq}}{RT}\right) \qquad (5)$$

düsturuna daxil olan və özlü axının aktivləşmə parametrləri adlanan $\Delta G_\eta^{\neq}$, $\Delta H_\eta^{\neq}$ və $\Delta S_\eta^{\neq}$ kəmiyyətlərinin hesablanması və alınan nəticələrin təhlili mayenin (və ya məhlulun) strukturu haqqında informasiya almağa imkan verir. Özlü axının aktivləşmə parametrləri hər hansı xarici təsir (temperatur, təzyiq, konsentrasiya və s.) nəticəsində mayedə yaranan enerji və struktur dəyişmələrini müəyyənləşdirməyə imkan verir. Özlü axın prosesini xarakterizə edən aktivləşmə parametrləri mayenin axın zamanı (G_a, H_a, S_a) və ilkin sükunət haldakı (G_s, H_s, S_s) uyğun termodinamik parametrlərin fərqinə bərabərdir.

$$\begin{aligned} \Delta G_\eta^{\neq} &= G_a - G_s \\ \Delta H_\eta^{\neq} &= H_a - H_s \\ \Delta S_\eta^{\neq} &= S_a - S_s \end{aligned} \qquad (6)$$

Qeyd edək ki, mayelərdə özlü axının aktivləşmə Gibbs enerjisi ($\Delta G_\eta^{\neq}$) verilmiş təzyiq və temperaturda axın zamanı görülən işdir. Özlü axının aktivləşmə entalpiyası ($\Delta H_\eta^{\neq}$) axın prosesini enerji baxımından xarakterizə edir, yəni $\Delta H_\eta^{\neq}$ verilmiş təzyiq və temperaturda suyu axın halına gətirmək üçün sərf olunan tam enerjidir. Özlü axının aktivləşmə entropiyası ($\Delta S_\eta^{\neq}$) mayedə yaranan struktur dəyişmələrini xarakterizə edir. Məlumdur ki, maye nə qədər strukturlu olsa entropiya (S_s) bir o qədər kiçik olur və axın zamanı dəyişməsi daha böyük olur və əksinə.

Normal atmosfer təzyiqində Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin özlü axınının aktivləşmə parametrlərinin müxtəlif gərginlik və temperaturlarda qiymətləri cədvəl 3-də, 18.7 Pa gərginlikgə temperaturdan asılılıqları 1-3 saylı şəkillərdə, istidən genişlənmə əmsalının temperaturdan asılılığı isə cədvəl 4 və şəkil 4-də göstərilmişdir. Özlü axınının aktivləşmə parametrlərinin və istidən genişlənmə əmsalının hesablanması metodları [5] işində verilmişdir.

Cədvəl 3

Müxtəlif gərginlik və temperaturlarda Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin özlü axının aktivləşmə parametrləri

T, K	293.15 K	303.15 K	313.15 K	323.15 K	333.15 K
$\Delta G_{\eta}^{\neq}, \frac{kC}{mol}$					
18,39	18,77	16,40	13,37	12,12	11,50
22,01	18,31	16,11	13,06	11,90	11,17
24,24	18,09	16,00	12,94	11,77	11,05
25,64	17,99	15,90	12,86	11,69	11,02
27,87	17,90	15,82	12,78	11,57	10,85
31,49	17,81	15,70	12,67	11,44	10,79
35,11	17,76	15,61	12,55	11,41	10,77
37,34	17,75	15,59	12,50	11,41	10,74
49,04	17,74	15,58	12,43	11,40	10,73
56,29	17,74	15,58	12,41	11,39	10,70
63,53	17,74	15,58	12,39	11,38	10,69
$\Delta H_{\eta}^{\neq}, \frac{kC}{mol}$					
18,39	120,05	94,95	71,45	49,40	28,74
22,01	119,32	94,34	70,99	49,10	28,39
24,24	118,80	93,97	70,78	48,90	28,23
25,64	118,50	93,63	70,52	48,71	28,17
27,87	118,07	93,35	70,31	48,56	27,97
31,49	117,75	93,00	69,99	48,32	27,86
35,11	117,37	92,75	69,76	48,20	27,84
37,34	117,17	92,52	69,57	48,01	27,75
49,04	116,62	92,05	69,24	47,74	27,67
56,29	116,26	91,92	69,08	47,68	27,59
63,53	116,06	91,75	68,99	47,63	27,56
$\Delta S_{\eta}^{\neq}, \frac{C}{K \cdot mol}$					
18,39	345,5	259,1	185,5	115,4	51,8
22,01	344,6	258,1	185,0	115,1	51,7
24,24	343,6	257,2	184,7	114,9	51,6
25,64	342,9	256,4	184,1	114,6	51,5
27,87	341,7	255,7	183,7	114,5	51,4
31,49	340,9	255,0	183,0	114,1	51,3
35,11	339,8	254,5	182,7	113,8	51,2
37,34	339,2	253,8	182,3	113,3	51,1
49,04	337,3	252,3	181,4	112,5	50,9
56,29	336,1	251,8	181,0	112,3	50,7
63,53	335,4	251,3	180,7	112,2	50,6

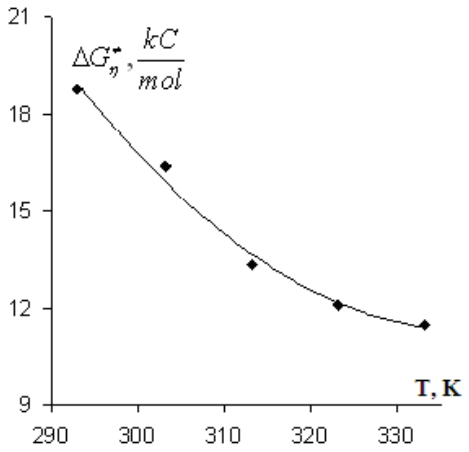
Cədvəl 4

Normal atmosfer təzyiqində Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin müxtəlif temperaturlarda istidən genişlənmə əmsalı.

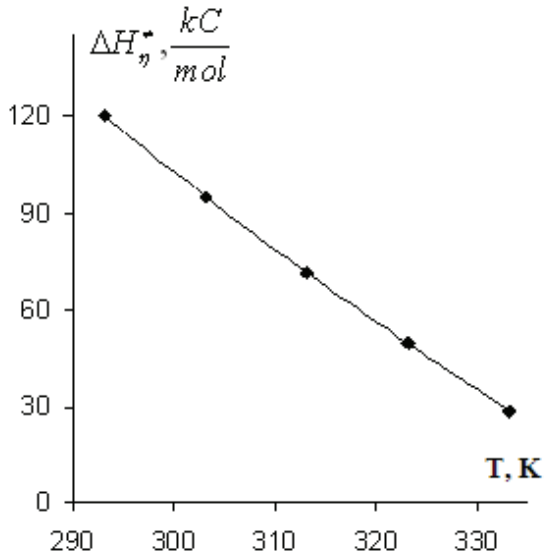
T, K	293.15	298.15	303.15	308.15	313.15	318.15	323.15	328.15	333.15
$\alpha_P \cdot 10^3, K^{-1}$	1,030	1,062	1,097	1,136	1,177	1,222	1,270	1,322	1,377

Qeyd edək ki, müxtəlif gərginliklərdə özlü axının aktivləşmə parametrlərinin temperaturdan asılılığı eyni xarakterə malik olduğundan işdə yalnız 18,39 Pa gərginliyə uyğun asılılıqlar verilmişdir. Cədvəl 3 və şəkil 5, 6, 7-dən göründüyü kimi, normal atmosfer təzyiqində Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsi üçün özlü axının aktivləşmə parametrləri temperaturun artması ilə azalırlar. Temperatur artdıqca neft molekullarının istilik hərəkəti artır, molekullar arsındakı rabitə zəifləyir, neftin axını asanlaşır. Bütün bunlar yekunda temperaturun artması ilə $\Delta G_{\eta}^{\neq}$-nin qiymətinin azalmasına səbəb olur. Temperaturun artması ilə neftin sükunət halının entalpiya-

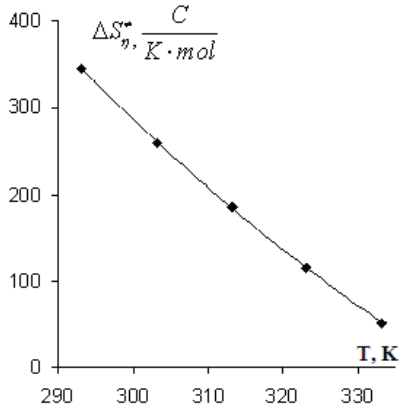
sı (H_S) və entropiyası (S_S) artır. $\Delta H_\eta^{\neq}>0$, $\Delta S_\eta^{\neq}>0$ olması və temperatur artdıqca onların azalması onu göstərir ki, bütün temperaturlarda $H_a>H_s$ və $S_a>S_s$ şərtləri ödənir, lakin temperaturun artması ilə onların fərqi azalır.



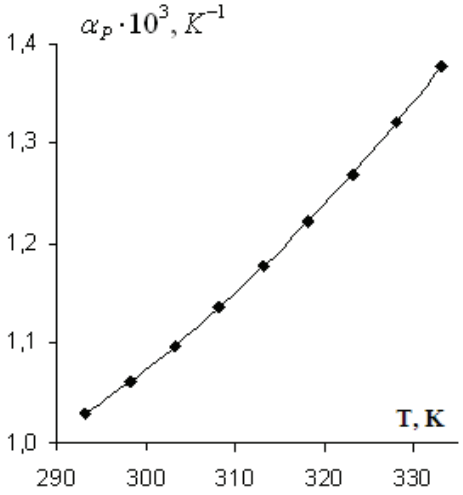
Şəkil 5. Normal atmosfer təzyiqində Samux payonundan götürülmüş neft nümunəsinin 18,39 Pa gərginliyə özlü axının aktivləşmə entalpiyasının temperaturdan asılılığı.



Şəkil 6. Normal atmosfer təzyiqində Samux payonundan götürülmüş neft nümunəsinin 18,39 Pa gərginliyə özlü axının aktivləşmə Gibbs enerjisinin temperadan asılılığı.



Şəkil 7. Normal atmosfer təzyiqində Samux payonundan götürülmüş neft nümunəsinin 18,39 Pa gərginliyə özlü axının aktivləşmə entropiyasının temperaturdan asılılığı.



Şəkil 8. Normal atmosfer təzyiqində Samux payonundan götürülmüş neft nümunəsinin istidən genişlənmə əmsalının temperaturdan asılılığı.

Cədvəl 4 və şəkil 8-dən görünür ki, normal atmosfer təzyiqində Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin istidən genişlənmə əmsalı (α_p) temperaturun artması ilə artır. Molekulyar səviyyədə bunu onunla izah etmək olar ki, temperaturun artması ilə neft molekullarının lokal nizamlı struktur yaratmaq meyli azalır. Doğrudan da təcrübə göstərir ki, temperaturun artması ilə neftin sıxlığı azalır (cədvəl 2), yəni neft molekulları arasındakı məsafə artır, nəticədə α_p temperaturun artması ilə artır.

[1] *E.A.Məmmədov, M.A. Hüseynov.* Maye yanacaqların istilik-fiziki xassələri. Monoqrafiya, Bakı-2004.

[2] *Saad A. Khan, Joseph R.Royer, and Srinivasa R.Raghavan.* Reology: Tools and Methods. Department of Chemical Engineering North Carolina State University. 1997. p.31-46.

[3] *Я.И. Френкель.* Кинетическая теория жидкостей. Издательство «Наука» Ленинградское отделение. Ленинград 1975, с.221-235.

[4] *С. Глесстон, К. Лейдлер, Г. Эйринг*. Теория абсолютных скоростей. М.: Изд-во иностр. лит., 1948. 600 с.

[5] *E.A. Məmmədov, M.A. Hüseynov, B.G. Paşayev, T.P. Musayev*. Lay suyunun sıxlığının və dinamik özlülük əmsalının təcrübi tədqiqi. Azərbaycan Texniki Universiteti, Fizika-Texnika, CİLD VIII (30), №2, 2009, s.6-10.

Э.А. Мамедов, Б.Г. Пашаев, М.А. Гусейнов, И.Э. Гадимгулиев

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ И ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕФТНЕГО ОБРАЗЕС, ВЗЯТОГО САМУХСКОГО РАЙОНА

В работе экспериментально определены коэффициент вязкости при различных температурах и напряжениях, а также плотность при разных температурах нефти, взятого из Самухского районе. На основе экспериментальных результатов вычислены активационные параметры вязкого течения и коэффициент теплового расширения. Определены закономерности, наблюдаемые температурных зависимостях этих параметров.

E.A. Mammadov, B.G. Pashayev, M.A. Huseynov, I.E. Qadimquliyev

REOLOGICAL AND THERMAL PROPORTIES OF OIL SAMPLE BROUGHT FROM SAMUKH DISTRICT

The viscosity coefficients of Samukh oil at various stresses and temperatures, as well as density at various temperatures and normal atmospheric pressure are experimentally determined. There were calculated the activation parameters of viscous flow and thermal expansion coefficient from these date. The regularities observed in temperature dependence of these parameters are established.

Qəbul olunma tarixi:23.05.2011

$TlIn_{1-x}DyS_2$ BƏRK MƏHLULLARININ ELEKTRİK KEÇİRİCİLİYİ

A.M. ƏHMƏDOVA, H.İ. ZEYNALOV, M.M. ZƏRBƏLİYEV[1]
R.L. MƏMMƏDOVA[2]
[1.] Sumqayıt Dövlət Universiteti Az – 5008, Sumqayıt şəh., 43 kv-l
[2.]AMEA akad. H.M. Abdullayev adına Fizika İnstitutu, Az-1143, Bakı, H.Cavid prospekti, 33.

$TlInS_2$-$TlDyS_2$ sistemi ərintilərinin elektrofiziki xassələri tədqiq edilmişdir. $TlInS_2$-$TlDyS_2$ sistemində 10 mol% həllolma oblastı müəyyən edilmişdir. Bərk məhlullar ilkin üçqat birləşmə $TlInS_2$ qəfəsi əsasında tetraqonal sinqoniyada kristallaşır. Tədqiq olunmuş bərk məhlulların elementar qəfəs parametrləri tərkibdə $TlDyS_2$-nin nisbi miqdarı artdıqca artır, qadağan olunmuş zonanın eni isə azalır. $TlInS_2$-$TlDyS_2$ sistemi bərk məhlullarında elektrik keçiriciliyinin və Holl əmsalının xarakteri müəyyən edilmişdir.

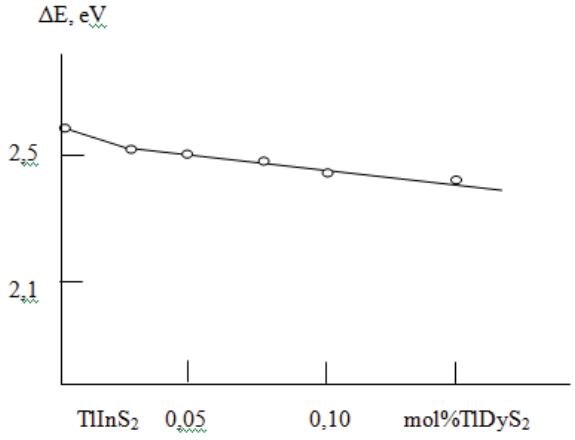
Açar sözlər: $TlInX_2$- (X-Se, Se, Te), bərk məhlul, elektrik keçiriciliyi.
UOT: 537.311.322

$TlInX_2$- (X-Se, Se, Te) tip üçqat yarımkeçirici birləşmələrinin çevirici xassəyə, yüksək tenzo- və fotohəssaslıq əmsallarına, yüksək ərimə temperaturuna, termiki cəhətdən möhkəmliyə malik olması bu tip yarımkeçiricilərin termo-elektrik xassələrinin tədqiqinə böyük maraq doğurur.

Ədəbiyyatda [1-4] göstərilmişdir ki, $TlInX_2$ və $TlLnX_2$ (Ln-Ce, Pr, Nd) birləşmələrinin qarşılıqlı təsiri nəticəsində yeni dördqat Tl_2InLnS_4 birləşmələri əmələ gəlir və $TlInX_2$ birləşməsi əsasında geniş həllolma oblastı müşahidə olunur.

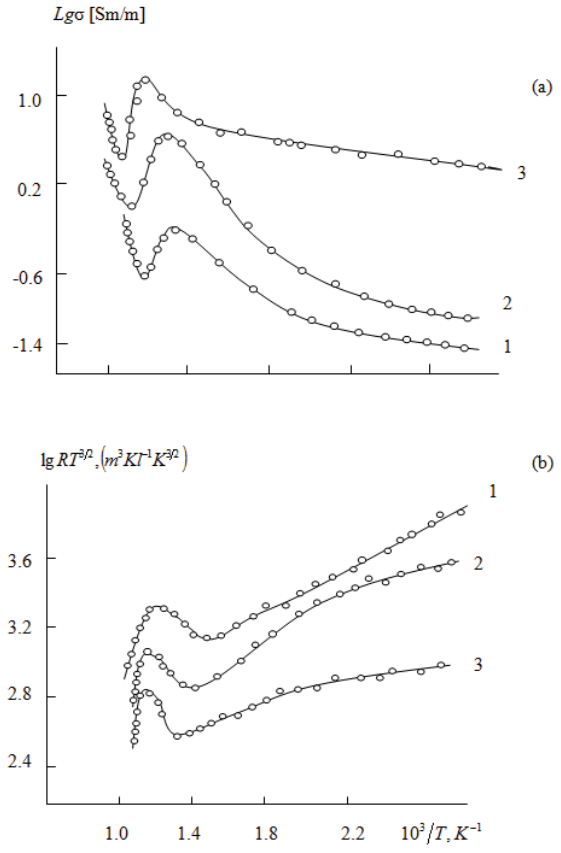
Təqdim olunan işdə $TlInS_2$-$TlDyS_2$ sistemi ərintilərinin bərk məhlullarının elektrofiziki xassələri tədqiq edilmişdir.

Ədəbiyyatdan [2-5] məlum olan metodika əsasında sintez yerinə yetirilmiş və müəyyən hallarda $TlInX_2$-$TlLnX_2$ sistemi ərintilərinin fiziki- kimyəvi, elektrofiziki və istilik fiziki xassələri öyrənilmişdir. İndiki işimizdə tədqiqat obyekti $TlIn_{0.98}Dy_{0.02}S_2$, $TlIn_{0.95}Dy_{0.05}S_2$, $TlIn_{0.90}Dy_{0.10}S_2$ bərk məhlullarıdır.



Şəkil 1. $TlIn_{1-x}Dy_xS_2$ bərk məhlullarında qadağan zonasının tərkibdən asılılığı.

$TlInS_2$-$TlDyS_2$ sistemi ərintilərinin sintezi 2 mərhələdə aparılmışdır. Birinci mərhələdə ilkin elementlər içərisində ~ 0,01Pa-dək vakuumadək havası çıxarılmış yüksək keyfiyyətli kvars ampulalara doldurularaq, qabaqcadan 1100 K temperaturadək qızdırılmış sobaya daxil edilir. Ampulanım bir ucu sobadan kənarda qalır və reaksiya bitənə qədər müntəzəm olaraq soyudulur. Bu şəraitdə ampulanın sobada saxlanma müddəti tədqiq olunan tərkibdən asılıdır. Disproziumun miqdarı artdıqca ampulanın sobada saxlanma müddəti 3 saatdan 4 saata qədər artır. Sonra sintez olunan maddə ampula ilə birlikdə sobaya daxil edilir və tədricən otaq temperaturuna qədər soyudulur. Sintezin ikinci mərhələsində maddə dolu ampula 1200-1300 K "tablama" temperaturda 48-60 saat soba daxilində saxlanılır. Bu rejimdə alınmış nümunələr özünəməxsus rəngdə, bircins və sıx formalaşmış şəkildə olunur.



Şəkil 2. $TlIn_{1-x}Dy_xS_2$ bərk məhlullarında elektrik keçiriciliyi (a) və Holl əmsalının (b) temperatur asılılığı Əyrilər: x=1-0,02, 2- 0,05, 3-0,10

$TlInS_2$-$TlDyS_2$ sistemi ərintilərinin rentgenofaza analizi RKD-57,3 kamerasında CuK_α – şüalanmasında Debay-Şerrer metodu ilə aparılmışdır. Rentgenoqramma-

nın analizi 0,01-0,05mm xəta ilə İZA-2 komparatoru vasitəsilə həyata keçirilmişdir. Xətlərin intensivliyi vizual olaraq onballı şkala ilə təyin olunmuşdur. Rentgenoqramın analizi nəticəsində müəyyən olundu ki, tədqiq olunan nümunələr hamısı tetroqonal sinqoniyada kristallaşırlar [4].

Tərkibdə indium atomlarını qismən disprozium atomları ilə əvəz etdikcə həll olma oblastında elementar qəfəs parametrləri (0-10 mol% $TlDyS_2$) Veqard qaydasına müvafiq additiv olaraq artır. Bu onunla əlaqədardır ki, $TlInS_2$ kristallik qəfəsində ion radiusu 0,81Å olan üçvalentli In atomlarını, ion radiusu daha böyük olan (0,908Å) Dy atomları əvəz edir [4,5].

$TlIn_{1-x}Dy_xS_2$ (x=0,02;0,05;0,10) bərk məhlullarının elektrik keçiriciliyinin (σ), Holl əmsalının (R_H) temperaturdan asılılığı tədqiq edilmişdir.

Bərk məhlulların $\lg\sigma=f(10^3/T)$ asılılığından yüksək temperatur oblastının meylinə əsasən qadağan olunmuş zonanın eni təyin edilmiş və onun tərkibdən asılılığı qurulmuşdur (şəkil 1). Göründüyü kimi, indium atomlarını qismən disprozium atomları ilə əvəz etdikcə qadağan olunmuş zonanın eni azalır. $TlInS_2$-$TlDyS_2$ sistemi ərintiləri bərk məhlullarında qadağan olunmuş zonanın eninin azalması və elementar qəfəs parametrlərinin böyüməsini belə izah etmək olar: $TlInS_2$-də valent zona əsas etibarı ilə kükürdün 3p səviyyəsi və qismən indiumun 5p5s səviyyəsi və talliumun 6p- səviyyəsi, keçirici zona isə indiumun – 5p5s səviyyəsi və talliumun 6p- səviyyəsi hesabına yaradılmışdır.

Indium atomlarının qismən disprozium atomları ilə əvəz olunmasında sonuncunun valent elektronları kollektivləşmiş hala keçir, bu isə qəfəsdə güclü elektron qarşılıqlı təsiri yaradaraq, onun deformasiyasına səbəb olur. Bununla əlaqədar olaraq $TlInS_2$-dən onun əsasında bərk məhlullara keçdikcə valent zonanın daha da yüksək enerji səviyyəsinə müəyyən yerdəyişməsi baş verir. Bu yerdəyişmə kükürdün 3p- səviyyəsinin disproziumun daha yüksək enerjili 4f- səviyyəsilə örtülməsinə gətirib çıxarır. Beləliklə, elementar qəfəs parametrləri artır, qadağan olunmuş zonanın eni isə kiçilir. Bütün bunların nəticəsi olaraq, $TlInS_2$-$TlDyS_2$ sisteminin bərk məhlullarının elektrik keçiriciliyinin və Holl əmsalının temperatur asılılığı mürəkkəb xarakterə malikdir. Şəkil 2-dən göründüyü kimi elektrik keçiriciliyi $TlIn_{1-x}Dy_xS_2$ (x=0,02; 0,05; 0,10) bərk məhlulları üçün uyğun olaraq ~710, 715, 770 K temperaturlarına kimi artmaqda davam edir. Temperaturun sonrakı artmasında σ azalır və minimum qiymət alaraq yenidən artır (məxsusi keçiricilik oblastı). Elektrik keçiriciliyinin bu cür mürəkkəb xarakteri aşqar səviyyələrdən olan keçidlərin həmin temperaturlarda artıq "tükənməsi" ilə əlaqədardır.

[1] *M.M.Зарбалиев.* Явление переноса заряда и тепла в системах $TlInSe_2(Se,Te_2)$ - $TlLnSe_2(Se_2,Te_2)$ Дисс.на соиск. уч. степ. докт. физ-мат.наук. Баку,2001,-284с.

[2] *H.İ.Zeynalov, S.C.Məmmədov, M.M.Qurbanov, A.M.Əhmədova.* $TlInS_2$-$TlDyS_2$ sistemi ərintilərinin elektrofiziki xassələri.AMİU. Materiallar fizikasının müasir problemlərinə həsr olunmuş II Respublika Elmi-praktiki konfransının materialları 2009 s.53-55.

[3] *M.M.Зарбалиев,Э.Г.Мамедов,А.М.Ахмедова, Г.И.Зейналов.* Теплопроводность твердых растворов $TlIn_{1-x}Dy_xTe_2$ Российская А.Н. Неорг.мат.2007 №12 с.1432.

[4] *M.M. Зарбалиев, Н.Ф. Гахраманов, А.М. Ахмедова, А.Б. Магеррамов*. Твердые растворы замещения в системе $TlInSe_2$ - $TlYbSe_2$, Te_2). Известия АН Азерб. Респуб.серия физ.-мат. и тех. наук. 2010 № 5 с. 149-155.

[5] *H.İ. Zeynalov* "$TlInS_2$-$TlDyS_2$ sistemi bərk məhlullarının elektrik keçiriciliyində anomaliya" III Respublika konfransının materialları BDU 2009 s.121-124.

A.M.Akhmedova, G.I.Zeynalov, M.M.Zarbaliev, R.L. Mammadova

THE ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF SOLID SOLUTION $TlIn_{1-x}Dy_xS_2$

İn this research work there have been shown the electrophisical properties of alloys $TlInS_2$-$TlDyS_2$. İn the system $TlInS_2$ – $TlDyS_2$ the solubility up to 10 mol% $TlDyS_2$ is found. Solid solutions become to crystallize in the tetragonal system on the base of compound triple $TlInS_2$. The unit cell parameters increase, while the bandgap of these alloys decreases linearly with increasing content $TlDyS_2$ in the samples. Established the nature of the electrical conductivity and Hall coefficient in the solid solutions.

А.М. Ахмедова, Г.И.Зейналов, М.М.Зарбалиев, Р.Л. Мамедова

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $TlIn_{1-x}Dy_xS_2$

Исследованы электрофизические свойства сплавов системы $TlInS_2$-$TlDyS_2$. Обнаружена область растворимости в системе $TlInS_2$-$TlDyS_2$ до 10 mol% $TlDyS_2$. Твердые растворы кристаллизуются в тетрагональной сингонии на основе исходного тройного соединения $TlInS_2$-. Параметры элементарной ячейки увеличиваются, а ширина запрещенной зоны указанных твердых растворов линейно уменьшается по мере роста относительного содержания $TlDyS_2$ в составе образцов. Установлены характер электропроводности и коэффициента Холла в твердых растворах.

Qəbul olunma tarixi: 23.05.2011

AQAR GELİNİN KALİUM HİDROKSİDİN DURU SULU MƏHLULUNDA İONLARIN HİDRATLAŞMASINA TƏSİRİ

E.Ə. MƏSİMOV, H.F. ABBASOV
Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri İnstitutunun
"Bioloji Systemlər Fizikası" şöbəsi
hakimabbasov@yahoo.com

İşdə KOH + su və aqar geli + KOH sistemlərinin sındırma əmsalının KOH-ın konsentrasiyasından asılılığı refraktometrik metodla tədqiq edilmişdir. Lorens- Lorens tənliyindən istifadə etməklə alınan nəticələr əsasında ionların hidratasiya ədədini təyin etməyə imkan verən model təklif olunmuşdur və aqar gelinin ionların hidratlaşmasına təsiri öyrənilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, aqar geli ionların hidratasya təbəqəsini dağılmaqdan qoruyur.

Key words: polarization, refractive index, water solution, hydration number polyarizasiya, sındırma əmsalı, sulu məhlul, hidrotasiya ədədi
PACS: 77.22.Ej, 64.75.Bc, 31.70.Dk, 61.20.Qg**.**

Məhlulların refraksiyası bir çox hallarda məhlulların strukturu barədə, məhlullardakı ionların solvatasiyası haqqında informasiya daşıyır. Optik tezliklərdə dipol və ionlar elektrik sahəsini izləyə bilmədiyindən mühitin polyarizasiyasında əsas rolu yalnız elektronlar oynayır və bu halda Lorens-Lorens tənliyi tətbiq olunur.

Optik tezliklərdə kalium hidroksidin sulu məhlulu üçün Lorens-Lorens tənliyini aşağıdakı kimi yazmaq olar [1-3]:

$$\frac{n^2-1}{n^2+2}=\frac{N_{su}\alpha_{su}}{3}+\frac{N_{K^+}\alpha^*_{K^+}}{3}+\frac{N_{OH^-}\alpha^*_{OH^-}}{3}+\frac{N_{KOH}\alpha_{KOH}}{3} \tag{1}$$

burada, n baxılan məhlulun sındırma əmsalı, α_{su}, α_{K^+}, α_{OH^-} və α_{KOH} uyğun olaraq, su molekullarının, K^+ və OH^- ionlarının və neytral KOH molekullarının polyarlaşma əmsalları, N_{su}, N_{K^+}, N_{OH^-}, N_{KOH} uyğun olaraq, məhlulun vahid həcmindəki sərbəst su molekullarının, K^+ və OH^- ionlarının və neytral KOH molekullarının sayıdır.

Bu tənliyin sağ tərəfində birinci həddi sərbəst su molekullarının, ikinci həddi məhlulda dissosiasiyaya uğramış K^+ ionlarının, üçüncü həddi OH^- ionlarının, dördüncü həddi dissosiasiyaya uğramamış neytral KOH molekullarının məhlulun polyarizasiyasına verdiyi payları əks etdirir.

KOH-ın dissosiasiya dərəcəsini β ilə işarə edərək K^+, OH^- ionlarının və KOH molekullarının məhlulun vahid həcmindəki sayını KOH-ın məhluldakı c konsentrasiyası ilə ifadə etmək olar:

$$N_{K^+}\approx N_{OH^-}=\frac{\beta c\rho N_A}{M_{KOH}}$$

və (2)

$$N_{KOH}=(1-\beta)\frac{c\rho N_A}{M_{KOH}}$$

Burada, ρ - məhlulun sıxlığı, N_A - Avaqadro sabiti, M_{KOH} - KOH-ın molyar kütləsidir. Təmiz su üçün (1) tənliyi aşağıdakı şəkli alır:

$$\frac{n_{su}^{\ 2}-1}{n_{su}^{\ 2}+2}=\frac{N^0_{su}\alpha_{su}}{3} \tag{3}$$

(2) və (3) düsturlarını (1) – də nəzərə alaq:

$$\frac{n^2-1}{n^2+2}=\frac{n_{su}^2-1}{n_{su}^2+2}+\frac{c\rho N_A}{3M_{KOH}}[\beta\alpha^*_{K^+}+\beta\alpha^*_{OH^-}+(1-\beta)\alpha_{KOH}] \tag{4}$$

Duru sulu məhlullarda KOH tam dissosiasiyaya uğradığından $\beta\approx 1$ götürmək olar və (4) aşağıdakı şəklə düşər:

$$\frac{n^2-1}{n^2+2}=\frac{n_{su}^2-1}{n_{su}^2+2}+\frac{c\rho N_A\alpha_{su}}{3M_{KOH}}\left(\frac{\alpha^*_{K^+}}{\alpha_{su}}+\frac{\alpha^*_{OH^-}}{\alpha_{su}}\right) \tag{5}$$

Birinci yaxınlaşmada hidratlaşmış ionun polyarlaşma əmsalını həmin ionun radiusunun kubu ilə mütənasib götürmək olar və hidratlaşmış ionun həcminin hidratlaşmamış ionun həcmi ilə hidrat təbəqəsinin həcminin cəminə bərabər olduğunu nəzərə alsaq:

$$V_h \approx V_i + hV_{su},\ \alpha^*_{K^+} \sim r^{*3}_{K^+} \approx r^3_{K^+} + h_1 r^3_{su},$$
$$\alpha^*_{OH^-} \sim r^{*3}_{OH^-} \approx r^3_{OH^-} + h_2 r^3_{su}, \alpha_{su} \sim r^3_{su} \qquad (6)$$

alarıq.

Burada V_h, V_i, V_{su} hidratlaşmış ionun, hidratlaşmamış ionun və su molekulunun həcmləri, h_1 və h_2 K^+ və OH^- ionlarının hidrat ədələri, r_{K^+}, r_{OH^-}, r_{su} hidratlaşmamış K^+ və OH^- ionlarının və su molekulunun radiuslarıdır, $r^*_{K^+}$, $r^*_{OH^-}$ hidratlaşmış K^+ və OH^- ionlarının radiuslarıdır. (6) düsturunu (5) – da nəzərə alaq:

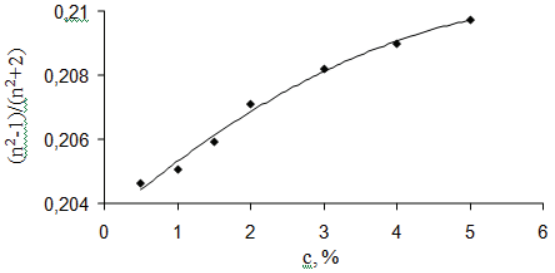
$$\frac{n^2-1}{n^2+2} = \frac{n_{su}^2-1}{n_{su}^2+2} + \frac{c\rho N_A \alpha_{su}}{3M_{KOH}}\left[\left(\frac{r_{K^+}}{r_{su}}\right)^3 + \left(\frac{r_{OH^-}}{r_{su}}\right)^3 + h_1 + h_2\right] \qquad (7)$$

(7) tənliyi əsasında $(n^2-1)/(n^2+2)$ nisbətinin c- dən asılılığından qrafikin $tg\phi$ bucaq əmsalına görə məhlulda KOH-ın müxtəlif konsentrasiyalarında K^+ və OH^- ionlarının hidrat ədədlərinin cəmini təyin etmək olar:

$$tg\phi = \frac{\rho N_A \alpha_{su}}{3M_{KOH}}\left[\left(\frac{r_{K^+}}{r_{su}}\right)^3 + \left(\frac{r_{OH^-}}{r_{su}}\right)^3 + h_1 + h_2\right] \qquad (8)$$

$$h_1 + h_2 = \frac{3M_{KOH} tg\phi}{\rho N_A \alpha_{su}} - \left(\frac{r_{K^+}}{r_{su}}\right)^3 - \left(\frac{r_{OH^-}}{r_{su}}\right)^3 \qquad (9)$$

Kalium hidroksidin duru sulu məhlullarının sındırma əmsallarının $0 \le c \le 5\%$ konsentrasiya intervalında KOH-ın konsentrasiyasından asılılığı refraktometrlə ölçülmüşdür. Alınan nəticələr $(n^2-1)/(n^2+2)$ -c koordinatlarında şəkil 1-də göstərilmişdir.



Şəkil 1. KOH + su sistemi üçün $(n^2-1)/(n^2+2)$ nisbətinin KOH –ın konsentrasiyasından asılılığı

Şəkildən göründüyü kimi KOH-ın müəyyən konsentrasiyasınadək ($c \approx 2\%$) bu asılılıq xətti xarakter daşıyır, bu konsentrasiyadan başlayaraq isə əyrinin meyli azalır. Bunu onunla izah etmək olar ki, kiçik konsentrasiyalarda ($c \approx 2\%$) kalium hidroksid ionlara tam dissosiasiya edir və bu ionların konsentrasiyaları az olduğundan onlar ideal qazda olduğu kimi qarşılıqlı təsirdə olmurlar. Buna görə də hidrat təbəqəsinin qalınlığı və bu hidratlaşmış ionların polyarlaşma əmsalları göstərilən konsentrasiyaya qədər sabit qalır və (8) – dən göründüyü kimi baxılan oblastda qrafikin bucaq əmsalı konsentrasiyadan asılı olmur. Konsentrasiyanın sonrakı artımında hidratlaşmış ionların radiusları c-dən asılı olaraq dəyişir: bu halda ionlar sıxlaşdığından onların bir-biri ilə qarşılıqlı təsiri güclənir, ionların hidrat təbəqələri dağılmağa başlayır, onların radiusları $r^*_{K^+}$, $r^*_{OH^-}$ azalır, şəkil (1)- də qrafikin meyli ($tg\phi$) azalır.

$c \approx 2\%$ konsentrasiyadan başlayaraq qarşılıqlı təsirin güclənməsi və sulu məhlulun strukturunun dəyişməsi kalium hidroksidin baxılan duru sulu məhlullarının alçaq tezlikli dielektrik spektroskopiyası metodu ilə apardığımız tədqiqat nəticəsində təsdiq edilmişdir [4,5].

(9) düsturuna daxil olan bir sıra parametrlərin ədəbiyyatdan [6-11] götürülmüş qiymətlərini nəzərə almaqla $r_{K^+} = 133\,pm, r_{OH^-} = 140\,pm, r_{su} = 140\,pm, \alpha_{su} = 1.45 \cdot 10^{-30} m^3$ şəkil 1 – dən qrafikin bucaq əmsallarına görə K^+ və OH^- ionlarının hidratasiya ədədlərinin cəmi KOH – ın müxtəlif konsentrasiyalarında təyin edilmişdir:

$c < 2\%$, $tg\phi = 0.1644$ konsentrasiya intervalında $h_{K^+} + h_{OH^-} \approx 29.81$;

$2\% < c < 3\%$, $tg\phi = 0.111$ konsentrasiya intervalında $h_{K^+} + h_{OH^-} \approx 19.57$;

$3\% < c < 4\%$, $tg\phi = 0.08$ konsentrasiya intervalında $h_{K^+} + h_{OH^-} \approx 13.59$;

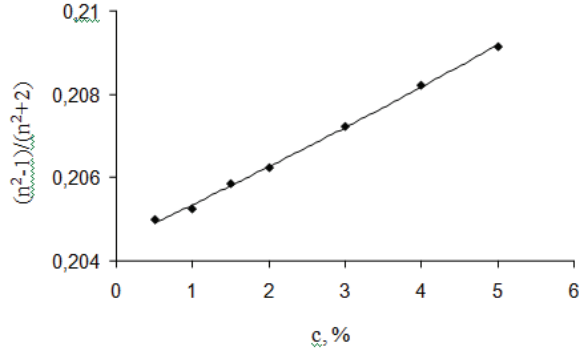
$4\% < c < 5\%$, $tg\phi = 0.0723$ konsentrasiya intervalında alınır $h_{K^+} + h_{OH^-} \approx 12.1$ $h_{K^+} + h_{OH^-} \approx 12.1$.

Aqar geli + KOH sistemi üçün Lorens-Lorens tənliyini yazsaq alarıq:

$$\frac{n^2-1}{n^2+2} = \frac{N_{su}\alpha_{su}}{3} + \frac{N_{K^+}\alpha^*_{K^+}}{3} + \frac{N_{OH^-}\alpha^*_{OH^-}}{3} + \frac{N_{KOH}\alpha_{KOH}}{3} + \frac{N_{aqar}\alpha_{aqar}}{3} \qquad (10)$$

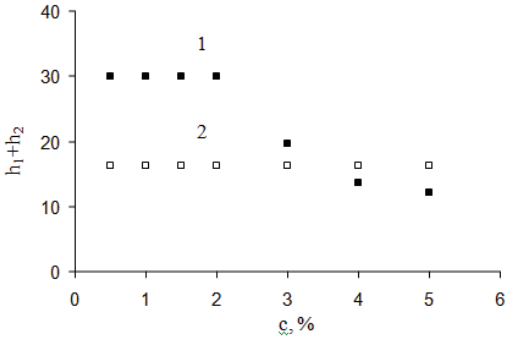
Burada tənliyin sağ tərəfində axırıncı həddi aqar makromolekullarının yaratdığı polyarizasiyanı xarakterizə edir və α_{aqar} aqar makromolekulunun polyarlaşma əmsalı, N_{aqar} məhlulun vahid həcmindəki aqar makromolekullarının sayıdır.

Aqar geli +KOH su sisteminin sındırma əmsallarının $0 \le c \le 5\%$ konsentrasiya intervalında KOH -ın konsentrasiyasından asılılığı refraktometrlə ölçülmüşdür. Alınan nəticələr $(n^2-1)/(n^2+2)$ - c koordinatlarında şəkil 2-də göstərilmişdir.



Şəkil 2. Aqar geli + KOH + su sistemi üçün $(n^2-1)/(n^2+2)$ nisbətinin KOH -ın konsentrasiyasından asılılığı

Şəkildən göründüyü kimi kalium hidroksidin sulu məhlulunda aqar gelinin (0,5%) iştirakı qrafikin bucaq əmsalının $0 \le c \le 5\%$ konsentrasiya intervalında KOH-ın konsentrasiyasından asılılığını aradan qaldırır. Bunu aqar geli torunun hidratlaşmış K^+ və OH^- ionlarını əhatə edərək konsentrasiya artdıqda belə onları dağılmaqdan qoruması ilə izah etmək olar. Bu halda şəkil 2-də qrafikin bucaq əmsalına görə hesablanmış cəm $h_{K^+} + h_{OH^-} \approx 16.1, (tg\phi = 0.093)$ qiymətini alır.



Şəkil 3. KOH + su (1) və aqar geli + KOH + su (2) sistemlərində K^+ və OH^- ionlarının hidratasiya ədədlərinin cəminin KOH – ın məhluldakı konsentrasiyasından asılılığı

K^+ və OH^- ionlarının hidratasiya ədədlərinin cəminin KOH-ın məhluldakı konsentrasiyasından asılılığı şəkil 3-də göstərilmişdir. Burada (1) əyrisi KOH +su sisteminə, (2) əyrisi 0.5% aqar geli + KOH sistemlərinə aiddir. Göründüyü kimi aqar gelində K^+ və OH^- ionlarının hidratasiya ədədlərinin cəmi təxminən 16-ya bərabərdir və baxılan konsentrasiya diapazonunda dəyişməz qalır. KOH +su sistemində isə baxılan cəm 30 –dan 12 –yə qədər azalır. Aqar geli torunun ionları "sararaq" onların hidrat təbəqələrini ionların qarşılıqlı təsiri zamanı dağılmaqdan qoruması gelin, ümumiyyətlə, təbabətdə, texnikada stabilləşdirici kimi istifadəsini bir daha əsaslandırır.

[1] *П.Т.Орешкин*. Физика полупроводников и диэлектриков, М.: «Высшая школа», 1977, с. 448.

[2] *C.J.F. Bottcher, P Bordewijk.* Theory of Electric Polarization., Elsevier, Amsterdam, 1992

[3] *Г.С. Ландсберг*. Оптика, гл. ред. физ-мат. лит., М.:, Наука 1976, с. 926.

[4] *Э.А. Масимов, Х.Ф. Аббасов.* Abs. XVI Inter. Conf. Chem. Thermodynamics in Russia, v.1, Suzdal, 2007, p. 3S-239-3S-240

[5] *Э.А. Масимов, Х.Ф. Аббасов.* «Структурные изменения разбавленных водных растворов полиэтиленгликоля», XV Всероссийская конф. «Структура и динамика молекулярных систем», Яльчик, 2008

[6] *Л. Полинг,* Общая химия, пер. с англ., М., 1974, с. 683.

[7] *Дж Кемпбел.* Современная общая химия, пер. с англ., т. 1, М., 1975

[8] *Э. Картмелл, Г.В.А. Фоулз,* Валентность и строение молекул, пер. с англ., М., 1979. В. Г. Дашевский.

[9] *Г. Б. Бокий.* Кристаллохимия, 3 изд., М., 1971

[10] *М.М. Балданов и др*. Неэмпирческий расчет сольватных чисел ионов в растворах. ДАН СССР, 1989, т.308, №1. с.106-110.

[11] *М.М. Балданов, Д.М. Балданова, С.Б. Жигитова, Б.Б. Танганов.* К проблеме радиусов гидратированных ионов. Доклады АН ВШ России, 2006, Вып.2, с.32-37.

Э.А. Масимов, Х.Ф. Аббасов

ВЛИЯНИЕ АГАРНОЙ ГЕЛИ НА ГИДРАТАЦИЮ ИОНОВ В РАЗБАВЛЕННОМ ВОДНОМ РАСТВОРЕ КАЛИЯ ГИДРОКСИДА

В работе была исследована зависимость показателя преломления системы KOH + вода и агарная гель + KOH от концентрации KOH. Была предложена модель позволяющая определить число гидратации ионов на основе результатов полученных использованием уравнения Лоренца-Лоренца и изучено влияние агарной гели на гидратацию ионов в растворе. Установлено, что агарная гель защищает гидратную оболочку ионов от разрушения.

E.A. Masimov, H.F. Abbasov

INFLUENCE OF AGAR GELS ON THE HYDRATION OF IONS IN DILUTED WATER SOLUTION OF POTASSIUM HYDROXIDE

In this paper we studied the dependence of the refractive index of KOH + water and Agar gel + KOH from the concentration of KOH. A model was proposed which allows to determine the number of ion hydration on the basis of the results obtained using the Lorenz-Lorenz equation and the influence of agar gels on the hydration of ions in solution was studied. It was established that the Agar gel protects the hydration shell of ions from destruction.

Qəbul olunma tarixi: 23.05.2011

T.Ş. Əfəndiyev, V.M. Katarkeviç, Ç.O. Qacar, R.Ə. Kərəməliyev

DİODLA DOLDURULAN BƏRK CİSİM MİKROLAZER İLƏ HƏYƏCANLAŞDIRILAN PİKOSANİYƏLİ PAYLANMIŞ ƏKS RABİTƏLİ BOYA LAZERİ

Diodla doldurulan Nd:LSB bərk cisim mikrolazerinin ($\lambda = 531$ nm) subnanosaniyə şüalanması ilə ($\tau_{0.5} \approx 0.5$ ns) həyəcanlaşdırılan kompakt, yüksək stabil, dalğa uzunluğu dəyişilə bilən pikosaniyəli paylanmış əks rabitəli (PƏR) boya lazeri sisteminin yaradılması haqqında məlumat verilib. PƏR- lazerinin fəal mühiti rodamin 6G- nin etanol məhlulu (($C = 2\times10^{-4}$ M, həyəcanlandırma zonasının uzunluğu $L_{PƏR} \sim 12$мм) və doldurma astana qiymətindən 2.25 dəfə böyük olduqda tək ($\tau_{0.5} \sim 55$ ps; $P \sim 2.4$ kVt) spektral məhdud ($\Delta\nu_{0.5}\cdot\tau_{0.5} \sim 0.4$) pikosaniyə impulslar yaranır. Doldurma impulslarının enerji stabilliyi 0.4% olduqda, PƏR-lazerinin şüalandırdığı tək pikosaniyəli impulsların enerji stabilliyi ~1% -dən böyük olmur.

V.Z. Zubialeviç, E.V. Lutsenko, M.S. Leanenia, E.V. Muravitskaya, G.P. Yablonskii, A.M. Paşayev, B.H. Tağiyev, O.B. Tağıyev, S.A. Abuşov

NADİR TORPAQ ELEMENTLƏRİ İLƏ AŞQARLANMIŞ $(Ba,Ca)Ga_2(S,Se)_4$ HALKOGENİD YARIMKEÇİRİCİLƏRİNİN LÜMİNESSENT XASSƏLƏRİ

Eu və/və ya Ce ilə aşqarlanmvış $(Ba,Ca)Ga_2(S,Se)_4$ hakogenid yarımkeçiricilərinin fotolümiessent xassələri tədqiq edilmişdir.Müəyyən edilmişdir ki, barium və kalsium tioqallatlarının lüminessensiyaları selenqllatlarınkından daha effektivdir. Yevropium və seriumla aşqarlanmış $(Ba,Ca)Ga_2(S,Se)_4$ yarımkeçiriciləri 10 - 300 K diapazonunda lümiessensiya xarakteristikaları yüksək temperatur stabilliyi göstərirlər. Eu və/və ya Ce ilə aşqarlanmvış tioqallatlar və selenqallatlar 10^4W/cm^2 aşmayan həyəcanlanma səviyyələrində FL effektivliyinin əhəmiyyətli artmasını nümayiş etdirirlər. FL effektivliyinin azalmasının mexanizmi kimi elektronların nadir torpaq ionlarının həyəcanlanmış halından matrisin keçirici zonasına de - həyəcanlanması və onların sonrakı şüalanmasız relksasiyası təklif edilir.

İlk dəfə olaraq Er – Yb cütünün antistoks lüminessensiyası barium tioqallatda alınmışdır. Otaq temperaturunda antistoks lüminessensiyasının effektivliyinin həyəcanlandırıcı şüalanmanın güc sıxlığından asılılığı 0.5 - 125 W/cm^2 (976nm) diapazonunda tədqiq edilmişdir.

O.B. Abdinov, F.T. Xəlil-zadə, S.S. Rzayeva

ELEKTROZƏİF QARŞILIQLI TƏSİRLƏRİN $SU(3)_C \times SU(3)_L \times U(1)$ MODELİ VƏ ELEKTRİK YÜKÜNÜN KVANTLANMASI

Elektrozəif qarşılıqlı təsirinin $SU(3)_C \times SU(3)_L \times U(1)$ modeli çərçivəsində fotonun məxsusi funksiyasına və anomaliyaların ixtisarı şərtlərinə əsaslanaraq, zərrəciklərin elektrik yüklərinin kvantlanması həyata keçirilmişdir. Hiqqs və fermion sahələrinin hiperyüklərinin ixtiyari qiymətlərində kalibrləmə bozonlarının kütlələri, neytral sahələrin məxsusi funksiyaları və lepton və kvarklarların kalibrləmə bozonları ilə qarşılıqlı təsirləri üçün ifadələr hesablanmışdır. Fermionların elektrik yükləri və elektrik yüklərinin kvantlanmasına gətirən şərtlər üçün ifadələr tapılmışdır. Göstərilmişdir ki, Higgs sahələri zərrəciklərin elektrik yüklərinin "formalaşmasında" və elektrik yüklərinin kvantlanmasında təsirə malikdir.

R. Jabbarov, N. Musayeva, S. Abdullayeva, F. Scholz, T. Wunderer, P. Benalloul, C. Barthou, C. Laurent

InGaN DİOD STRUKTURUNUN VƏ AĞ İŞIQ DIODU ÜÇÜN İKİ RƏNGLİ İŞIQLANMAYA MALİK $(Ca_{1+x-y}Eu_y)Ga_2S_{4+x}$ LÜMİNOFORUNUN YETİŞDİRİLMƏSİ

Təqdim olunan işdə səfir altlığın c -müstəvisi üzərində İnGaN işıq diodu strukturunun yetişdirilməsi və fosfor çevirici ağ işıq diodunun yaradlıması üçün ikirəngli fosforun hazırlanması haqqında məlumat verilmişdir. Onların optik xassələri tədqiq olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, baxmayaraq ki, temperatur sönməsi baş verir, otaq temperaturunda lüminessent əyriləri qızdırılmadan öncə və sonra demək olar ki, eynidir, bu isə onu göstərir ki, termik sönmə bərpa olunandır və ya termik deqradasiya yoxdur. Bu fosfor çevirici ağ işıq diodunun yaradlıması üçün çox vacibdir, çünki işq diodunun iş prosesində davamlı olaraq istilik ayrilir.

M.A. Mahmudova, N.Z. Cəlilov

$YbBi_2Te_4$ VƏ $YbBi_4Se_7$ OPTİK SPEKTRLƏRİ

İşdə $YbBi_2Te_4$ və $YbBi_4Se_7$ polikristallik nümunələrində işıq enerjisinin 1-6eV intervalında nümunələrin səthinə normal düşən işığın əksolunma əmsalı $R(E)$ ölçülmüşdür. Ölçülən əksolunma əmsalının qiymətləri əsasında Kramers-Kroniq münasibətlərinin köməyi ilə onların optik parametrləri: optik keçiriciliyi $\varepsilon_2 E$, halların əlaqəli sıxlıqlarının inteqral funksiyası $\varepsilon_2 E^2$, dielektrik sabiti $\varepsilon_{0,eff(E)}$, ε_2–yə görə valent elektronlarının effektiv sayı $n_{ef}(E)$, həmçinin

həcmi – Img ε^{-1} və səthi -$Img(1+\varepsilon)^{-1}$ elektron itkilərinə görə enerjinin E verilmiş qiymətinə qədər olan elektronların effektiv sayı təyin edilmişdir.

T.C. İbrahimov, G.M. Bayramov, A.R. İmaməliyev

MAYE KRİSTAL XIRDA ZƏRRƏCİKLƏR SİSTEMİNDƏ KLARK – LAQERVOLL EFFEKTİNİN TƏDQİQİ

Qeyri mezogen xıral əlavəli maye kristalların (MK) üçkomponentli qarışığı əsasında hazırlanan və seqnetoelektrik xassələrinə malik C^* smektiki işlənib hazırlanmışdır. Elektrooptik effektlərə cavabdeh olan fiziki parametrlər təyin olunmuşdur. Həm təmiz, həm də Al_2O_3-ün xırda mərkəzi simmetrik zərrəcikləri və seqnetoelektrik $SrTiO_3$ əlavəli C^* smektikdə Klark – Laqervoll effekti tədqiq edilmişdir.

Göstərilmişdir ki, MK+Al_2O_3 özəyin zaman xarakteristikaları təmiz MK özəyə nisbətən bir qədər pis olur. Bu onunla əlaqədardır ki, Al_2O_3 xırda zərrəciklərinin əlavə edilməsi ilə seqnetoelektrik maye kristalın fırlanma özüllüyü artır. Eyni zamanda MK+$SrTiO_3$ özəyində Klark – Laqervoll effektinin zaman xarakteristikaları təmiz MK özəyin zaman xarakteristikalarından üstün olur, belə ki, təhrif olunmuş UP haldan DOWN hala keçid, DOWN haldan UP-hala keçidə nisbətən daha az enerji dəf etmək tələb olunur.

Z.A. Cahangirli, K. Mimura, K. Wakita, Y. Shim, G. S. Orucov, N.T. Məmmədov

$TlFeSe_2$ KRİSTALININ FERROMAQNİT FAZADA ELEKTRON ZONA QURULUŞU

$TlFeSe_2$ kristalının zona quruluşu Birləşmiş Müstəvi Dalğalar yaxınlaşmasında tam-potensial metodu ilə sıxlıq funksionalı yaxınlaşmasında ümumiləşmiş qradient aproksiması ilə hesablanmışdır. Göstərilmişdir ki, $TlFeSe_2$ kristalınında kimyəvi rabitə dəmir atomunda lokallaşmış 3d-elektronları ilə əlaqədar metallik rabitə təşkil edir.

Ə.Ş. Abdinov, R.F. Babayeva, R.M. Rzayev

QALLİUM MONOSELENİDİ KRİSTALLARINDA İŞIĞIN YÜKDAŞIYICILARIN YÜRÜKLÜYÜNƏ TƏSİRİ

Temperaturun T=77÷350 K intervalinda təmiz və qadolonium atomları ilə aşqarlanmış qallium monoselenidi (p-GaSe) kristallarında yükdaşıyıcıların yürüklüyünə spektrin müxtəlif oblastlarından (məxsusi və aşqar udma oblastlarından) olan işığın təsiri tədqiq olunmuşdur.

Müəyyən olunmuşdur ki, bu kristallarda işığın təsiri altında yürüklüyün tümperaturdan asılılığının nəinki qiyməti, hətta gedişi də dəyişir. Bundan başqa qalıq yürüklük effekti də müşahidə olunur. Bütün bu hadisələr nəinki təmiz kristalların qaranlıq xüsusi müqavimətindən və aşqarlanmış kristallarda aşqarın miqdarından, həmçinin işığın spektral tərkibindən də asılılıdır.

Qeyd olunur ki, hər iki qrup kristallarda işığın yürüklüyə təsiri sərbəst enerji zonalarının potensial relyefinin optik düzlənməsi (dreyf çəpərlərinin optik silinməsi) ilə əlaqədardır.

S.B. Kazımova, A.S. Həsənova, E.Ç. Səidov

CH_3CH_2OH MOLEKULUNUN TRANS – KONFORMERİNİN QADAĞAN OLUNMUŞ KEÇİDLƏRİ

Bu işdə etil spirti molekulunun trans-konformerinin fırlanma spektri tədqiq olunmuş və 72 qadağan olunmuş keçid identifikasiya edilmişdir. Fırlanma spektri Vatsonun A reduksiyalı fırlanma hamiltonianı ilə təsvir olunmuşdur. Molekulun spektroskopik parametrləri dəqiqləşdirilmişdir.

L.İ. Vəliyeva, E.Z. Əliyev

ALLATOSTATİN-4 NEYROPEPTİDİNİN FƏZA QURULUŞU

Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə allatostatinlər ailəsinə mənsub allatostatin-4 neyropeptidinin fəza quruluşu tədqiq edilmiş və konformasiya enerjisinin miqdari qiymətləndirilməsi hesabına bu molekulun dayanıqlı halları müəyyən olunmuşdur.

A.Ş . Qəhrəmanov, F.K. Ələsgərov, K.Ş. Qəhrəmanov

$A_2^V B_3^{VI}$ SİSTEMLƏRİNDƏ LAYLAR ARASI NANOOBYEKTLƏRİN FRAKTAL HƏNDƏSƏSİ

Laylı kristallarda laylar arasındakı nanoobyeklərin morfologiyası Veyerştrass və Van-der-Varenden funksiyaları ilə müqayisəsi verilir. Nanostrukturlaşmış $A_2^V B_3^{VI}$ obyektlərin morfoloji analizi belə funksiyalarını nəzərə alaraq keçirilib.

C.Hasani Bərbəran, Q.H. Hüseynov, R.B. Vəliyev, Ə.B. Məhərrəmov

$Ga_{0,83}In_{0,83}Fe_{0,34}S_3$ – ÜN KRİSTAL QURULUŞU

$Ga_{0,83}In_{0,83}Fe_{0,34}S_3$ tərkibli bərk məhlul sintez edilmiş, uzunmüddətli tablama üsulu ilə monokristallar göyərdilmişdir. Rentgenquruluş analizi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, alınan kristallar heksaqonal quruluşa malikdir. Onun qəfəs sabitləri: a=3,7813 c=12,1888Å, fəza qr. P3m1. z=1,33, V=151,04 $Å^3$ $P_{rent.}$=3,84 qr/sm^3. Aparılan quruluş analizi nəticəsində atomların koordinatları, atomlararası məsafələr, koordinasiya ədədləri və quruluş tipi müəyyən edilmişdir.

T.Z. Quliyeva, E.A. Agayeva, Q.M. Eyvazova, N.N. Lebedeva

YÜKSƏK SİLİSİUMLU SEOLİT-KLİNOPTİLOLİTİN İNFRAQIRMIZI SPEKTROSKOPİK TƏDQİQİ

Təqdim olunan işdə Azərbaycanın ərazisində olan təbii seolit- klinoptilolitin udulmaspektrləri ölçülmüşdür. İQ spektrlər Varian-3600 FT-İR spektrofotometrində geniş tezlik intervalında (4000-400 cm^{-1})çəkilmişdirr. Udulma zolaqlarının identifikasiyası onların ədəbiyyatdan məlum qiymətlərlə yaxşı uslaşmasını aşkar etdi.

N.Z. Cəlilov

MÜXTƏLİF ŞƏRAİTLƏRDƏ ALINMIŞ SELENİN OPTİK SPEKTRLƏRİ

İşdə amorf (massiv), nazik təbəqə və polikristalik şəkilində olan selenin səthinə normal düşən 1÷6 eV enerji intervalında olan işığın əksetmə əmsalı *R(E)* ölçülmüşdür. Kramers-Kroniq metodu ilə onun optik parametrləri, dielektrik funksiyaları təyin edilmişdir. Göstərilmişdir ki, selen nümunələrin müxtəlif şəraitlərdə hazırlanması atomların konfiqurasiyasında yaxın nizamın dəyişməsinə səbəb olur. Bu da öz növbəsində elektron quruluşunu dəyişir, nəticə etibarilə bu materialların optik parametrləri dəyişir.

N.Z. Cəlilov, Q.M. Dəmirov

TERMİK İŞLƏMƏNİN Bi_2Te_3- Bi_2Se_3 ENERJİ İNTERVALINDA NAZİK TƏBƏQƏLİ NÜMUNƏLƏRİNİN OPTİK PARAMETRLƏRİNİN SPEKTRLƏRİNƏ TƏSİRİ

İşdə Bi_2Te_3- Bi_2Se_3 n və p – tip termik işlənməyən və işlənən nümunələrində səthə normal düşən işığın 1÷6 eV intervalında əks olma spektrləri ölçülmüşdür. Kramers – Kroninq metodu ilə R(E) əsasında onların optik parametrləri və optik keçidlərinin qiymətləri təyin edilmişdir. Göstərilmişdir ki, termik işləmə nəticəsində optik parametrlərinin və elektron keçidlərinin qiymətləri dəyişir.

V.Ə. Tanrıverdiyev, V.S. Tağıyev

DÜZBUCAQLI FERROMAQNİT NANOMƏFTİLDƏ SPİN HƏYƏCANLANMALARININ MİKROSKOPİK NƏZƏRİYYƏSİ

Ferromaqnit nanoməftildə spin həyəcanlanmaları Qrin funksiyası metodu ilə tədqiq olunur. Ferromaqnit nanoməftilin müxtəlif spinləri üçün Qrin funksiyasının ifadəsi tapılıb. En kəsiyi kvadrat olan nanoməftil modeli seçilib. Alınmış nəticələr parametrlərin seçilmiş qiymətlərində kəmiyyətcə təsvir olunub.

S.T. Əzizov

ƏYT ŞÜALANMANIN UDULMA ÖRTÜYÜ

Məqalədə canlı orqanizmlərin ən yüksək tezliklərin (ƏYT) zərərli təsirindən müdafiəsi üçün istifadə oluna bilən, işlənmiş qalıq və çox vaxt xoşagəlməz elektromaqnit şüalanmasını istifadə edən kompozit materialların əsasında verilmiş tezlikli elektromaqnit şüalanmasının uducularının yaradılmasına aiddir.

ISSN 1028-8546

2011, Cild XVII, 2
Seksiya: Az

MÜNDƏRİCAT

1. Energetika sistemlərinin ekoloji problemlərinin həllində elektrofiziki proseslər
A.M. Həşimov, K.B. Qurbanov, H.C. Hüseynov 3
2. Təməl prinsiplərdən β-GaS kristali üçün hal tənliyi parametrlərinin təyini
Z.A. Cahangirli, H.S. Orucov, N.T. Məmmədov 12
3. $Rb_{0,95}Cs_{0,05}NO_3$ monokristalinda III→II polimorf çevrilmənin kinetikasi
V.İ. Nəsirov, A.F. Həziyeva, Y.Q. Əsədov, R.C. Alıyeva 15
4. Samux rayonundan götürülmüş neft nümunəsinin reoloji və termik xassələri
E.A. Məmmədov, B.G. Paşayev*, M.A. Hüseynov, İ.E. Qədimquluyev 18
5. $TlIn_{1-x}DyS_2$ bərk məhlullarinin elektrik keçiriciliyi
A.M. Əhmədova, H.İ. Zeynalov, M.M. Zərbəliyev, R.L. Məmmədova 24
6. Aqar gelinin kalium hidroksidin duru sulu məhlulunda ionlarin hidratlaşmasina təsiri
E.Ə. Məsimov H.F. Abbasov 26
7. Annotasiyalar 30