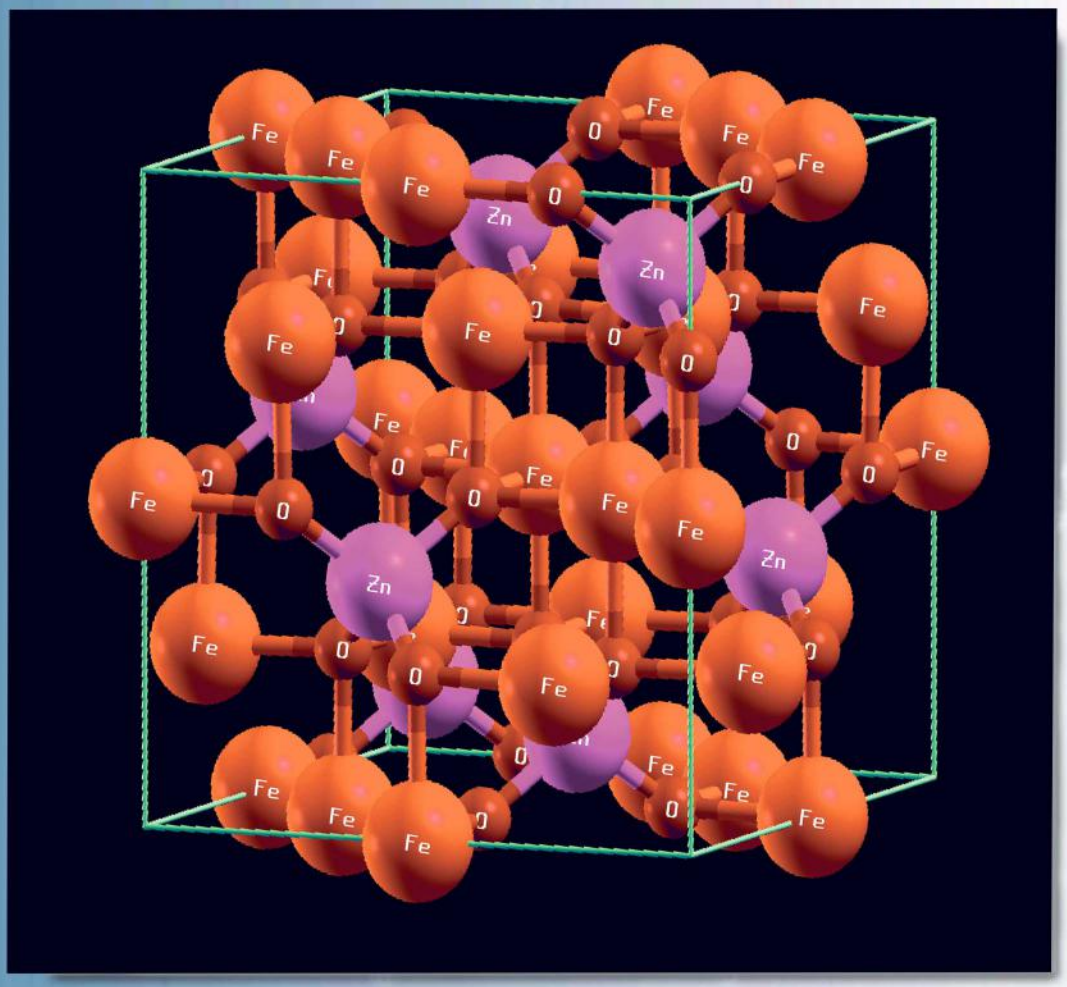
ISSN 1028-8546

Volume XXVII Number 3
Section: Az October, 2021

# Azerbaijan Journal of Physics

# Fizika




www.physics.gov.az
www.physics.gov.az/ajpfizika.html

Institute of Physics
Azerbaijan National Academy of Sciences
Department of Physical, Mathematical and Technical Sciences

Published from 1995
Ministry of Press and Information
of Azerbaijan Republic,
Registration number 514, 20.02.1995

**ISSN 1028-8546**
vol. XXVII, Number 03, 2021
Series: Az

# *Azerbaijan Journal of Physics*

# *FIZIKA*

*Institute of Physics*
*Azerbaijan National Academy of Sciences*
*Department of Physical, Mathematical and Technical Sciences*

**HONORARY EDITORS**

Arif PASHAYEV

**EDITORS-IN-CHIEF**

Arif HASHIMOV

**SENIOR EDITOR**

Talat MEHDIYEV

**INTERNATIONAL REVIEW BOARD**

Arif Hashimov, Azerbaijan
Ivan Scherbakov, Russia
Mehmet Öndr Yetiş, Turkey
Gennadii Jablonskii, Belorus
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
Anatoly Boreysho, Russia
Mikhail Khalin, Russia
Hasan Bidadi, Tebriz, Iran
Natiq Atakishiyev, Mexico
Kerim Allahverdiyev, Azerbaijan
Javad Abdinov, Azerbaijan
Tayar Djafarov, Azerbaijan
Salima Mehdiyeva, Azerbaijan
Talat Mehdiyev, Azerbaijan
Ayaz Bayramov, Azerbaijan
Tofiq Mammadov, Azerbaijan
Shakir Nagiyev, Azerbaijan
Rauf Guseynov, Azerbaijan
Yusif Asadov, Azerbaijan

**TECHNICAL EDITORIAL BOARD**

Senior secretary: Elmira Akhundova; Nazli Huseynova, Elshana Aleskerova,
Rena Nayimbayeva, Nigar Akhundova, Zuleykha Abdullayeva

**PUBLISHING OFFICE**

131, H. Javid ave., AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics

Tel.: (99412) 539-51-63, 539-32-23
Fax: (99412) 537-22-92
E-mail: jophphysics@gmail.com
Internet: www.physics.gov.az

Published at "_____"
_____str., Baku

Sent for printing on: __.__. 201_
Printing approved on: __.__. 201_
Physical binding:_____
Number of copies:_____200
Order:_____

It is authorized for printing:

# POLİMER - NANOÖLÇÜLÜ VƏ POLİMER - MİKROÖLÇÜLÜ KOMPOZİTLƏRİN HİBRİDİNİN YARADILMASI ÜÇÜN PYEZOELEKTRİK FAZALI ALTLIĞIN ALINMASI TEXNOLOGİYASI

**M.Ə. QURBANOV[1], F.N. TATARDAR[1,2], İ.S. RAMAZANOVA[1], A.F. NURƏLİYEV[1], Z.A. DADAŞOV[1]**

[1]*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu, AZ 1143, Bakı, H. Cavid pr.,131.*
[2]Xəzər Universiteti, Məhsəti küç, 41, AZ 1096, Bakı, Azərbaycan

Təklif etdiyimiz matrisa tipli polimer materiallar nano- və mikroölçülü pyezohissəciklərdən ibarət polimer kompozitlərin hibridindən ibarətdir. Hibrid strukturlu pyezoelektrik materiallar nanostrukturlaşdırılmış səthə yaxın təbəqədən və polimer pyezoelektrik altlıqdan ibarətdir. hibrid tipli kompozitdə pyezoaltlığa çökdürülmüş polimer qatı nanostrukturlaşdırılmışdır və matrisa tipli kompozitdə səthəyaxın qatı əvəz edir. Hibrid strukturlu kompozitlərdə polimer-pyezokeramika altlığı mikropyezoelektrik fazanı və polimer $SiO_2$ isə nanofazanı təyin edir.

**Açar sözlər:** Polimer kompozit, nanokompozit, elektrik qaz boşalması, pyezoelektrik altlıq.
**PACS:** 83.85. Hf, 82.35. Np, 83.80.Tc.

## GİRİŞ

Nano-pyezoelektrik materialların yaradılması üçün çoxkomponentli $Pb(ZrTi)O_3$ ailəsinə mənsub olan seqnetoelektrik materialların istifadə edilməsi xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Lakin ədəbiyyatlarda $Pb(ZrTi)O_3$ ailəsinə mənsub çoxkomponentli pyezokeramikalardan nanoölçülü hissəciklərin alınması haqqında dolğun məlumat yoxdur. Digər tərəfdən məlumdur ki, çoxkomponentli $Pb(ZrTi)O_3$ mənşəli keramikaların mikroölçülü hissəcikləri stabil struktura malikdir və hal-hazırda matrisa tipli həm enerji tutumlu, həm də kiçikgüclü polimer kompozitlərin yaradılması üçün geniş tətbiq olunur. Bizim təklif etdiyimiz matrisa tipli polimer materiallar nano- və mikroölçülü pyezohissəciklərdən ibarət polimer kompozitlərin hibridindən ibarətdir. Hibrid strukturlu pyezoelektrik materiallar nanostrukturlaşdırılmış səthəyaxın təbəqədən və polimer pyezoelektrik altlıqdan ibarətdir. Nanostrukturlaşdırılmış səthəyaxın təbəqə pyezoelektrik altlığa kimyəvi üsulla çökdürülür. Beləliklə, hibrid tipli kompozitdə pyezoaltlığa çökdürülmüş polimer qatı nanostrukturlaşdırılmışdır və matrisa tipli kompozitdə səthəyaxın qatı əvəz edir. Pyezoaltlığa çökdürülmüş bu faza yüksək fiziki-mexaniki xassələrə malik olacaqdır. Hibrid strukturlu kompozitlərdə polimer-pyezokeramika altlığı mikropyezoelektrik fazanı və polimer $SiO_2$ isə nanofazanı təyin edir. Hal-hazırda mikroölçülü seqnetoelektrik və polyar, qeyri-polyar polimerlər əsasında kompozitlər daha yaxşı öyrənilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, kompozitlərdə pyezoelektrik effektinin yaranmasının əsas səbəbi elektrotermopolyarlaşma prosesində pyezofazanın oriyentasiya olunmuş domenlərindən və fazalararası sərhəddə injeksiya olunmuş elektrik yük daşıyıcılarından ibarət kvazinetral sistemin yaranmasıdır. Pyezoelektrik fazanın hissəciklərinin ölçüsünün, strukturunun, həcmi payının və polimer matrisasının fiziki-kimyəvi xassələrinin, həmçinin polyarlaşma rejimlərinin variasiyası ilə pyezokompozitlərin tərkibi və alınma texnologiyasının rejimləri optimallaşdırılmışdır. Kompozitlərin pyezoelektrik xassələrinə sərhəd elektron-ion və polyarlaşma proseslərinin təsiri kifayət qədər öyrənilmişdir. Bu səbəbdən, polimer- seqnetopyezoelektrik kompozitlərin pyezoelektrik, mexaniki və elektromexaniki xarakteristikalarının yuxarıda göstərilən fiziki və kimyəvi faktorların dəyişməsi yolu ilə sonrakı artımını təmin etmək mümkün deyil. Bu effektin yaranmasının əsas səbəbi, alınma texnologiyasından asılı olmayaraq, kompozit elementin səthəyaxın həcmində mexaniki, elektrik və akustik itkilərinin yüksək olmasıdır.

## TƏDQİQAT METODLARI VƏ ÜSULLARI

Tədqiqat obyektləri üzvi və qeyri-üzvi nano- və mikroölçülü polimer kompozitlərin hibridi əsasında yaradılmış yeni nəsil pyezoelektrik materiallarıdır. Qeyri-üzvi nanofaza kimi ölçüləri 70-100 nm olan $SiO_2$ seçilmişdir. Mikroölçülü pyezokeramik faza kimi $Pb(TiZr)O_3$ ailəsinə mənsub çoxkomponentli PKR tipli pyezoelektrik materiallardan istifadə olunmuşdur. Hibrid kompozitlərin üzvi fazası kimi polyar və qeyri- polyar polimerlər götürülmüşdür: poliolefinlər (ASPE, YSPE, PP) və polivinildenftorid (PVDF).

Tədqiqat üsulları kimi İQ spektroskopiya, termodepolyarlaşma analizi, rezonans-antirezonans metodu, temperatur - zaman və təzyiq - zaman kristallaşması və baryer tipli elektrik qaz boşalması texnologiyasından istifadə edilmişdir.

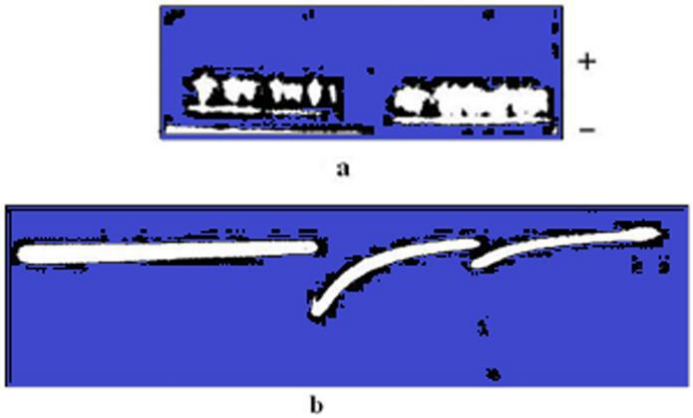
## NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

Hibrid pyezoelektrik materialların texnologiyasının işlənməsinin əsas məsələsi mikroölçülü PZT tipli pyezoelektrik hissəcikləri ilə dispersiya olunmuş pyezoaltlığın yaradılmasıdır, çünki hibrid kompozitlərin bu hissəsi (pyezoaltlıq) onların pyezoelektrik xassələrini təyin edir. Öz növbəsində, bu məsələnin həlli üçün mikrostrukturlaşdırılmış kompozitlərin fiziki-kimyəvi strukturlarını nəzərə almaqla onların səthinin daha effektli metodla aşındırılması tələb olunur. Nanotexnologiyada baryer tipli elektrik qaz boşalması plazmasının elektronika elementinin səthinin aşınması faktoru kimi tətbiq edilməsi əhəmiyyət kəsb edir.

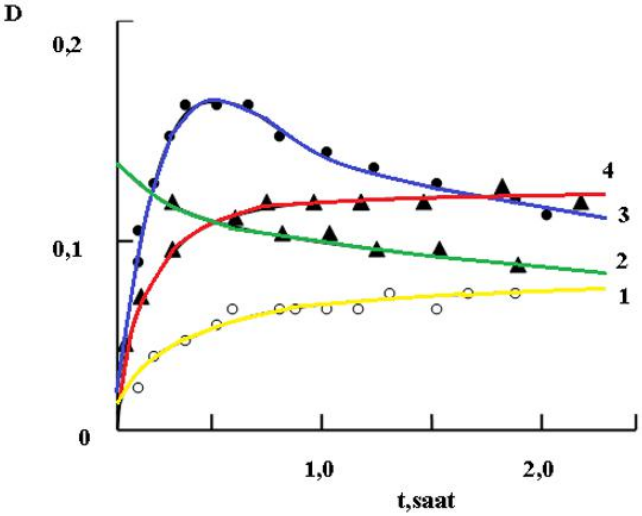


131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com

Şəkil 1-də baryer tipli elektrik qaz boşalmasının diskret plazma kanallarının optik mənzərəsi (şəkil 1.a) və ona uyğun gərginlik impulsları (şəkil 1.b) verilmişdir. Gərginlik impulsları ardıcıl bağlanmış müqavimətdən elektron ossilloqrafa verilmişdir. Göründüyü kimi diskret plazma kanalları pyezoelektrik altlığın səthinin müxtəlif nöqtələrində yaranır, dayanmadan bütün qaz boşalması ilə əhatə olunmuş qaz aralığında yerini dəyişir və bununla da pyezoaltlığın bütün səthini bircins aşındıra bilir. Baryer boşalmasının bu xüsusiyyəti əsasən onun hibrid kompozitlər üçün pyezoelektrik altlığın alınmasında tətbiqi ilə təyin edilir. Bu halda elektrik qaz boşalması kanalları dielektrik-qaz fazası-pyezoelektrik altlıq-metal sistemində dəyişən sinusoidal gərginliyin ($20 \cdot 10^3$V) təsirindən yaranır. Dielektrik strukturun qaz fazasının qalınlığı 0,5-dən 6 mm-ə qədər tənzim olunur.




*Şəkil 1.* Sınaq özəyin metal-dielektrik-qaz-pyezoelektrik altlıq-dieletrik-metal strukturunda yüksək gərginliyin təsiri altında yaranan elektrik qaz boşalmalarının optik (1,a), elektrik (1, b) mənzərələri.



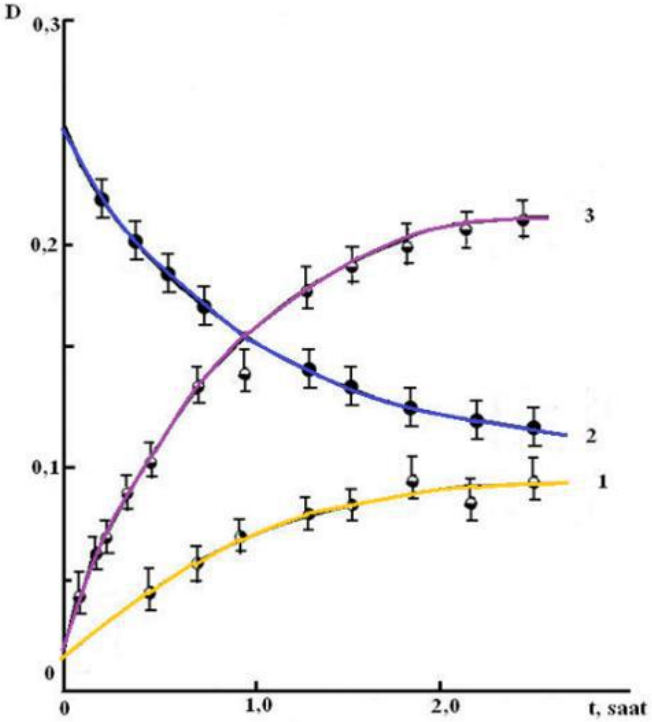

*Şəkil 2.* PE-nin İQ spektrindəki zolaqların optik sıxlığının aşınma müddətindən asılılığı. 1 – 3200 $sm^{-1}$-OH; 2 – 4327 $sm^{-1}$- $CH_2$; 3 – 1700 $sm^{-1}$- C=O; 4 – 1278 $sm^{-1}$-C – O – C qrupları. Elektrik qaz boşalmasının yaratdığı dielektriklərlə əhatə olunmuş hava aralığının qalınlığı *d*=4mm, plazmaya tətbiq olunmuş gərginlik *U*=20 kV.

Hesab etmək olar ki, pyezoaltlığın səthinin aşınması əsasən plazma kanalı ilə altlığın kontakt sahəsinə verilmiş enerji ilə təyin edilir. Bu enerjinin təsiri nəticəsində pyezoaltlığın səthi qızır və həm termooksidləşmə reaksiyası üçün, həm də porsiyalarda dağılması üçün şərait yaranır. Baryer tipli elektrik qaz boşalmasının təsiri şəraitində yaranmış proseslərin formalaşmasında plazma kanallarında sintez olunan oksigen mənşəli kiçik molekullu qrupların rolu daha yüksəkdir. Şəkil 2-də və 3-də PP-də və PE-də plazma şəraitində oksidləşmə proseslərinin göstəricisi olan $D = \lg \frac{I_f}{I}$ asılılıqları verilmişdir. Burada $I_f$ və $I$ – uyğun olaraq zolağın fon və pik buraxmasının *v*-dən asılı olaraq faizlərlə dərəcəsidir. Polimer zəncirində kimyəvi aktiv oksigen tərkibli qrupların yaranması zəncirin C=C rabitəsini zəiflətməklə makromolekulun əsas zəncirinin qırılmasını təmin edir. Mikroölçülü seqnetopyezoelektrik hissəciklərlə dispersiya olunmuş PE və PP fazaların elektrik qaz boşalması plazmasının təsiri şəraitində aşınmasından sonra, onların İQ spektrində nəzərəçarpacaq dərəcədə kimyəvi qruplar yaranır: karbonil C=O, hidroksil OH və efir körpücükləri C – O – C. Şəkil 2 və 3-də uyğun olaraq PE və PP- də elektrik qaz boşalması şəraitində yaranan qrupların aşınma zamanından asılılıqları kifayət qədər mürəkkəb qanunla dəyişirlər. Məsələn, PP-də C=O və OH qrupları aşınma zamanından asılı olaraq əvvəlcə artır, sonra isə doyma rejiminə keçir. Spektrdən $CH_2$ qrupuna aid *D= f(t)* asılılığı isə sabit qiymətə malik olur. Göstərilən qrupların sıxlığının aşınma zamanından asılı olaraq sabit qiymət alınmasının əsas səbəbi müəyyən modifikasiya zamanından

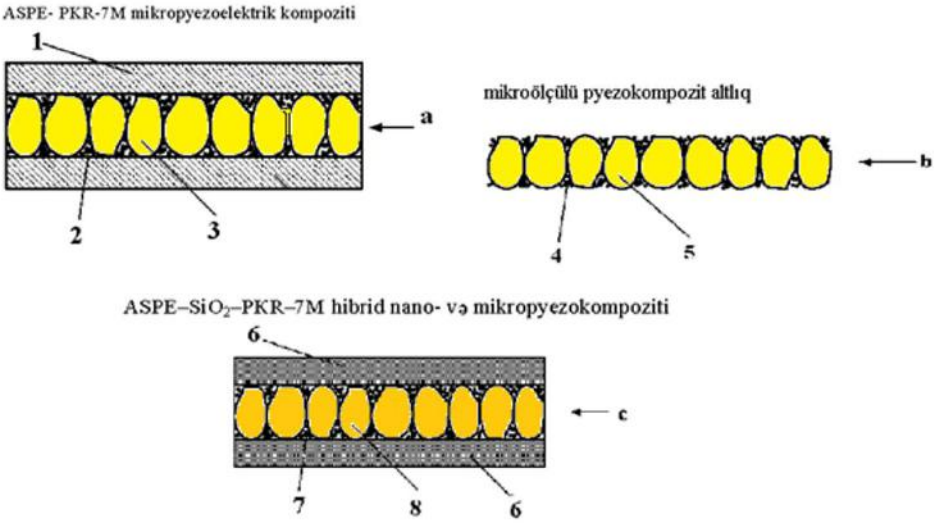
sonra erroziya prosesinin sona çatması ilə izah oluna bilər. İşdə $CH_2$ qrupunun optik sıxlığının dəyişməsi istifadə etdiyimiz polimer matrisada gedən erroziya proseslərinin proqnozu üçün istifadə edilmişdir. C=O, OH, $CH_2$ qrupların optik sıxlığının dəyişmə xarakteri pyezoelektrik altlığında baryer tipli elektrik qaz boşalmasının təsiri şəraitində gedən prosesləri proqnozlaşdırmağa və pyezoaltlığın mexaniki olaraq zədələnməsinin qarşısını almağa imkan verir.

Bütün yuxarıda göstərilənləri nəzərə alaraq eyni polimer matrisa əsasında alınmış nano- və mikroölçülü dispers fazaya malik kompozitlərin hibridi əsasında yeni nəsil pyezoelektrik materialların alınma texnologiyası təklif edilmişdir. Təklif olunan texnologiyanın ümumi modeli şəkil 4-də verilmişdir [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7].

Təklif olunan texnoloji proseslərin yerinə yetirilməsində əsas faktorlardan biri polimer fazanın həlledicidə həll edilməsi üçün temperaturun seçilməsidir. Bu temperatur mikrohissəciklərə malik olan polimer altlıqda fazalararası sərhəddəki polimer fazanın ərimə temperaturundan kiçik olmalıdır, yəni mikropyezohissəciyə malik olan altlığın fiziki strukturu və quruluşu saxlanılmalıdır (şəkil 4, 2b).




*Şəkil 3.* PP-nin İQ spektrindəki zolaqların optik sıxlığının aşınma müddətindən asılılığı. 1 – 3200 $sm^{-1}$-OH; 2 – 4327 $sm^{-1}$-$CH_2$; 3 – 1720 $sm^{-1}$- C=O; qrupları. Elektrik qaz boşalmasının yaratdığı dielektriklərlə əhatə olunmuş hava aralığının qalınlığı *d*=4mm, plazmaya tətbiq olunmuş gərginlik *U*=20 kV.




*Şəkil 4.* ASPE - nanohissəcik $SiO_2$ - pyezokeramika PKR-7M nano-və mikropyezokompozitin hibridinin formalaşmasının struktur sxemi. a) ASPE- PKR-7M mikropyezoelektrik kompoziti. b) polimerin səthə yaxın qatının həll olmuş halda olan mikropyezoelektrik kompoziti. c) ASPE–$SiO_2$–PKR–7M hibrid nano- və mikropyezokompoziti. 1–səthəyaxın polimer oblastı; 2–fazalararası polimer qatı; 3–pyezohissəcik; 4–üst polimer qatının olmadığı halda fazalararası təbəqə ; 5–pyezokompozit struktur (altlıq) (b, 5); 6-nanostrukturlaşmış səthəyaxın polimer qatı; 7- nanohissəcik $SiO_2$; 8 – nano- və pyezohibrid kompoziti (c, 8).

[1, 2, 3, 4, 5, 6, 7] işlərində göstərilmişdir ki, üzvi və qeyri-üzvi kompozitlərin sərhəddində strukturu qeyri-üzvi faza kimi götürdüyümüz pyezokeramik hissəciklərin səthinin təsiri altında formalaşan yeni bir faza yaranır. Bu fazada polimerin strukturu və xassələri ilkin götürdüyümüz polimer matrisanın analoji xarakteristikalarından fərqlidir: elektrik qaz boşalması plazmasının təsirinə qarşı davamlılığı və az erroziya qabiliyyətinə malik olması. Fazalararası sərhəddə yaranan və baryer tipli elektrik qaz boşalması plazmasının təsirinə yüksək davamlılığı, stabil elektrik yük halına malik olması polimer-mikroölçülü pyezokeramik fazaya malik kompozitlərin əsasında unikal fiziki və mexaniki xassələrə malik pyezoelektrik altlığın yaradılmasına imkan verir.

## YEKUN NƏTİCƏ

Aparılan eksperimentlər göstərir ki, hətta həcmi payı 0,25 - 1,5% olan $SiO_2$ nanohissəciklərini polimer matrisaya saldıqda onun fiziki və mexaniki xassələri kifayət qədər artır [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7].

Polimer – nanoölçülü $SiO_2$ və polimer – mikroölçülü $Pb(ZrTi)O_3$ ailəsinə mənsub kompozitlərin hibridinin alınması üçün, polimer – mikroölçülü pyezoelektrik kompozit altlığın elektrik qaz boşalması plazması üsulu ilə alınmasının texnologiyası işlənmişdir;


[1] *М.К. Керимов, М.А. Курбанов, А.А. Мехтили, Г.Г. Алиев, И.С. Султанахмедова, Ф.Н. Татардар и др.*. ЖТФ., 2011, т. 81, вып. 8, с. 127-134.

[2] *М.А. Курбанов, Ф.Н. Татардар, А.А. Мехтили и др.. Электронная* обработка материалов, 2011, т. 47, вып.1, с. 87-95.

[3] *Ю.Г. Фролов*. Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы: учеб. Для вузов *Ю.Г. Фролов*. 3-е изд. М.: Альянс – Пресс, 2004, 464с.

[4] *R.C. Kanu.* J. Polymer Sci., 2001, v. 2, p. 345-356.

[5] *I.R. Nabiullin.* Mol. Cryst. Liq. Cryst., 2007, vol. 468, p. 257-263.

[6] *K.L. Ng, H.L.W. Chan, C.L. Choy*. Piezoelectric and piroelectric properties of PZT/ P (VDF - TrFE) composites with constituent phases poled in parallel or antiparallel directions. IEEE Trans. Ultrason., Ferroelec., a. Freq. Contr., 2000, v. 47, No 6, p. 1308-1315.

[7] *M.A. Kurbanov, A.A. Bayramov, N.A. Safarov, F.N. Tatardar, A.A. Mextili, I.S. Sultanaxmedova*. Hybrid piezoelectric composites with high electromechanical characteristics. US Patent No.8,030,829 B1, 2011


**M.A. Kurbanov, F.N. Tatardar, I.S. Ramazanova, A.F. Nuraliev, Z.A. Dadashov**

## TECHNOLOGY OF OBTAINING A PIEZOELECTRIC SUBSTRATE FOR THE CREATION OF POLYMER-NANO- AND POLYMER-MICRO-SIZED HYBRID COMPOSITES

The matrix-type polymer materials suggested by us are a hybrid of polymer composites consisting of piezoelectric nano- and microparticles. Hybrid structural piezoelectric materials consist of a nanostructured surface layer and a polymeric piezoelectric substrate. A polymer layer deposited on piezoelectric substrate in the hybrid type composite, is nanostructured and it replaces the surface layer in the matrix type composite. In the hybrid nanostructured composites, the polymer – piezoceramic substrate composes the micro piezoelectric phase while the $SiO_2$ polymer builds the nanophase.

**М.А. Курбанов, Ф.Н. Татардар, И.С. Рамазанова, А.Ф. Нуралиев, З.А. Дадашов**

## ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПОДЛОЖКИ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПОЛИМЕР-НАНО- И ПОЛИМЕР-МИКРОРАЗМЕРНЫХ ГИБРИДНЫХ КОМПОЗИТОВ

Предлагаемые полимерные материалы матричного типа представляют собой гибрид полимерных композитов, состоящих из пьезоэлектрических нано- и микрочастиц. Гибридные структурные пьезоэлектрические материалы состоят из наноструктурированного поверхностного слоя и полимерной пьезоэлектрической подложки. Слой пьезоэлектрического полимера наноструктурирован. Полимер-пьезокерамическая подложка определяет микропьезоэлектрическую фазу, а полимер $SiO_2$ определяет нанофазу.

*Qəbul olunma tarixi: 22.06.2021*

# QAZ BOŞALMALARIN TƏSİRİNƏ MƏRUZ QALAN POLİMER MATERİALLARIN MODİFİKASİYASI

**X.F. ƏLİYEVA, F.Ş. CƏFƏROVA, G.Ə. MURADOVA**
*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,*
*AZ-1143, Bakı , H. Cavid prospekti, 131*
e-mail: xadica.aliyeva93@mail.ru

Məqalədə polimer materialların qaz boşalması təsiri ilə modifikasyası, bu zaman istifadə olunan metodlar və nəticədə polimer materiallarda baş verən dəyişikliklərdən danışılır. Yeni xüsusiyyətlərə malik bir materiala ehtiyac yarandıqda, yeni polimerlərin yenidən sintez edilməsi həmişə məsləhət görülmür. Mövcud polimerlərin fiziki modifikasiyası və təbiətdəki fərqli quruluşlu maddələrlə birləşməsi problemi həll etməyin perspektivli yollarından biridir.

**Açar sözlər:** polimerlər, modifikasiya, qaz boşalması, plazma, aşınma, hidrofilizasiya,
UOT 691.175

Bu gün polimerlərin insan həyatındakı rolu o qədər böyükdür ki, həyat səviyyəsi bu materialların istehlak səviyyəsinə görə qiymətləndirilə bilər.

Materiallara müxtəlif texnoloji təsir növləri arasında elektrik texnologiyası xüsusi maraq kəsb edir: bir obyektə verilən elektrik (maqnit) sahəsinin enerjisindən birbaşa istifadə; səthini (həcmini) aktivləşdirmək və dəyişdirmək. Bu vəziyyətdə materialların yapışma və adsorbsiya qabiliyyəti, səth təmizliyi, materialların quruluşundakı dəyişikliklər, habelə birbaşa istehsalın texnoloji prosesində kimyəvi reaksiyalarda yeni materiallar əldə etmək kimi xüsusiyyətlərində məqsədyönlü dəyişiklik etmək mümkündür. Elektrik boşalması modifikasiyasını digər texnoloji əməliyyatlarla birləşdirmək nisbətən asandır.

Bir çox müəlliflərin əsərlərində [1-4] elektrik boşalmasının aktivləşdirilməsinin səmərəliliyindən, istehsal oluna biləcəyindən və nisbətən sadə metodla həyata keçirilməsindən xəbər verilir. Bununla bərabər, elektrik boşalması ilə aktivləşdirilmiş material arasındakı qarşılıqlı əlaqənin təbiəti, tullantıların təsiri altında materialların elektrofiziki və kimyəvi xüsusiyyətlərindəki dəyişiklik mexanizmi, elektrik boşalması aktivləşdirməsinin həyata keçirilməsinin xüsusi rejimləri barədə çətinliklər texnoloji əməliyyatların inkişafını ortaya çıxarır.

Yuxarıda deyilənlərdən belə məlum olur ki, bu gün polimer materialların xassələrinin tənzimlənməsi məsələsində faktiki istiqamət modifikasiyadır [2-5].

Klassik modifikasiya üsulları bunlardır: kimyəvi, fiziki-kimyəvi, fiziki və ya struktur [6]. Fiziki və ya struktur dəyişikliyi ilə fiziki metodlar demək olar ki, bütün məlum polimerlər və bunlara əsaslanan kompozisiyalar üçün tətbiq olunur. Fiziki modifikasiyanın əsas növlərinə [7] daxildir: müxtəlif növ radiasiya; həddindən artıq təzyiq və vakuumla emalı; elektrik və maqnit sahələrinə məruz qalma; vibrasiya və ultrasəslə təsir aşağı temperaturlara məruz qalma və termokimyəvi emal.

Bir sıra ölkələrdə polimer modifikasiyası metodu kimi radiasiyaya məruz qalma emalı sənayedə geniş istifadə olunur [8]. İonlaşdırıcı şüalanmanın təsiri altında polimerlərdə aşınma və birləşdirmə reaksiyalarının üstünlük təşkil etdiyi müəyyən edilmişdir. İonlaşdırıcı təsirlə işlənmiş polimerlər və təmizlənməmiş polimerlərin xassələri əhəmiyyətli fərqlərə malikdirlər.

Beləliklə, çarpaz bağlı polietilen, qızdırıldıqda çatlamaya və deformasiyaya qarşı müqaviməti artırır, bu da adi polietilen üçün tipik deyil. Eyni zamanda, polietilenin dielektrik xüsusiyyətləri və gücü praktik olaraq dəyişmir. Beləliklə, polietilen əriməyə məruz qaldıqda, ionlaşdırıcı şüalanma dozasının artması kristallitlərin ölçüsünün azalmasına səbəb olur [9-13].

Statton, Park və Lloytin [14-16] əsərlərində möhkəmlik xüsusiyyətləri və termal işlənmiş polimerlərin quruluşu araşdırılmışdır. Aparılan tədqiqatların nəticələri göstərdi ki, istilik təsiri polimerlərin kristallıq dərəcəsinin, sıxlığının artmasına, eləcə də dartılma dayanıqlığının, uzanmanın, qırılma indeksinin və digər xüsusiyyətlərin dəyişməsinə səbəb olur.

Polimer materialların fiziki modifikasiyasının başqa bir yolu ultrasəs təsiridir [2]. Ultrasəs titrəmələrin yüksək molekulyar birləşmələrin xüsusiyyətlərinə təsirinin öyrənilməsi sahəsində aparılan işlər, ultrasəs ilə təsir edilmənin müəyyən xüsusiyyətlərlə termodinamik cəhətdən uyğun olmayan polimerlərdən kompozit polimer materialların istehsalına kömək edə biləcəyini göstərdi.

Buna görə, son illərdə polimerlər sahəsində ilk yerlərdən biri polimer kompozit materiallarının yaradılması problemi olmuşdur. Funksional olaraq kompozitlər tikinti materiallarına və elektrofiziki xüsusiyyətləri kimi xüsusi xüsusiyyətlərə malik materiallara bölünə bilər. Polimer materialların elektrofiziki xüsusiyyətləri - elektrik keçiriciliyi, dielektrik sabitliyi və maqnit xüsusiyyətlərini əhatə edir. Bir qayda olaraq, polimer materiallar səth enerjisinin aşağı qiymətləri ilə xarakterizə olunur, həlledicilər tərəfindən zəif islanır, zəif yapışdırılır və hopdurma metodu ilə metal təbəqələrə az yapışırlar [17].

Polimerlərin səthinin dəyişdirilməsi üçün ən perspektivli və müasir metodlardan biri aşağı temperaturlu plazmanın təsiridir. Bu materialların səthinin xüsusiyyətlərini geniş bir şəkildə dəyişdirməyə və istifadə sahələrini əhəmiyyətli dərəcədə genişləndirməyə imkan verir [18]. Ekoloji cəhətdən təmiz müasir plazma-kimyəvi üsullar kimyəvi modifikasiya ilə müqayisədə



131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com

xeyli fayda verir. Polimer materialların plazma-kimyəvi modifikasiya prosesinin ən vacib xüsusiyyəti, yalnız materialın işlənmiş səthi və qalınlığı müxtəlif hesablamalara görə 100Å-dən bir neçə mikrona qədər dəyişən çox incə bir səth qatının dəyişməsidir. Dəyişdirilən materialın mexaniki, fiziki-kimyəvi və elektrofiziki xüsusiyyətlərini qoruyaraq polimerin əsas hissəsi dəyişmir.

Plazmanın polimer səthinə olan təsiri, səth xüsusiyyətlərini dəyişdirməyə imkan verir. Plazmanın təsiri altında polimerlərin [19, 20] yapışma xüsusiyyətlərinin yaxşılaşdırılması yalnız səthi müxtəlif çirkləndiricilərdən təmizləməklə deyil, həm də səthdə müxtəlif kimyəvi hidrofilik qrupların əmələ gəlməsi ilə əlaqələndirilir, modifikasiyanın yüksək yapışma xüsusiyyətlərini təmin edir. Bu cür qütb qruplarının tərkibi, quruluşu və xüsusiyyətləri həm polimerin təbiətindən, həm plazmanın xüsusiyyətlərindən və plazma əmələ gətirən qazın təbiətindən asılıdır. Plazmanın işləyən qazı olaraq oksigen və ya hava istifadə olunursa, oksigen ehtiva edən qütb qrupları (karbonil, alkoqol, peroksid, sadə və mürəkkəb efir, lakton və s.) polimer səthində əmələ gəlir. Ammonyak və ya hidrogenlə qarışıqların istifadəsi halında isə polimer səthində azot ehtiva edən qruplar (amino-, amido-, imido-, imino- və s.) görünür. İşlənmiş materialın səth xüsusiyyətləri qazla qatı interfeysdə baş verən fiziki-kimyəvi proseslər nəticəsində dəyişir:

- köhnə maddənin qırılması və yeni rabitələrin yaranması səbəbindən,
- materialların səthinə digər maddələrin tətbiqi və aşılanması səbəbindən.

Bir materialın səthini dəyişdirərkən iki əks proses baş verir:

- qaz fazasından çökmə yolu ilə bir maddənin bir üzlüyünün meydana gəlməsi,
- materialın səthindən maddələrin çıxarılmasına gətirib çıxaran aşındırma.

Aşındırma, bir materialın çirklənmədən təmizlənməsi və ya səthinə bir aydınlıq vermək üçün səth təbəqələrinin geniş və ya seçilmiş bir hissədən çıxarılması əməliyyatıdır. Aşağı temperaturlu qaz boşalma plazma hissəciklərinin səthə təsirinin fiziki-kimyəvi mexanizminə görə aşındırma prosesləri üç qrupa bölünə bilər:

1. İon təsiri ilə aşındırma. Burada materialların səth təbəqələri yalnız fiziki hopdurma ilə çıxarılır. Aşındırma, işlənən materialla kimyəvi maddələr arasında reaksiya verməyən enerjili qaz ionları (0.1-5.0 keV) ilə aparılır (ümumiyyətlə təsirsiz qazların ionları).
2. Materialların səth təbəqələrinin kimyəvi reaksiyalarla kənarlaşdırıldığı plazma-kimyəvi aşındırma. Reaktiv hissəciklər ilə səth atomları arasında kimyəvi reaksiyalar meydana çıxaraq uçucu məhsullar meydana gətirir.
3. Müəyyən enerjili ionlar ilə həm fiziki hopdurma, həm də reaktiv hissəciklərlə materialların atomları arasında kimyəvi reaksiyalar nəticəsində materialların səth təbəqələrinin götürüldüyü ion-kimyəvi aşındırma.

İon səpilməsində, mənfi potensial tətbiq edildikdə və plazma ionları ilə bombardman edildikdə hədəf materialı təsirsiz qazların plazmasında səpməklə bir örtük əldə edilir.

İon-plazma hopdurulması reaktiv qaz plazmasında bir hədəf səpərək mürəkkəb tərkibli örtüklərdə tətbiq olunur. Bu vəziyyətdə, substratdakı üzlüklər hopdurulan materialın və aktiv qazın (metan, oksigen, azot) kimyəvi qarşılıqlı təsiri nəticəsində əmələ gəlir.

Son illərdə plazmadakı polimerlərin modifikasiyası zamanı baş verən prosesləri öyrənmək məqsədi ilə daha əvvəl istifadə olunmamış bir sıra metodlardan – nüvə maqnetik rezonans metodu (13C NMR), rentgen difraksiyası analizi və səth yükünün dinamik kondensator metodu ilə ölçülməsidən istifadə edilmişdir [21].

Beləliklə, hal hazırda polimerlərin müxtəlif qaz boşalmaları təsiri ilə modifikasiyası zamanı baş verən dəyişikliklərinin müxtəlif metodlarla öyrənilməsi və tətqiq edilməsi məqsədə uyğundur.

---


[1] *Р.Н Мехтизаде.* Электроразрядное модифицирование диэлектрических и композиционных материалов в технологических операциях, Проблемы энергетики, № 2, 2007, УДК 621.315, Институт Физики НАНА

[2] *Д.А. Помогова.* Влияние ультразвукового воздействия на структуру и свойства полиолефиновых смесей, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет пищевых производств» Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук РГУ им. *А.Н. Косыгина*, Москва, 2019г.

[3] *В.Н. Кулезнев, В.К. Гусев.* Основы технологии переработки пластмасс. М.: Химия, 1995. 528с.

[4] *Г.А. Швецов, Д.У. Алимова, М.Д. Барышникова.* Технология переработки пластических масс. М.: Химия, 1988. 512 с.

[5] *М.Л. Кербер и др.* Полимерные композиционные материалы: структура, свойства, технология: учеб. пособие для вузов, под ред. *А.А. Берлина.* СПб.: Профессия, 2009, 560 с.

[6] *К.А. Андрианов.* Синтез и модификация полимеров. М.: Наука, 1976. 223 с

[7] *В.Н. Кестельман.* Физические методы модификации полимерных материалов. М.: Химия, 1980, 224 с.

[8] *Ю.Н. Кахраманлы, Г.С. Мартынова*. Компатибилизаторы для несовместимых полимерных смесей полиамида с полимерами стирола. Современные проблемы химической науки и образования: сб. материалов Всерос. конф. с междунар. участием, посвящённой 75-летию со дня рождения В.В. Кормачева: в 2 т., Т. II. Чебоксары: Изд-во Чувашского университета, 2012, 267с.

[9] *А.А. Тагер*, Физико-химия полимеров. Издание 4-е, переработанное и дополненное. М.: Научный мир, 2007, 576 с.
[10] Новый справочник химика и технолога. Электродные процессы. Химическая кинетика и диффузия. Коллоидная химия. Под ред. *С.А. Симановой*. СПб.: АНО НПО Профессионал, 2004, 838с.
[11] *Ю.С. Зуев.* Стойкость эластомеров в эксплуатационных условиях. М.: Химия, 1986. 264с.
[12] *В.Л. Карпов*. Радиационная химия полимеров. М.: Наука, 1966г, 407с.
[13] *Т.С Никитина, Е.В. Журавская, А.С. Кузьминский*. Действие ионизирующих излучений на полимеры. М.: Госхимиздат. 1959, 102 с.
[14] *Г. Кауш*. Разрушение полимеров. М.: Мир, 1981, 440с.
[15] *В.В. Коршак.* Химия и технология высокомолекулярных соединений. Гетероцепные соединения. М.: Изд–во АН СССР, 1961, 725с.
[16] *А.Б. Пакшвер*. Физико-химические основы технологии химических волокон. М.: Химия. 1972, 432с.
[17] *В.Г. Шевченко*. Основы физики полимерных композиционных материалов. Учебное пособие для студентов по специальности «Композиционные наноматериалы», Москва 2010, МГУ имени М.В. Ломоносова, Кафедра химической технологии и новых материалов.
[18] "Plasma Surface Modification of Polymers. Relevance to Adhesion". Eds. *M. Strobel, C.S.Lyons, K.L. Mittal.* The Netherlands : VSP BV. 1984.
[19] *A.I. Kinloch.* Adhesion and Adhesives. N.Y.: Chapmen and Hall.1987.
[20] Модификация поверхности материалов в плазме газового разряда. http://tersus-i.ru › page›modifikacija-poverhnosti-mat...
[21] *А.Б. Гильман*. Плазмохимическая модификация поверхности полимерных материалов. ГНЦ РФ “Научно–исследовательский физико–химический институт им.Л.Я.Карповава”, potapov@cc.nifhi.ac.ru

**Х.Ф. Алиева, Ф.Ш. Джафарова, Г.А. Мурадова**

## МОДИФИКАЦИЯ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ, ПОДВЕРЖЕННЫХ ВОЗДЕЙСТВИЮ ГАЗОВЫХ РАЗРЯДОВ

В статье обсуждается модификация полимерных материалов под действием газового разряда и используемые в этом случае методы, связанные с наблюдаемыми изменениями. При поиске необходимых материалов с новым комплексом свойств, не всегда целесообразно заново синтезировать новые полимеры. Физическая модификация существующих полимеров, их комбинация с веществами другой природы, другой структуры - это один из перспективных путей решения данной проблемы.

**X.F. Aliyeva, F. Sh. Djafarova, G. A. Muradova**

## MODIFICATION IN POLYMER MATERIALS EXPOSED TO GAS DISCHARGE

The article deals with the modification of polymer materials under the action of a gas discharge, the methods used in this case and the associated changes in polymer materials. Among the various types of technological influence on materials, electrical technology is attain a particular interest: to use directly the energy of the electric (magnet) field transmitted to an object and to activate and change its surface (volume).

*Qəbul olunma tarixi: 29.06.2021*

# *p*-CdTe/*n*-CdZnS ANİZOTİP HETEROKEÇİDİNİN FİZİKİ XASSƏLƏRİ

**E.F. NƏSİROV**
*Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri İnstitutu,*
*Azərbaycan, Bakı, Z. Xəlilov küç., 33.*
elshannasirov@bsu.edu.az

*p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ anizotip heterokeçidinin fiziki xassələrinin tədqiqi aparılmış, düzünə və əks istiqamətdə cərəyankeçmə mexanizmi, o cümlədən I-V xarakteristikası təhlil edilmişdur. Müəyyən olunmuşdur ki, kontakt potensiallar fərqinin volt-farad xarakteristikasından alınan qiyməti volt-amper xarakteristikasından alınan qiymətlərdən kiçikdir və praktiki olaraq tezlikdən asılı deyil. Bu mənzərə Donelli və Milns tərəfindən təklif olunmuş heterokeçidin metallurji sərhədində lokallaşmış elektrik yüklərinin təsirini nəzərə alan model əsasında yaxşı izah olunur. Tədqiq olunan *p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ strukturunun elektrik xassələri, ikiqat ionlaşmış kadmium vakansiyasının və donor tipli aşqarların daxil olduğu $(V^{-2}_{Cd}$ - $D^{+})^{-}$ mürəkkəb defektlərlə təyin olunur.

**Açar sözlər:** Heterokeçid, cərəyankeçmə mexanizmi, VAX, VFX.
**PACS:** 78.20.-e, 73.00.00

## GİRİŞ

Müxtəlif yarımkeçirici birləşmələrin bərk məhlullarının alınması nazik təbəqələrin fiziki xassələrinin və qadağan olunmuş zolağının eninin nəzarət olunan formada idarə olunmasına imkan verir ki, bu da müxtəlif spektral diapazonda işləyən fotoelektrik cihazların hazırlanması baxımından çox aktualdır[ 1-3].

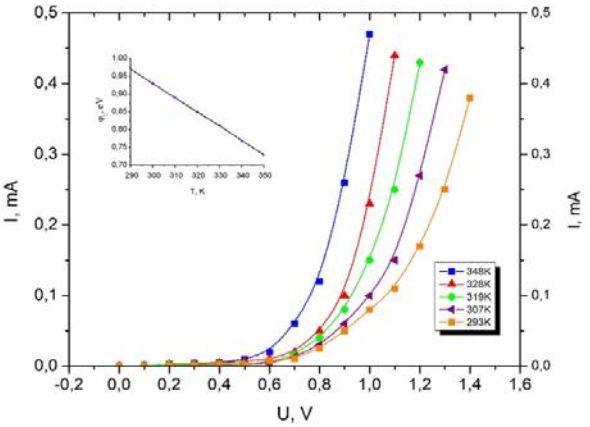
Bununla əlaqədar, tədqiqatçılar $Cd_xZn_{1-x}S$ bərk məhlullarının nazik təbəqələrinin alınması və fiziki xassələrinin öyrənilməsinə xüsusi diqqət yetirirlər [4, 5]. $Cd_xZn_{1-x}S$ bərk məhlullarının tərkibində sinkin miqdarının artması ilə qadağan olunmuş zonanın eni böyüyür ki, bu tip heterokeçidlərin əsasında hazırlanan günəş elementlərinin spektral diapazonunu qısa dalğalar oblastına doğru genişləndirməyə imkan verir. *p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ anizotip heterokeçidinin elektrik xassələrinin tədqiqi aparılmış, düzünə və əks istiqamətdə cərəyankeçmə mexanizmi təhlil olunmuşdur.

## EKSPERİMENT

*p*-tip CdTe təbəqələri məhluldan kimyəvi çökdürmə üsulu ilə alınmışdır. Elektrokimyəvi çökdürülmə prosesi otaq temperaturunda xüsusi kvars qabda silisium lövhələrinin üzərində yerinə yetirilmişdir. $Cd_{1-x}Zn_xS$ nazik təbəqələrinin alınması üçün kimyəvi məhlulun optimal tərkibi aşağıdakı kimi seçilmişdir: 1:12:500 ($1{,}5\div2{,}2\times10^{-3}$ M $Zn(CH_3OOO)_2$, $1{,}5\div2\times10^{-3}$ M $Cd(CH_3OOO)_2$, 0,01÷0,02 M $Na_2S_2O_3$, 1,05 M $NH_4OH$). Alınmış nazik təbəqələrin tərkibi $0\le x\le0{,}5$ diapazonunda dəyişir və ona kimyəvi, termik və rentgen analizləri ilə nəzarət edilir. Müxtəlif nümunələr üçün onların qalınlığı 2 μm-ə bərabərdir. Nazik təbəqələr *n*-tip keçiricilik qabiliyyətinə malikdir. Bu, termo-e.h.q.-nin işarəsinə görə müəyyən edilmişdir.

Nazik təbəqələrin struktur xarakteristikaları Rigaku D/Max-IIIC rentgen difraktometrindən istifadə edilməklə 20÷70 skanlama bucağı diapazonunda müəyyən olunmuşdur. Səthin morfologiyası, nümunənin stexiometriyasının keyfiyyət ölçmələri skanlayıcı elektron mikroskopunun köməyi ilə müəyyən edilmişdir. Nazik təbəqənin strukturu haqqında informasiyanın alınması üçün Rentgen şüalarının difraksiyasının (XRD) şəkilləri təhlil edilmişdir. $Cd_{1-x}Zn_xS$ nazik təbəqəsinin struktur analizi rentgen difraktometrinin köməyi ilə 20÷70 skanlama bucağı diapazonunda aparılmışdır.

Şəkil 1-də anizotip *p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ heterokeçidinin müxtəlif temperaturlarda ölçülmüş *I*(*V*) volt-amper xarakteristikaları verilmişdir. Volt-amper xarakteristikaların xətti hissəsinin gərginlik oxuna ekstrapolyasiyasından $\phi_0$ potensial çəpərin hündürlüyünün qiyməti təyin olunmuşdur. $\phi_0= qV_{bi}$, $V_{bi}$- kontakt potensiallar fərqidir.



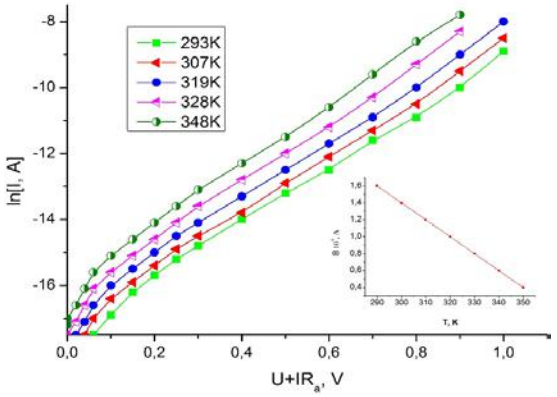

*Şəkil 1.* *p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ heterokeçidinin müxtəlif temperaturlarda düzünə istiqamətdə volt-amper xarakteristikası, K: *1*-293, *2*-307, *3*-319, *4*-328, *5*-348. Əlavədə-potensial çəpərinin hündürlüyünün temperatur asılılığı.

*p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ heterokeçidin potensial çəpərinin hündürlüyünün temperatur asılılığı $\phi_0(T)=\phi_0(0)-\beta_\phi T$ (1) şəkildə ifadə olunur. Burada $\beta_\phi=4{,}23\cdot10^{-3}$eV·K$^{-1}$ potensial çəpərinin hündürlüyünün temperatur əmsalı, $\phi_0(0)=2{,}2$eV isə tədqiq olunan heterokeçidin mütləq sıfır temperaturda potensial çəpərinin hündürlüyünün qiymətidir. Qeyd etmək lazımdır ki, $\beta_\phi$

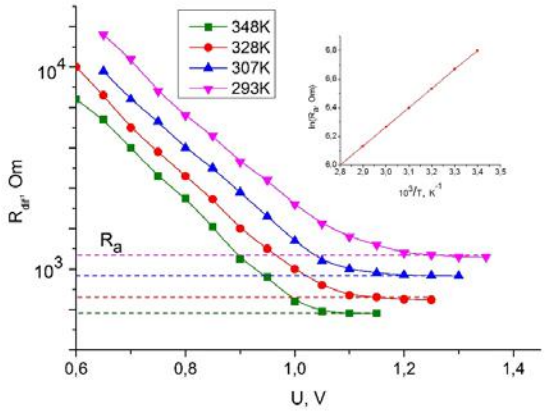


131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com

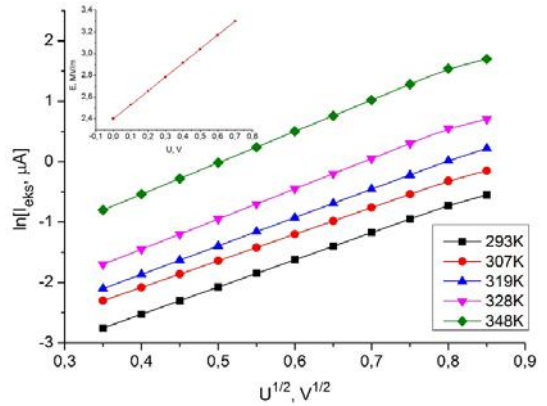
və $\phi_0(0)$ -ın böyük qiymətləri keçid sərhədində səth hallarının $N_{ss}$ konsentrasiyasının yüksək qiyməti ilə bağlıdır. *d*- qəfəs parametrlərin uyğunsuzluğundan yaranan dislokasiyalar arasındakı məsafədir $d=a_{CdTe}a_{CdZnS}/(a_{CdTe}-a_{CdZnS})$. Qəfəs parametrlərinin qiyməti $Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ təbəqələri üçün $a_{CdZnS}$ = 3,36 Å , CdTe təbəqələri üçün $a_{CdTe}$=6,48 Å götürülmüş, $d$=7Å və $N_{ss}$ =2 $10^{14}sm^{-2}$ alınmışdır [ 6].




*Şəkil2. p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ heterokeçidinin BAX-ın müxtəlif temperaturlarda düzünə qolları. *B* əmsalının temperatur asılılığı




*Şəkil3*. $R_{dif}$ differensial müqavimətin müxtəlif tempera turlarda düzünə gərginlikdən asılılığı, K: *1*-293, *2*-307, *3*-328, *4*-348. Əlavədə-heterokeçidin ardıcıl müqavimətinin temperatur asılılığı.




*Şəkil 4. p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ heterokeçidindən müxtəlif temperaturlarda Frenkel-Pul emissiyası. Əlavə diaqram - həcmi yüklər oblastında elektrik sahəsinin intensivliyinin tətbiq olunan gərginlikdən asılılığı

Şəkil 2-də tədqiq olunan heterokeçidin volt-amper xarakteristikası ardıcıl müqavimətin təsirini nəzərə almaqla təsvir olunmuşdur. Göründüyü kimi, yarımloqarifmik koordinatlarda VAX xətti asılılığa tabe olur ki, bu da cərəyanın gərginlikdən asılılığının eksponensial qanunla təsvir olunduğunu göstərir. VAX- xətlərinin meylinin temperaturdan asılı olmadığını və metallurji sərhəddə səth hallarının konsentrasiyasının yüksək qiymətə malik olduğunu nəzərə alaraq, cərəyankeçmədə çoxpilləli tunel-rekombinasiya mexanizminin üstünlük təşkil etdiyini qəbul etmək olar [7]. Bu halda:

$$I = Bexp\{-\alpha[\phi_0(T) - q(V - IR_s)]\}, \quad (1)$$

$\alpha$= 8.1 $eV^{-1}$VAX-ın xətti hissələrinin meylindən tapılır. *B* əmsalı aşağıdakı ifadə ilə təyin olunur:

$$B = exp[lnI_0 + \alpha\phi_0(T)] \quad (2)$$

Burada $lnI_0$ qiymətləri VAX-ın xətti hissələrinin cərəyan oxu ilə kəsişməsindən götürülür (şəkil 3). *B* əmsalının qiyməti temperaturdan zəif asılıdır (şəkil 4). *n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$/*p*-CdTe heterostrukturundan cərəyankeçmə mexanizmi əks gərginlikdə də təhlil olunmuşdur. Analiz göstərir ki, gərginliyin $0.12<|U|<0.7$V əksinə cərəyan $I_{rev}(V)$ Frenkel-Pul emissiyası modeli əsasında yaxşı izah olunur. Bu halda səth halları tərəfindən tutulan yükdaşıyıcıların elektrik sahəsinin təsiri və elektrik sahəsinin köməyi ilə asanlaşan termik həyəcanlanması baş verir. Həcmi yüklər oblastında güclü daxili sahənin olması kontakt potensiallar fərqinin böyük qiyməti ilə təsdiq olunur. ($U_{bi}$=0,97V, T=293K). Asimmetrik heterokeçidin həcmi yüklər oblastında elektrik sahəsinin intensivliyinin tətbiq olunan gərginlikdən asılılığı - $E(V)$ verilmişdir. Heterokeçidin həcmi yüklər oblastında elektrik sahəsinin intensivliyi aşağıdakı ifadəyə görə hesablanmışdır:

$$E = \frac{V_{bi}-V}{W} = \sqrt{\frac{qN_A(V_{bi}-V)}{2\varepsilon\varepsilon_0}} \quad (3)$$

Burada *W*- həcmi yüklər oblastının eni, $\varepsilon_0$ - elektrik sabitidir. Əksinə cərəyanın gərginlikdən asılılığı $I_{rev} = \alpha|V|exp(2\beta\sqrt{|V|/T})$ ifadəsi ilə verilir. Burada $\beta$ –sabit kəmiyyətdir. Əksinə cərəyanın gərginlikdən asılılığının $0{,}12 < |V| < 0{,}7V$ intervalında $\ln(I_{əks}) = f(|V|^{1/2})$ koordinatlarında qurulmuş qrafikləri şəkil 5-də təsvir olunmuşdur. Əksinə istiqamətdə tunel cərəyanının gərginlikdən asılılığı

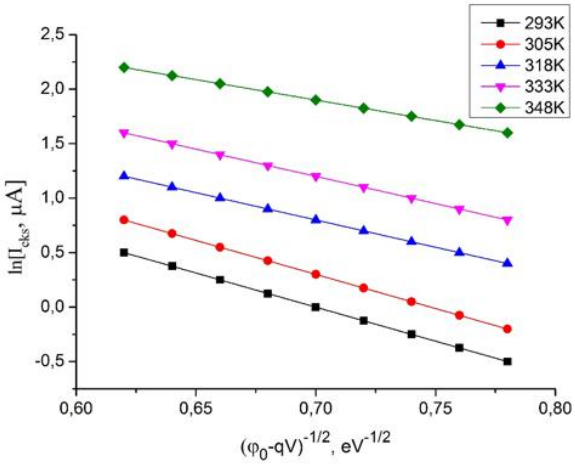
$$I_{rev} \approx a_0 exp\left(\frac{b_0}{\sqrt{\varphi_0(T)-qV^*}}\right) \quad (4)$$

ifadəsi ilə verilir, burada $a_0$ – energetik səviyyələrin dolma ehtimalı ilə təyin olunan parametrdir. $b_0$ -kəmiyyəti cərəyanın gərginlikdən asılı olaraq dəyişmə sürətini təyin edir. Bu tənliyə görə $\ln(I_{rev}) - (\phi_0 - qV)^{-1/2}$ asılılığının $0{,}75 < |U| < 1{,}8V$ intervalda xətti qanuna tabe olması tunel mexanizminin üstünlük təşkil etdiyini göstərir. $\ln(a_0) = f(10^3/T)$ asılılığının meylinə görə

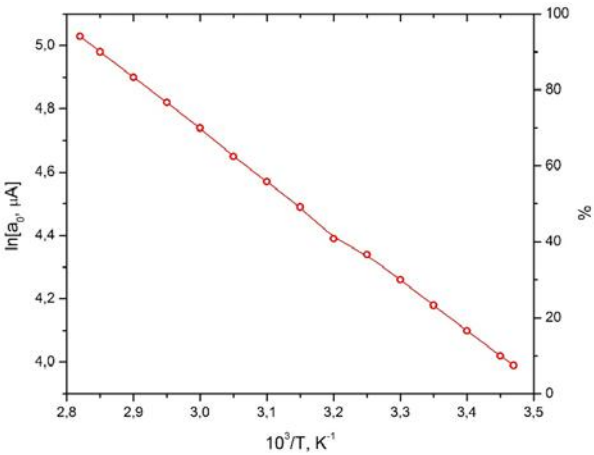
yapışma mərkəzinin energetik dərinliyi təyin olunmuşdur- 0.13eV (şəkil 5).

Qeyd etmək lazımdır ki, səviyyənin energetik dərinliyi üçün tapılmış qiymət tədqiq olunan strukturun ardıcıl müqavimətinin temperatur asılılığından tapılan qiymətlə üst-üstə düşür.

Heterokeçidin $R_{dif}$ differensial müqavimətinin $V$ gərginlikdən asılılığından $R_a$ ardıcıl müavimət təyin olunmuşdur.




*Şəkil5. p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ heterokeçidinin müxtəlif temperaturlarda əks gərginliklərdə tunel cərəyanı, K: *1*-293, *2*-305,*3*-318,*4*-333,5-348.




*Şəkil 6. a₀*-parametrinin temperatur asılılığı.

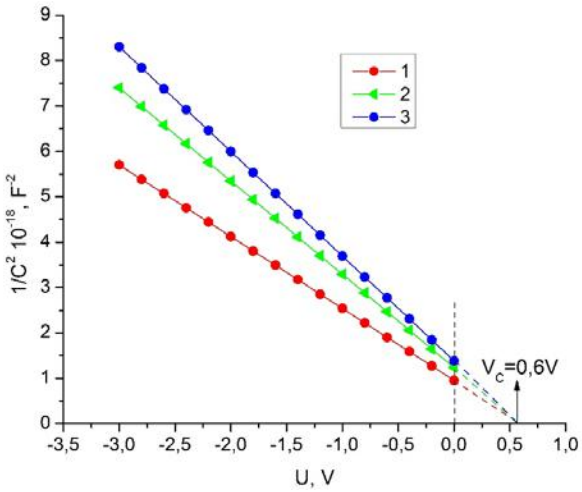
Gərginliyin potensial çəpərin hündürlüyündən böyük qiymətlərində $R_{dif}(V)$ əyriləri doyma halına çatır. Bu, o deməkdir ki, çəpərin təsiri aradan qalxır, heterokeçiddən axan cərəyan ancaq ardıcıl müqavimətlə təyin olunur. Diferensial müqavimətin qiyməti doyma oblastına aid hissələrin ordinat oxuna ekstrapolyasiyası ilə təyin olunur, $\rho$ —xüsusi müqavimət qismən kompensə olunmuş yarımkeçirici üçün belə təyin olunur:

$$\rho = \frac{1}{q\mu_p p} = \frac{1}{q\mu_p N_v[(N_A - N_D)/2N_D]exp(-E_A/kT)}, \quad (5)$$

burada $\mu_p$-deşiklərin yüyrüklüyü, $N_v$-valent zonasında effektiv hal sıxlığı, $N_A$ və $N_D$ -akseptor və donor aşqarlarının konsentrasiyası, $E_A$- akseptor səviyyəsinin ionlama enerjisi tarazlıq keçiriciliyini təyin edir. Ardıcıl müqavimətin temperatur asılılığı $R_a = R_0 \exp(\frac{E_a}{kT})$ eksponensial qanuna tabe olduğundan, yarımloqarifmik koordinatlarda $R_s = f(10^3/T)$ asılılığının qrafikinin meylindən akseptor səviyyəsinin dərinliyi tapılmışdır $E_A = 0.13$ eV.

Tədqiq olunan *n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$/p-CdTe strukturunun elektrik xassələri, ikiqat ionlaşmış kadmium vakansiyasının və donor tipli aşqarların daxil olduğu $(V^{-2}_{Cd} - D^{+})^{-}$ mürəkkəb defektlərlə təyin olunur. [6,7].

Şəkil 7-də $Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$/CdTe heterokeçidinin otaq temperaturunda təsiredici siqnalın müxtəlif tezliklərində volt-farad xarakteristikası (VFX) verilmişdir. Volt-farad xarakteristikası $C^{-2}(V)$ koordinatlarında xətti olması kompensə olunmayan akseptor mərkəzlərinin həcmi yüklər oblastında kəskin paylanmasını göstərir.




*Şəkil 7. p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ heterokeçidinin dəyişən siqnalın 10(*1*), 20(*2*), 30кHs (*3*) tezliklərində volt-farad xarakteristikası

Kontakt potensiallar fərqinin volt-farad xarakteristikasından alınan qiyməti volt-amper xarakteristikasından alınan qiymətlərdən kiçikdir və praktiki olaraq tezlikdən asılı deyil. Bu mənzərə Donelli və Milns tərəfindən təklif olunmuş heterokeçidin metallurji sərhədində lokallaşmış elektrik yüklərinin təsirini nəzərə alan model əsasında yaxşı izah olunur.

$$V_c = V_{bi} - \frac{Q_{ss}^2}{2q(\varepsilon_p N_a + \varepsilon_n N_d)} \quad (6)$$

Burada $Q_{ss} = qN_{ss}$ - keçid sərhədində toplanan yükün miqdarı kontakt potensiallar fərqinin qiymətini azaldır.

## NƏTİCƏ

Həcmi yüklər oblastında güclü daxili sahənin olması kontakt potensiallar fərqinin böyük qiyməti ilə təsdiq olunur. ($U_{bi}$=0,97V, $T$=293K). VAX- xətlərinin meylinin temperaturdan asılı olmadığını və sərhəddə səth hallarının konsentrasiyasının yüksək qiymətə malik olduğunu nəzərə alaraq, cərəyankeçmədə çoxpilləli tunel-rekombinasiya mexanizminin üstünlük təşkil etdiyini qəbul etmək olar. Kontakt potensiallar fərqinin volt-farad xarakteristikasından alınan qiyməti volt-amper xarakteristikasından alınan qiymətlərdən kiçikdir

və praktiki olaraq tezlikdən asılı deyil. Bu mənzərə Donelli və Milns tərəfindən təklif olunmuş heterokeçidin metallurji sərhədində lokallaşmış elektrik yüklərinin təsirini nəzərə alan model əsasında izah olunmuşdur. Beləliklə demək olar ki, tədqiq olunan *p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ strukturunun elektrik xassələri, ikiqat ionlaşmış kadmium vakansiyasının və donor tipli aşqarların daxil olduğu $(V^{-2}_{Cd} - D^{+})^{-}$ mürəkkəb defektlərlə təyin olunur.


[1] *D. Kuciauskas, A. Kanevce, J.N. Duenow, P.Dippo, M. Young, J.V. Li, D.H. Levi, and T.A. Gessert*. Spectrally and time resolved photoluminescence analysis of the CdS/CdTe interface in thin-film photovoltaic solar cells, Appl. Phys. Lett. 102, 2013, 173902.

[2] *G.L. Burton, D.R. Diercks, O.S. Ogedengbe, P.A.R.D. Jayathilaka, M. Edirisooriya, T.H.Myers, K.N. Zaunbrecher, J. Moseley, T.M. Barnes, B.P. Gorman*. Sol. Energy Mat. Sol. Cells., 2018, 182, 68-75.

[3] *B.E. McCandless, W.A. Buchanan, C.P.Thompson, G. Sriramagiri, R.J. Lovelett, J. Duenow, D. Albin, S. Jensen, E. Colegrove, M. Al-Jassim, and W.K. Metzger*. Overcoming Carrier Concentration Limits in Polycrystalline CdTe Thin Films with In Situ Doping, Sci. Rep. 8, 2018, 14519.

[4] *G. Kartopu, A.J. Clayton, W.S.M. Brooks, S.D. Hodgson, V. Barrioz, A. Lamb, S.J.C.Irvine*, Prog. Photovolt. 22, 2014, 18-23.

[5] *W.S.M. Brooks, S.J.C. Irvine, V. Barrioz, and A.J. Clayton*. Sol. Energy Mat. Sol. Cells, 101, 2012, 26-31.

[6] *Y.Y. Proskuryakov, K. Durose, J.D. Major, M.K. Al-Turkestani, V. Barrioz, S.J.C. Irvine, E.W. Jones*. Sol. Energy Mat. Sol. Cells 93, 2009, 1572-1581.

[7] *S.L. Rugen-Hankey, A.J. Clayton, V. Barrioz, G. Kartopu, S.J. C. Irvine, J.D. McGettrick, D.Hammond*. Sol. Energy Mat. Sol. Cells 136, 2015, 213-217.


**E.F. Nasirov**

## PHYSICAL PROPERTIES OF THE p-CdTe/n-CdZnS ANISOTYPE HETEROJUNCTION

The physical properties of the anisotype heterojunction *p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ were investigated, the mechanism of current in the forward and reverse directions, as well as the I–V characteristic were analyzed. It was found that the value of the contact potential difference obtained from the capacitance-voltage characteristic is less than the value obtained from the current-voltage characteristic and is practically independent of frequency. This picture is best explained by the model proposed by Donnelly and Milnes, which takes into account the effect of localized electric charges on the metallurgical boundary of the heteroconductor. The electrical properties of the *p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ structure under study are determined by complex defects, including doubly ionized cadmium vacancies and donor-type additives $(V^{-2}_{Cd} - D^{+})^{-}$.

**Э.Ф. Насиров**

## ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АНИЗОТИПНОГО ГЕТЕРОПЕРЕХОДА p-CdTe/n-CdZnS

Исследованы электрические свойства анизотипного гетеропроводника *p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$, проанализированы механизм тока в прямом и обратном направлениях, а также ВАХ. Было обнаружено, что значение контактной разности потенциалов, полученное из вольт-фарадной характеристики, меньше значения, полученного из вольт-амперной характеристики, и практически не зависит от частоты. Эту картину лучше всего объясняет модель, предложенная Донелли и Милнсом, которая учитывает влияние локализованных электрических зарядов на металлургическую границу гетеропроводника. Электрические свойства исследуемой структуры *p*-CdTe/*n*-$Cd_{0.5}Zn_{0.5}S$ определяются сложными дефектами, включая дважды ионизованные вакансии кадмия и добавки донорного типа $(V^{-2}_{Cd} - D^{+})^{-}$.

*Qəbul olunma tarixi: 07.07.2021*

# YARIMKEÇİRİCİ NANOHİSSƏCİYİN SƏTHİNDƏ QAZ MOLEKULLARININ ADSORBSİYASI

**R.R. HÜSEYNOV, R.Ə. ƏLİZADƏ, V.S. TAĞIYEV, N.B. MUSTAFAYEV**
*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,*
*Azərbaycan, AZ 1143, Bakı şəhəri, H. Cavid pr. 131*
e-mail: alizade_r2@mail.ru

Diffuziya tənliyinin həllindən yarımkeçirici nanohissəciyin səthinə adsorbsiya olunmuş qazın konsentrasiyası hesablanıb. Nanohissəciyin səthində qaz molekullarının sayının nanohissəciyin və qaz molekulunun ölçülərindən asılılıqları qurulub. Nanohissəciyin səthində yığılan qaz kütləsinin zamandan asılılığı hesablanıb. Yarımkeçirici ZnO və $Co_3O_4$ nanohissəciklərinin səthində adsorbsiya layının qalınlığı ilə əmələgəlmə sürəti müqayisə edilir. Səthində qaz kütləsinin yığılma sürəti daha yüksək olduğundan, ZnO nanohissəciyi ətrafdakı qazları daha tez adsorbsiya edir və buna görə də qaz detektoru düzəldilməsi üçün daha perspektivli görünür.

**Açar sözlər**: yarımkeçirici nanohissəciklər, qaz adsorbsiyası, adsorbsiya layının qalınlığı, qaz kütləsinin səthdə akkumulyasiyası.
**UOT**:537.222.22; 543.51; 54-183.544.723

## 1. GİRİŞ

Yarımkeçirici nanohissəciklərdən hal-hazırda qaz detektorları yaratmaq üçün geniş istifadə edirlir [1,2]. Ətraf mühit qazlarının bu sistemlər vasitəsilə detektəetmə metodu qaz adsorbsiyası zamanı sistemin elektrik keçiriciliyinin özünəməxsus bir şəkildə dəyişməsinə əsaslanır, bu da adsorbsiya olunan qaz molekullarının sayından, nanohissəciklərin ölçüsü ilə konsentrasiyasından, yarımkeçirici materialın növündən və digər amillərdən asılıdır. Yarımkeçirici nanohissəciklər əsasında hazırlanan qaz detektorları çox həssasdır və onların istehsalı iqtisadi cəhətdən sərfəlidir.

Bu məqalədə nanohissəciklərin səthində qaz molekullarının adsorbsiya prosesi diffuziya tənliyindən istifadə etməklə tədqiq edilmişdir. Adsorbsiya olunmuş qaz təbəqəsinin qalınlığı və yaranma sürəti üçün zamandan, ətraf mühitdəki qazın konsentrasiyasından, qazın molekulyar kütləsindən, nanohissəciklərin konsentrasiyası ilə ölçülərindən asılılıqlar hesablanmışdır. Məsələ ədədi həll edildiyindən, məqalədə yalnız əsas tənliklərin ifadələri verilmişdir.

## 2. MƏSƏLƏNİN ƏSAS TƏNLİKLƏRİ

Yarımkeçirici nanohissəciyin səthində qazın adsorbsiyası prosesinə səthdə qaz konsentrasiyasının dəyişməsi kimi baxmaq olar. Hesab edək ki, səthə adsorbsiya olunan qazın konsentrasiyası dəyişdikdə ətraf mühitdə qaz konsentrasiyası dəyişmir, nanohissəcikdən qaz molekullarının desorbsiyası və qaz molekulları ilə nanohissəcik arasında kimyəvi reaksiya mövcud deyil. Adsorbsiya olunan qaz konsentrasiyasının zamandan asılı olaraq dəyişməsini

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\nabla^2 n - K n \qquad (1)$$

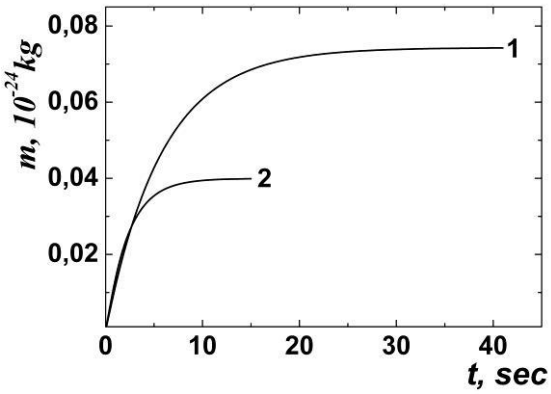
diffuziya tənliyi vasitəsilə təsvir edək. Burada $n$ – adsorbsiya olunan qazın konsentrasiyası, $D$ və $K$ isə müvafiq olaraq qazın diffuziya və kimyəvi reaksiya sabitləridir. Onların qiymətləri [3]-də verilib. Hesab etsək ki, sistem simmetrikdir, adsorbsiya bütün istiqamətlərdə eynidir, onda (1) tənliyini sferik koordinat sistemində həll edə bilərik.

Adsorbsiya nəticəsində nanohissəcikdə yığılan qazın miqdarı aşağıdakı münasibətdən təyin oluna bilər:

$$\frac{1}{V}\frac{dm}{dt} = K n \qquad (2)$$

Burada $m=\rho V$ – yığılan qazın kütləsi, $\rho$ – qazın sıxlığı, $V \approx 4\pi R_0^2 d$ – nanohissəciyin səthində yığılan qaz layının həcmi, $R_0$ – nanohissəciyin radiusu, $d$ isə qaz layının qalınlığıdır.

Şəkil 1-də ölçüsü 20 nm olan ZnO və $Co_3O_4$ yarımkeçirici nanohissəciyin səthində yığılan qaz kütləsinin zamandan asılılığı göstərilib. Bu asılılıq (1) və (2) tənliklərinin ədədi həlli nəticəsində qurulmuşdur. Şəkil 1-dən göründüyü kimi, müəyyən bir müddətdən sonra qaz kütləsinin akkumulyasiyası dayanır və o öz maksimum qiymətinə çatır.




*Şəkil 1.* Ölçüsü 20 nm olan ZnO (əyri 1) və $Co_3O_4$ (əyri 2) yarımkeçirici nanohissəciklərin səthində yığılan qaz kütləsinin zamandan asılılığı.

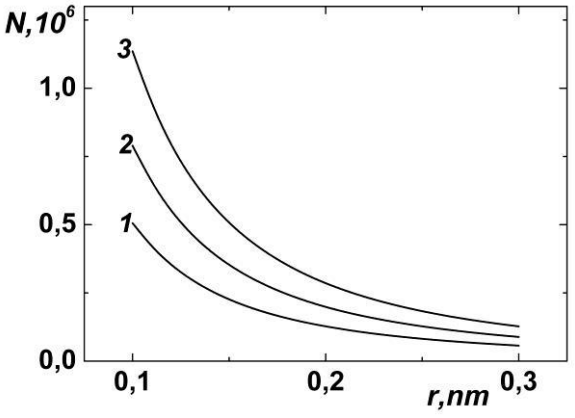
Adsorbsiya nəticəsində nanohissəciyin səthində yığılan qaz layının kütləsi həm də $m=m_0N$ kimi təyin



131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com

edilə bilər (burada $m_0$ – qaz molekulunun kütləsi, $N$ isə nanohissəciyin səthində olan qaz molekullarının sayıdır). Şəkil 2-də radiusu 40 nm (əyri 1), 50 nm (əyri 2) və 60 nm (əyri 3) olan nanohissəciyin səthində qaz molekullarının sayının qaz molekulunun radiusundan hesablanmış asılılığı göstərilib. Qaz molekullarının ölçüləri [4]-də verilib.

Baxdığımız halda qaz molekulları nanohissəciyin bütün səthini doldurur. Lakin, əslində, nanohissəciyin səthi qaz molekulları ilə qismən dolur. Səthin doldurma əmsalı ($\theta$) qaz molekulları arasında və qaz molekulu ilə nanohissəcik arasında qarşılıqlı təsir enerjisindən asılıdır. Qaz molekulları arasında qarşılıqlı təsir enerjisi mühitin temperaturu, təzyiqi və qaz molekullarının xassələrindən asılıdır. Qaz molekulu ilə nanohissəcik arasında qarşılıqlı təsir enerjisi, nanohissəciyin ölçüsündən, elektrik dipol momentindən, qaz molekulu ilə nanohissəcik arasındakı qarşılıqlı təsir potensialının növündən və s. asılıdır.




*Şəkil 2*. Radiusu 40 nm (əyri 1), 50 nm (əyri 2) və 60nm (əyri 3) olan nanohissəciyin səthində qaz molekullarının $N$ sayının qaz molekulunun $r$ radiusundan asılılığı.

## 3. NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

Nanohissəciyin səthində adsorbsiya olunmuş qaz molekullarının sayı onların səthdə qablaşma növündən asılıdır. Nəzəri düsturlar adsorbsiya olunmuş qaz molekullarının sayını və yığılmış qaz kütləsini təyin etməyə imkan verir. Nanohissəciyin səthində yığılan qaz kütlənin hesablanmış və təcrübədən əldə edilmiş qiymətlərinin müqayisəsindən səthdə qaz molekullarının qablaşma növünü təyin etmək mümkündür.

Adsorbsiya layının yaranma mexanizmi ətraf mühitdəki qaz molekullarının nanohissəciyə diffuziyasıdır. Qaz adsorbsiyası, yarımkeçirici nanohissəciyin səthində qaz konsentrasiyası nanohissəciklə mühit arasındakı tarazlıq qiymətinə çatana qədər baş verir. Adsorbsiya layı bir neçə mərhələdə əmələ gəlir. Adsorbsiyanın birinci mərhələsində qaz molekulları nanohissəciyin səthini qismən doldurur və birinci təbəqə əmələ gəlir. İkinci mərhələdə qaz molekullarının birinci təbəqədəki molekulunun üstünə çökməsi nəticəsində ikinci təbəqə əmələ gəlir. Üçüncü mərhələdə birinci təbəqənin dolması davam edir və birinci təbəqə maksimuma qədər dolur (doldurma əmsalı $\theta_1$=1). Dördüncü mərhələdə qaz molekulları birinci təbəqədə molekulların yaratdığı boşluqlarda yerləşir.

Adsorbsiya layı, əsasən, sıx qablaşma quruluşuna malikdir. Təbəqə sayının müəyyən bir qiymətindən başlayaraq adsorbsiya layında qaz molekullarının qablaşması nizamsız olur. Sadə hesablamalara görə birinci, ikinci, üçüncü və sonrakı təbəqələr üçün doldurma əmsalının qiymətləri fərqlənməlidir: $\theta_1 > \theta_2 > \theta_3 > ... > \theta n$. Bu, təbəqə sayının müəyyən bir qiymətindən sonra nizamsız bir quruluşun meydana gəlməsini izah edir.

Adsorbsiya təbəqələrinin sayı nanohissəciyin ölçüsü ilə artır. Adsorbsiya təbəqələrinin sayı artdıqca qaz detektorunun işləmə effektivliyi azalır. Bundan əlavə, adsorbsiya layının qalınlığı yarımkeçirici nanohissəciyin növündən asılıdır. Məsələn, sink oksid (ZnO) *n*-tip, kobalt oksid ($Co_3O_4$) isə *p*-tip yarımkeçiricidir. ZnO ilə müqayisədə, $Co_3O_4$ nanohissəciyin səthində adsorbsiya olunmuş qaz layının qalınlığı daha az olur. Bu baxımdan, $Co_3O_4$ nanohissəcikləri əsasında qaz detektorlarının düzəldilməsi daha məqsədəuyğun görünür. Lakin $Co_3O_4$ ilə müqayisədə, ZnO nanohissəciyin səthində qaz kütləsinin yığılma sürəti daha yüksəkdir. Bu o deməkdir ki, ZnO nanohissəcikləri ətrafdakı qazları daha tez adsorbsiya, yəni detektə edəcəklər. Onlar CO, $H_2$, $NH_3$, $C_2H_5OH$ və $H_2S$ kimi toksik və tezalışan qazların aşkarlanması üçün çox perspektivli görünür. Ona görə də, effektiv və həssas qaz detektorları düzəltməkdən ötrü, adsorbsiya layının optimal qalınlığını və yarımkeçirici nanohissəciklərin səthində adsorbsiya layının əmələgəlmə sürətinin maksimum qiymətini təyin etmək lazımdır.

Nanohissəciklərin səthində adsorbsiya olunmuş qaz layının qalınlığı ilə əmələgəlmə sürəti, onların ətraf mühitdəki qazın konsentrasiyası və temperaturundan, habelə adsorbentin ölçüsündən asılılığı yarımkeçirici nanohissəciklər əsasında qaz detektorlarının yaradılması baxımından böyük maraq kəsb edir.

[1] *М.Н.Румянцева,В.В.Коваленко, А.М.Гаськов, Т.Панье*. Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева), 2007, т. LI, №. 6, с.61-70.

[2] *L.I. Trakhtenberg, G.N. Gerasimov, V.F.Gromov, T.V.Belysheva, O.J. Ilegbusi*. Journal of Materials Science Research, 2012, v.1, N. 2, pp.56-68.

[3] Курс физической химии. т. 2. Под ред. *Я.И.Герасимова*, М.: Химия, 1973, 624 с.

[4] *В.М. Рамм*. Адсорбция газов. М.: Химия, 1976, 656 с.

**R.R. Guseinov, R.A. Alizade, V.S. Tagiyev, N.B. Mustafayev**

## ADSORPTION OF GAS MOLECULES ON THE SURFACE OF SEMICONDUCTOR NANOPARTICLE

From the solution of diffusion equation, the concentration of the gas adsorbed on the semiconductor nanoparticle surface has been calculated. Dependences of the number of adsorbed gas molecules on sizes of the nanoparticle and gas molecule are given. The time dependence of the gas mass accumulated on the nanoparticle surface has been calculated. The thickness and the rate of formation of adsorption layer on the surface of ZnO and $Co_3O_4$ semiconductor nanoparticles are compared. Since the rate of accumulation of the gas mass on the ZnO nanoparticle surface is higher, it adsorbs ambient gases faster, and therefore is more promising as a gas-sensing material.

**Р.Р. Гусейнов, Р.А. Ализаде, В.С. Тагиев, Н.Б. Мустафаев**

## АДСОРБЦИЯ МОЛЕКУЛ ГАЗА НА ПОВЕРХНОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ НАНОЧАСТИЦЫ

На основе решения уравнения диффузии была рассчитана концентрация газа, адсорбированного на поверхность полупроводниковой наночастицы. Построена зависимость количества молекул газа на поверхности наночастицы от размеров наночастицы и молекулы газа. Рассчитана временная зависимость массы газа, аккумулированной на поверхности наночастицы. Сравниваются толщины и скорость образования адсорбционного слоя на поверхности полупроводниковых наночастиц ZnO и $Co_3O_4$. Поскольку скорость накопления массы газа на поверхности наночастицы ZnO выше, она быстрее адсорбирует окружающие газы, и поэтому является более перспективным материалом для создания газовых детекторов.

*Qəbul olunma tarixi: 07.07.2021*

# ELEKTRİK SAHƏSİNİN TƏSİRİ İLƏ POLİETİLEN+NANOGİL NANOKOMPOZİTLƏRDƏ BAŞ VERƏN MOLEKULYAR PROSESLƏR

**A.R. SADIQOVA, A.Ə. HADIYEVA, P.B. ƏSİLBƏYLİ**
*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,*
*AZ1143, Bakı, Azərbaycan, H. Cavid prospekti, 131*
*e-mail:* arzu-sadigova@mail.ru

**E.S. SƏFİYEV**
*Azərbaycan Dövlət Neft ve Sənaye Üniversiteti, AZ1010, Azadlıq prosp., 20*
*e-mail:* el_safi@hotmail.com

Polietilen (PE) və onun əsasında hazırlanan nanogil (NG) əlavəli nanokompozitlərin elektrik sahəsinin təsirindn sonra quruluşda baş verən dəyişikliklər tədqiq edilmişdir. Göstərilmişdir ki, elektrik sahəsinin təsirindən sonra makromolekulların qırılması zamanı *C=C* qrupları yaranır. Makromolekulların qırılması molekulyar çəkinin azalmasına səbəb olur. Nanokompozitdə yaranan *C=C* qrupların və molekulyar çəkinin azalma sürəti PE-yə nisbətən daha azdır.

**Açar sözlər:** nanogil, nanokompozit, elektrik sahəsi, *C=C* qrup.
**PACS:** 81.05Rm

## GİRİŞ

Polimer və polimer kompozitlərin ən mühüm quruluş xüsusiyyətlərindən biri molekuldaxili və molekullararası qarşılıqlı təsirin müxtəlifliyinə görə tətbiq olunan mexaniki yükə və elektrik sahəsinə qarşı anizotropik xassəyə malik olmasıdır. Anizotropluq adətən çoxlu sayda olan lokal mərkəzlərdə mexaniki yüklənmə və həmin bölgəyə elektrik sahəsinin təsir etməsi ilə baş verir ki, bu da ümumilikdə nümunəyə tətbiq olunan mexaniki yükün və elektrik sahəsinin orta qiymətindən qat-qat çox olur. Polimer kompozit materialların fiziki xassələrinin öyrənilməsi onların alınma texnologiyasında və tətbiqində optimal xassəyə malik olan nümunələrin seçilməsinə kömək edə bilər. Məlumdur ki, kristallaşmanın temperatur zaman asılılığı, termik və elektrik işləmələri, daxil edilən əlavələrin növləri və konsentrasiyası, xarici amillərin (şüalanma, elektrik boşalması və elektrik sahəsi, mexaniki yük, temperatur və s.) birbaşa və əvvəlcədən (köhnəlmə) təsiri polimer kompozit maddələrin fiziki, mexaniki, elektrofiziki xassələrini dəyişdirir. Həmçinin, kiçik molekullu və nanohissəcik əlavələrlə alınan kompozitlərin aşağı və yuxarı temperatur aralıqlarında istilik xassələrini öyrənməklə onun daxili quruluşu haqqında məlumat almaq olar.

Araşdırmalarda [1-5] polioefinlər əsasında NG əlavəli nanokompozitlərin mexaniki və elektrik parçalanmasında nanogilin roluna baxılmışdır. Xarici amillərin təsiri ilə fiziki xassələrdə baş verən dəyişikliklər göstərdi ki, polimer və nanokompozitlərdə parçalanma kimyəvi rabitələrin qırılması ilə başlayır. Kimyəvi rabitələrin qırılmasını öyrənmək üçün birbaşa ölçmə metodlarının nəticələrindən istifadə edə bilərik.

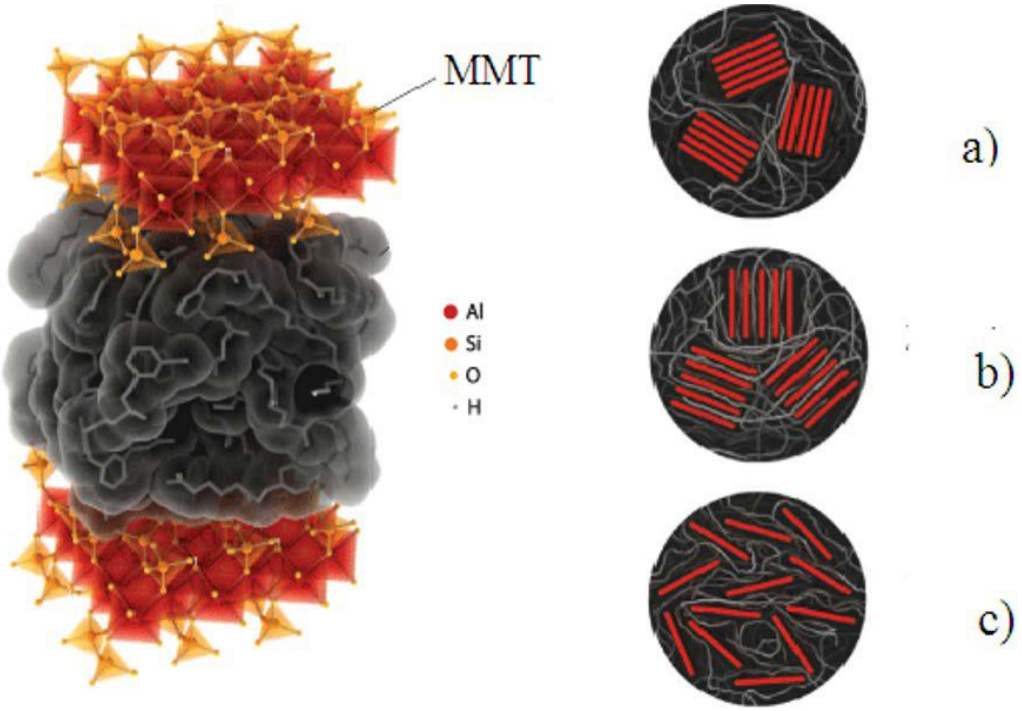
Araşdırdığımız bu işdə elektrik sahəsinin təsirindən sonra PE əsaslı NG əlavəli nanokompozitlərin fiziki xassələrini öyrənməklə NG-in köhnəlmədən sonra destruksiya prosesində rolunu tədqiq edəcəyik. Bunları nəzərə alaraq nanokompozitlərdə elektrik sahəsinin təsirindən sonra quruluşda baş verə biləcək dəyişiklikləri infraqırmızı (İQ) spektroskopi, viskozimetri və diferensial termik analizi (DTA) metodu ilə araşdırılacaqdır.

## NÜMUNƏLƏRİN HAZIRLANMASI VƏ ÖLÇMƏ METODLARI

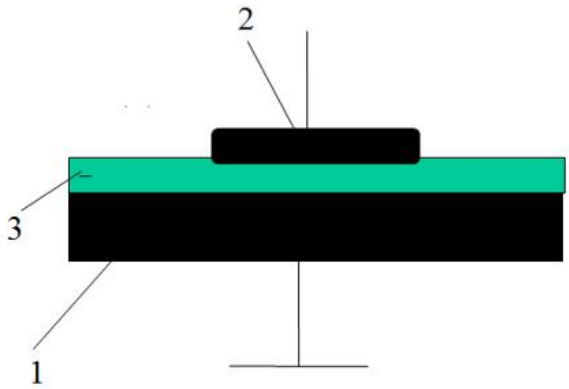
NG müxtəlif faizlərdə (1,0, 2,0, 3,0 4,0; 6,0; 8,0; 10,0 %) toz şəklində polietiləndə mexaniki qarışdırıldıqdan sonra, qaynar presləmə üsulu ilə (418 K, 15MPa, 10 dəq.) nazik (50-70 mkm) nümunələr əldə edilmişdir. Hər ikisi toz şəklində və sıxlıqları bir-birinə yaxın olduğundan bircinsli qarışıq alınır. NG olaraq istifadə olunan əlavə montmorillonitli (MM) təbəqəli silikatlardır və bu təbəqələrin ölçüləri təxmini olaraq: uzunluğu 200 nm, eni isə 1nm-dir [6]. Təbəqələrin mərkəzində Al, Mg və Fe atomları yerləşir və onlar $SiO_2$ təbəqəsi ilə əhatə olunmuşdur. Bu cür quruluşa malik gilin daxilində elektrostatik tarazlığın pozulması artır və təbəqənin xaricində mənfi yüklü zərrəciklərin artması gözlənilir. $Na^+$, $Ca^+$ absorbsiyası ilə mənfi yüklü hissəciklər neytrallaşdırılır. MM hissəciklərinin belə müstəvi şəklində olması bu təbəqələrin bir-biri üzərinə düzülərək polimer matrisası ilə lay-lay təbəqəli quruluş yaratmasına gətirir.

Giannelisin [7] apardığı təcrübələrə görə nanokompozit alınması üç mərhələdə olur (şəkil 1). 1-ci mərhələdə (a) taktoid meydana gəlir: polimer zəncirləri gilin aqlomeratlarını xarici tərəfdən örtürlər. 2-ci mərhələdə (b) zəncir seqmentləri gilin təbəqələri arasındakı boşluqlara daxil olmaqla təbəqələrin 2-3 nm aralanmasına səbəb olurlar, 3-cü mərhələdə (c) gil təbəqələrinin bir-birindən nisbətən uzaqlaşması və təbəqələrin nizamsız düzülüşü (dezorientasiyası) başlayır, təbəqələr tamamən ayrılırlar. Polimer içində NG-in bərabər paylanması nanokompozitin quruluşunun qüsursuz olduğunu göstərir.

PE və NG əsasında alınmış nanokompozitin elektrik sahəsində köhnəldilməsi şəkil 2-də sxematik olaraq təsvir edilmiş sınaq özəyində aparılmışdır.




Şəkil 1. «Polimer-təbəqəli silikat» kompozitlərin üç növü a) taktoidin meydana gəlməsi; b) zəncir seqmentlərin gilin təbəqələri arasına daxil olması nəticəsində təbəqələrin aralanması; c) təbəqələrin nizamsız düzülüşü.




*Şəkil 2.* Sınaq özəyi: 1- yerlə birləşdirilmiş elektrod; 2- yüksək gərginlikli elektrod; 3- tədqiq olunan nümunə

Nümunələr elektrik sahəsi intensivliyinin $2{,}5\cdot10^7$V/m qiymətində $t$=5; 10; 20; 40; 60 saat müddətində otaq temperaturunda köhnəldilmişdir. Köhnəldilmiş nümunələrin molekullarının rəqsi spektrini almağa imkan verən İQ spektroskopiya metodu $\lambda$=2,5-25 mkm (4000-400 $sm^{-1}$) dalğa uzunluqlu infraqırmızı oblastda maddənin elektromaqnit şüalanmasının sahəsi ilə qarşılıqlı təsirinə əsaslanmışdır. Tədqiq olunan nümunələrin molekulyar çəkisi (MÇ) viskozimetrik metodla istilik destruktiv xassələri OD-102 markalı MOM derivatoqraf cihazı ilə ölçülmüşdür.

## TƏCRÜBİ NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN İZAHI

NG-in PE-nin mexaniki və elektrik möhkəmliyinə təsiri əvvəlki araşdırmalarımızda tədqiq edilmişdir [4, 5]. Göstərilmişdir ki, NG elektrik möhkəmliyini azaldır, mexaniki möhkəmlik isə NG-in miqdarından asılı olaraq əvvəlcə artır, sonra azalır. PE və NG nanokompozitləri elektrik sahəsində köhnəldildikdən sonra, quruluşda baş verə biləcək dəyişiklikləri öyrənməklə, parçalanma mexanizmi haqqında fikir söyləyə bilərik. Şəkil 2-də göstərilən qurğu ilə nümunələr elektrik sahəsində ($E_{köh.}$=$2{,}5\cdot10^7$ V/m) müxtəlif zamanlarda köhnəldilir. $E_{köh.}$-nin bu qiyməti deşilmə sahəsindən ($E_{deş.}$=$5.5\cdot10^7$ V/m) kiçik götürülür.

Şəkil 3-də PE və PE+3,0 % NG nanokompozitin elektrik sahəsinin 20 saat təsirindən sonra İQ udulma spektrləri göstərilmişdir.

Spektrlərdən 1640 $sm^{-1}$ dalğa uzunluğuna uyğun gələn $C=C$ qrupunun optik sıxlığı ($D$) hesablanaraq elektrik sahəsinin təsir müddətindən aılılığı şəkil 4-də verilmişdir.

$C=C$ qrupunun optik sıxlığı köhnəlmə zamanından asılı olaraq artır. Sahənin dağıdıcı təsiri ilə makromolekulları əmələ gətirən atomlararası kimyəvi rabitələrdə qırılmalar baş verir. $t$ artdıqca PE-nin $D$-si nanokompozitə nisbətən daha sürətlə artır. Elektrik sahəsinin təsirindən sonra $C=C$ ikiqat (cüt) rabitənin yaranmasına səbəb makromolekullarda baş verən qopmaların nəticəsidir [2]. Makromolekulların qopması ilə $C=C$ qrupunun yaranması molekulyar çəkinin (MÇ)-nin azalmasına səbəb olmalıdır. Şəkil 4-də MÇ-nin $t$-dən asılılığı göstərilmişdir. MÇ həm PE-də, həm də nanokompozitdə $t$-dən asılı olaraq azalır, PE-də azalma daha sürətlə baş verir. MÇ-nin və $D$-nin $t$-dən asılı olaraq dəyişməsi tərs mütənasibdir.

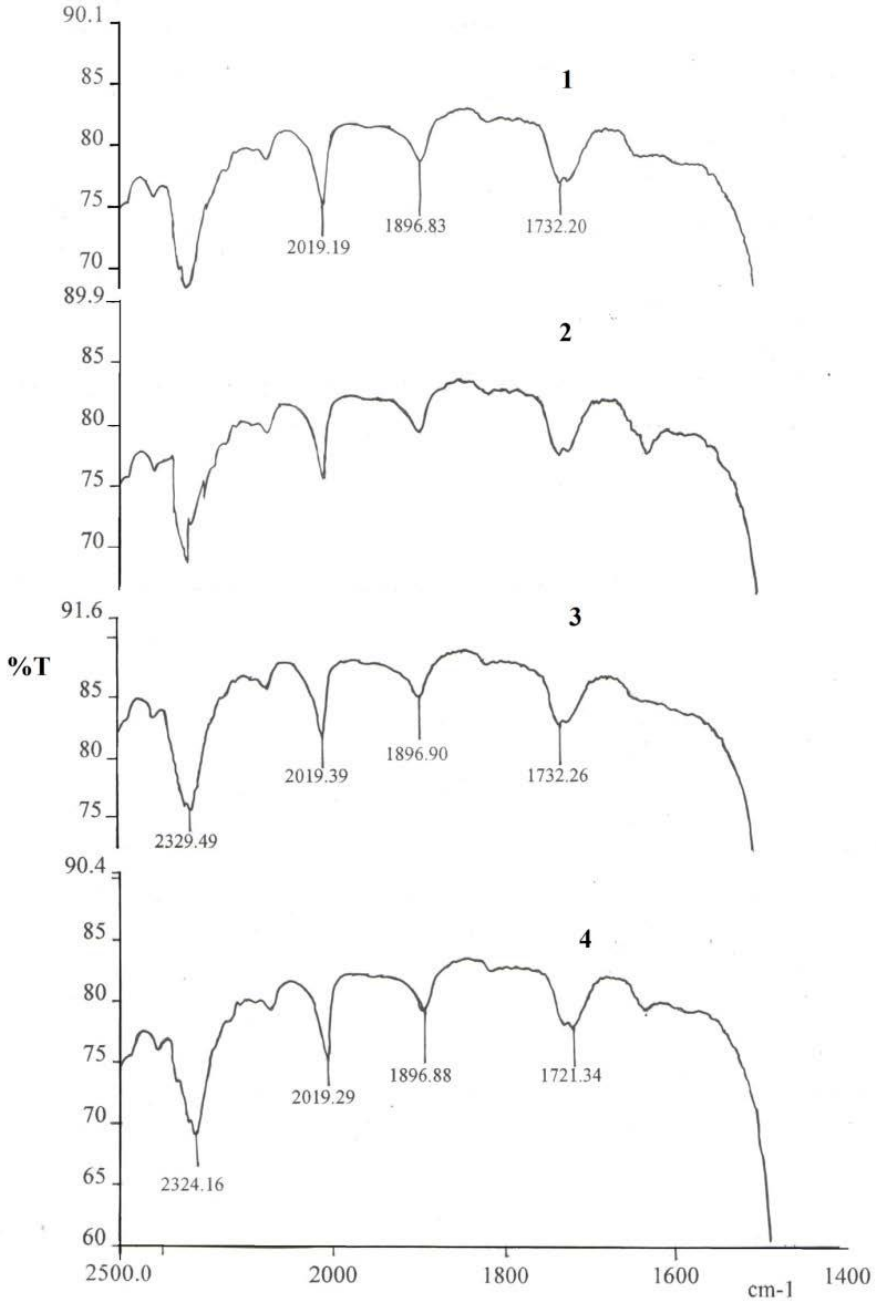
Qeyd etmək lazımdır ki, [8] əsasən eıektrik sahəsinin təsiri ilə PE zəncirini təşkil edən metilen qrupu hidrogeni itirdikdə belə bir radikal əmələ gəlir:

$$\sim CH_2 - \dot{C}H - CH_2 - - - CH_2 \sim$$

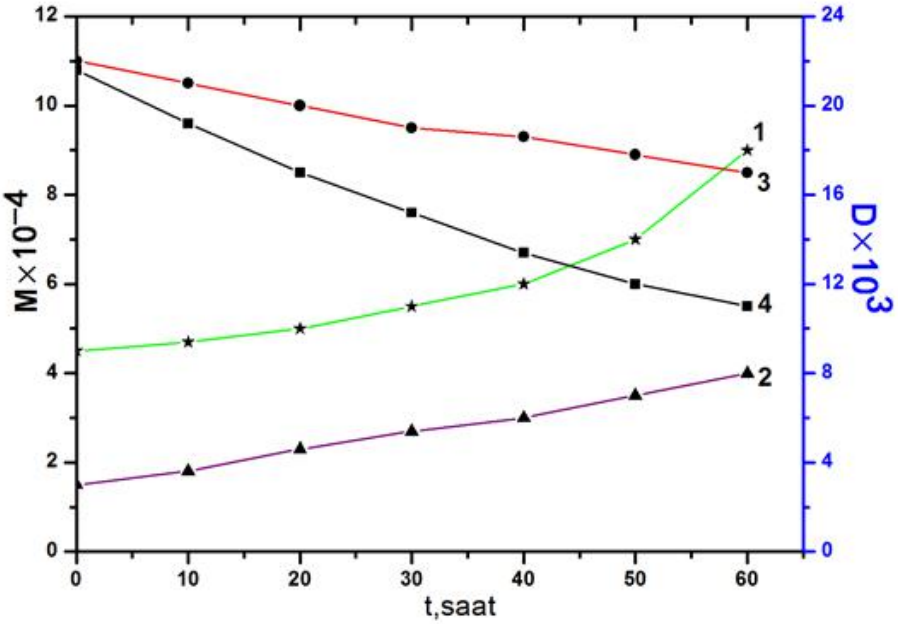
Radikala aid olan elektrona ən yaxın rabitədə (qırıq xətlərlə göstərilmişdir) qırılmanın aktivasiya enerjisi *C-C* -yə nisbətən 100 kC/mol az olur. ($E_{c\text{-}c}$ =335 kC/mol). Qırılmanın aktivləşmə enerjisinin əhəmiyyətli dərəcədə azalmasının səbəbi qonşu karbon atomlarının valent elektronu ilə radikalın doymamış elektronu arasındakı güclü qarşılıqlı təsirin nəticəsidir. Xarici amillərin (elektrik sahəsi, mexaniki yük və s.) təsiri ilə makromolekulda radikala ən yaxın *C-C* rabitənin qırılmasının aktivləşmə enerjisinin azalması nəticəsində istilik fluktuasiyası kimyəvi rabitənin qırılması üçün şərait yaradır və rabitə qırılır:

$$\sim CH_2 - \dot{C}H - \dot{C}H_2 + \dot{C}H_2 \sim \rightarrow CH_2 - CH = CH_2 + \dot{C}H_2$$

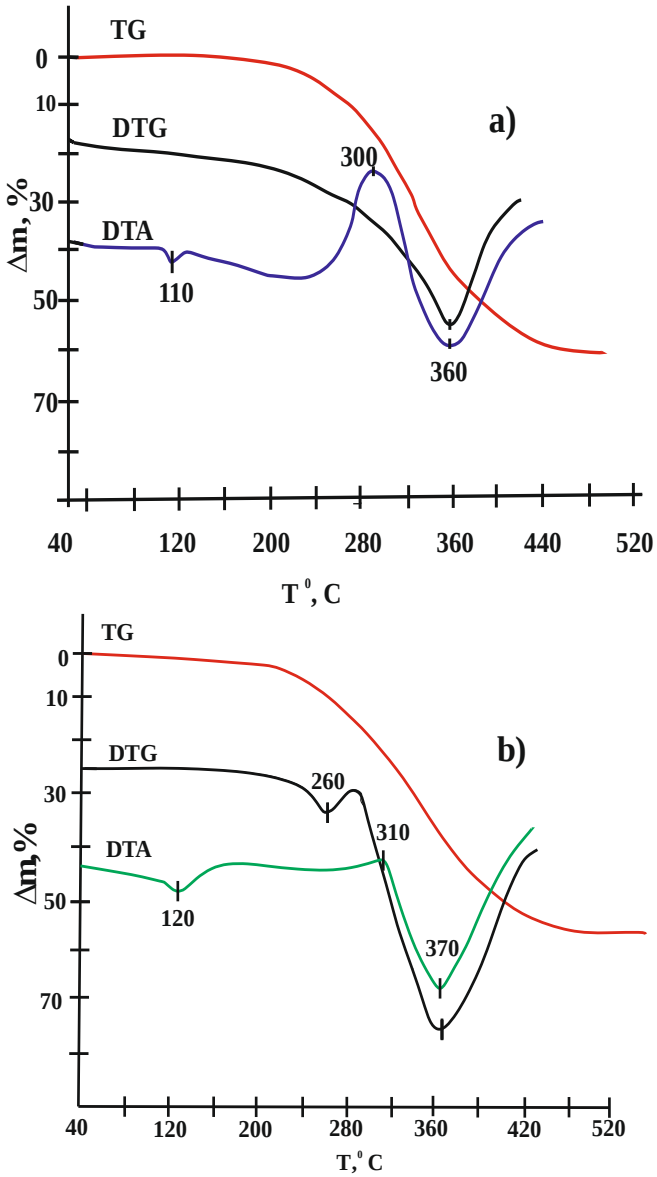
Elektrik sahəsinin təsir müddəti artdıqca *C=C* qrupunun konsentrasiyası artır. Mürəkkəb quruluşa malik olan polimerlər üçün zəncirin qırılması hesabına müxtəlif radikallar əmələ gəlir. Karbon zəncirli polimerlərdə $(\dot{C}R_1R_2{-}\dot{C}H_2{-})_n$ $R_1$ və $R_2$ müxtəlif yan qruplardır (H,OH, $CH_3$, COOH, $COOOH_3$ və s). Makromolekulların qırılması nəticəsində iki cür radikal yarana bilər: $-CH_2{-}\dot{C}R_1R_2$ və ya $-\dot{C}R_1R_2{-}\dot{C}H_2$.



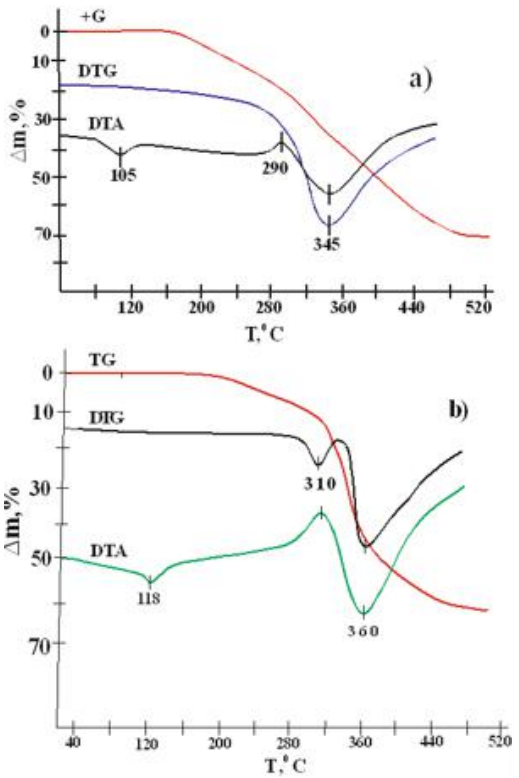

*Şəkil 3.* PE və PE+3,0% NG nanokompozitin İQ spektrləri: 1,2~saf PE; 3,4~PE+3,0% NG; 1,3~*E*=0 (*t*=0); 2,4~ *E*=2,5 ·$10^7$ V/m (*t*=20 saat)




*Şəkil 4.* Optik sıxlıq (*D*) və molekulyar çəkinin (*M*) elektrik sahəsinin təsir müddətindən asılılığı: 1,2 ~*D*; 3,4 ~*M*; 1,4~saf PE; 2,3~PE+3,0% NG




*Şəkil 5.* Elektrik sahəsinin təsiri olmadan termik spektrlər: a) saf PE; b) PE+3,0% NG




*Şəkil 6.* Elektrik sahəsinin təsirindən sonra termik spektrlər: a) saf PE; b) PE+3,0% NG $E$=2,5·10$^7$V/m, $t$=20 saat

Şəkil 4-dən göründüyü kimi, makromolekulda radikalın hesabına əmələ gələn $C=C$ qrupun konsentrasiyası köhnəlmə zamanından asılı olaraq artır. Makromolekul cüt rabitələrin ($C=C$) yaranması hesabına bir neçə hissəyə bölünərsə, oynaq zəncir uclarının sayı və molekulyar hərəkətlilik artar. Bu isə, öz növbəsində köhnəlmə zamanından asılı olaraq mexaniki möhkəmliyin azalmasına gətirər.

Aşağı və yuxarı temperatur aralıqlarında nanokompozitlərin istilik xassələrini öyrənməklə əlavənin xassələri necə dəyişdiyinə və köhnəlmədən sonra istilik – destruksiya prosesinə baxılmışdır.

Şəkil 5 və 6-da PE və PE+3,0% NG nanokompozitin elektrik sahəsinin təsirindən əvvəl və sonra termik spektrləri göstərilmişdir.

Cədvəl və şəkillərdən göründüyü kimi, nanokompozit və saf PE üçün elektrik sahəsinin təsirindən sonra matrisanın kristallik fazasının amorflaşması ilə kristal fazaların ərimə temperaturu azalmışdır. $E$=0 halında PE+3,0% NG nanokompozitin depolimerləşmə temperaturu 10°C saf PE-yə nisbətən artmışdır. Əvvəlki araşdırmalarımızda [5, 9, 10] NG əlavəsinin poliolefinlərin mexaniki möhkəmliyini artırdığını göstərmişdik. Yəni, NG destruktiv proseslərin yavaşıdılmasında mühüm rol oynayır. Istilik xassələrinin araşdırılmasında elektrik sahəsinin təsirindən sonra 3,0% NG əlavəli nanokompozitin depolimerləşmə temperaturu saf PE-yə nisbətən 15°C artmışdır. PE-nin qalıq kütləsi 30% olduğu halda, PE+3,0 NG nanokompozitinin qalıq kütləsi 39% olmuşdur. Elektrik sahəsinin təsirindən sonra saf PE-də kütlə itkisi 160°C-dən başlamışsa, PE+3,0% NG nanokompozitində bu temperatur 170°C-dən başlayır.

Beləliklə, PE+%NG nanokompozitlərinin fiziki quruluşundakı hər cür dəyişiklik (istər əlavənin, istərsə də köhnəlmənin təsiri ilə) mexaniki xassələrə təsir etdiyi kimi, istilik-fiziki xassələri də dəyişdirə bilər. DTA metodu ilə öyrənilən termodestruksiya göstərdi ki, nanokompozitdə başlanğıc endotermik pikə və termik depolimerizasiyaya uyğun gələn temperatur saf PE-yə nisbətən yüksəlir. Bu isə nanokompozitin oksidləşməyə qarşı daha dayanıqlı olduğunu göstərir.

Cədvəl

PE və nanokompozitdə termik parametrlərdə baş verən dəyişikliklər cədvəldə verilmişdir.

| Nümunələr | DTA | | DTQ Endotermik effekt, $T$°C | TQ, $\Delta m$, % |
|---|---|---|---|---|
| | Endotermik effekt, $T$°C | Ekzotermik effekt, $T$°C | | |
| Saf PE $E$=0, $t$=0 | $T_{dağ.}$=110 $T_{depol.}$=360 | $T_{ter.oksid.}$=300 | 360 | 38 |
| PE+3,0% NG $E$=0, $t$=0 | $T_{dağ.}$=120 $T_{depol.}$=370 | $T_{ter.oksid.}$=310 | 370 | 45 |
| Saf PE $E$=2,5·10$^7$V/m $t$=20 saat | $T_{dağ.}$=105 $T_{depol.}$=345 | $T_{ter.oksid.}$=290 | 345 | 30 |
| PE+3,0% NG $E$=2,5·10$^7$V/m $t$=20 saat | $T_{dağ.}$=118 $T_{depol.}$=360 | $T_{ter.oksid.}$=310 | 360 | 39 |

## NƏTİCƏ

1. İQ spektroskopiya metodu ilə alınan spektrlərin analizi göstərdi ki, elektrik sahəsinin təsiri ilə makromolekullarda kimyəvi rabitələrin qırılması nəticəsində $C=C$ qrupları yaranır. Bu qrupların optik sıxlığı elektrik sahəsinin təsir müddətindən asılı olaraq artır.

2. Elektrik sahəsinin təsirindən sonra saf PE və PE+3,0% NG nanokompozitin M Və D-si arasında korrelyasiya olduğu müşahidə olunur, yəni təsir müddətindən asılı olaraq $M$-in azalmasına $D$-nin artması uyğun gəlir.

3. Elektrik sahəsinin təsirindən sonra nanokompozitin depolimerləşmə temperaturu saf PE-yə nəzərən daha az dəyişir. Sahənin təsirindən əvvəl $T_{depol.}$=370; 360°C , sonra isə $T_{depol.}$=360; 345°C olmuşdur.

[1] *М.А. Рамазанов, Р.Л. Мамедова, А.А. Расулова, С.А.Абасов.* Электронная обработка материалов, 2011, т. 47, №6, с. 5-7.
[2] *M. Ramazanov, A. Hadieva, V. Alekperov.* Journal of Ovonic Research, 2014, v. 10, №4, p. 101-107.
[3] *Y. Özcanlı, M. Beken, F. Kosovalı Çavuş, A.A. Hadiyeva, A.R..Sadıgova and V.A. Alekperov.* Jour. of Nanoelectronics and Optoelectronics, 2017, v.12, p. 316-320.
[4] *A.R. Sadıqova, A.Ə. Hadıyeva , V.Ə.Ələkbərov.* Azerbaijan Journal of Physics Fizika №4, v. 24 ,2018, p.14-18.
[5] *А.Р. Садыгова, И.И. Аббасов, Э.С. Сафиев, П.Б. Асилбейли, В.А.Алекперов.* Влияние микродобавок наноглины на молекулярные процессы и кинетику электрического и механического разрушения полиэтилена, Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii, 2019, т.17, №1, сс.155-165.
[6] *R.A. Vaia, H. Ishii, and E.P. Giannelis.* Adv. Mater.,8: 29 1996.
[7] *E. Giannelis, N. Krishnamoorti, E. Manias.* Adv. Polym. Sci., 1998, v. 138, p. 107.
[8] *А.Д. Помогайло, А.С. Розенберг, И.Е.Уфлянд.* Наночастицы металлов в полимерах. М.: Химия, 2000, 671 с.
[9] *M.Ə.Ramazanov, A.R.Sadıqova, İ.İ.Abbasov, P.B.Əsilbəyli.* Polietilenin mexaniki və elektrik parçalanma kinetikasında nanogil əlavəsinin rolu, AMEA-nın xəbərləri, 2017, №5, səh.41-47.
[10] *A.R.Sadıqova..* Energetikanın problemləri, 2019, №3, səh.59-64.

**A.R. Sadygova, A.A. Khadiyeva, P.B. Asilbeyli, E.S. Safiev**

## MOLECULAR PROCESSES OCCURRING IN POLYETHYLENE + NANOCLAY NANOCOMPOSITES UNDER THE INFLUENCE OF AN ELECTRIC FIELD

The processes of changes in the structures of polyethylene (PE) and nanocomposites based on nanoclay (NG) after exposure to an electric field are investigated. It is shown that after the influence of an electric field, as a result of the rupture of macromolecules, *C=C* groups are formed. The rupture of macromolecules leads to a decrease in molecular weight. It was found that the rate of decrease in molecular weight and the formation of *C=C* groups in nanocomposites compared to PE are much lower.

**А.Р. Садыгова, А.А. Хадиева , П.Б. Асилбейли, Э.С. Сафиев**

## МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПРОЦЕССЫ, ПРОИСХОДЯЩИЕ В НАНОКОМПОЗИТАХ ПОЛИЭТИЛЕН+НАНОГЛИНА ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Исследованы процессы изменения в структурах полиэтилена (ПЭ) и нанокомпозитах на основе наноглины (НГ) после воздействия электрического поля. Показано, что после влияния электрического поля в результате разрыва макромолекул образуются *C=C* группы. Разрыв макромолекул приводит к уменьшению молекулярной массы. Выявлено, что скорость уменьшения молекулярной массы и образование *C=C* групп в нанокомпозитах по сравнению с ПЭ намного меньше.

*Qəbul olunma tarixi: 08.07.2021*

# KVANT ÇUXURLARINDA İKİÖLÇÜLÜ ELEKTRON QAZININ TERMOELEKTRİK HƏRƏKƏT QÜVVƏSİ

**M.M. BABAYEV, X.B. SULTANOVA**
*Azərbaycan Milli Elmlər Akadeniyasının Fizika İnstitutu*
*Azəbaycan, AZ 1143, Bakı, H.Cavid pr. 131*
mirbababababayev@yahoo.com

Modifikasiya olunmuş Pöşl-Teller potensiallı yarımkeçirici kvant çuxurunda elektronların termoelektrik hərəkət qüvvəsi hesablanmışdır. GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ kvant çuxurunda termoelektrik hərəkət qüvvəsinin elektronların səth sıxlığından və temperaturdan asılılıqları tədqiq edilmişdir. Göstərilmişdir ki, elektronların səth sıxlığının böyük qiymətlərində termo-ehq temperaturdan xətti asılı olur; kiçik səth sıxlıqlarında termo-ehq daha böyük qiymətlər alır, lakin temperaturun artması ilə onun artımı zəifləyir.

**Açar sözlər**: Kvant çuxuru, Pöşl-Teller potensialı, termoelektrik hərəkət qüvvəsi.
**PACS:** 73.50 Lw; 73.63 Hs

Elektron cihazların ölçüsünün kiçildilməsi problemi ilə bağlı olaraq aşağıölçülü sistemlərdə kinetik effektlərin öyrənilməsi məsələsi aktual məsələlərdəndir. Kvant çuxurlarında (nazik təbəqələrdə) termoelektrik hərəkət qüvvəsinin (termo-ehq) ölçülməsinə əsaslanan bir sıra cihazlar yaradılmışdır. Məsələn, aşağı temperaturlarda elektron temperaturunu ölçən və iş prinsipi nazik təbəqələrdə termo-ehqnin diffuziya hissəsinin ölçülməsinə əsaslanan termocüt hazırlanmışdır [1]. Həmin cihazların iş keyfiyyətinin yüksəldilməsi üçün nazik təbəqələrdə termo-ehqnin öyrənilməsi, onun elektron və ionların səth sıxlığından, qəfəsin temperaturundan asılılıqlarının tədqiq edilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır.

Nazik təbəqələrdə termo-ehq təcrübi və nəzəri olaraq [2-5] işlərində öyrənilmişdir. Kvant çuxurlarında məhdudlayıcı potensialın forması dəqiq bilinmədiyi üçün müxtəlif modellərdən istifadə edilir. [2-4] işlərində düzbucaqlı potensialdan, [5] işində isə parabolik potensial modelindən istifadə edilmişdir. Bizim bu işimizdə kvant çuxurunda məhdudlayıcı potensialın modeli olaraq, modifikasiya olunmuş Pöşl-Teller potensialından [6] istifadə edilir.

[7-9] işlərində modifikasiya olunmuş Pöşl-Teller potensiallı yarımkeçirici kvant çuxurunda elektronların kimyəvi potensialı, elektronların relaksasiya prosesləri və yürüklüyü öyrənilmiş, o cümlədən yürüklüyün ionların səth sıxlığından asılılığı tədqiq edilmişdir. Alınmış nəzəri nəticələrin eksperimental nəticələrə uyğunluğu modifikasiya olunmuş Pöşl-Teller potensialının kvant çuxurunda məhdudlayıcı potensialı yaxşı təsvir etdiyini göstərir. Bu işdə həmin potensiallı yarımkeçirici kvant çuxurunda ekranlaşma nəzərə alınmaqla termo-ehqnin diffuziya (elektron) hissəsi hesablanmışdır. Elektronların ionlardan, akustik və pyezoakustik fononlardan səpilməsi nəzərə alınmışdır.

Elektronların hərəkətinin məhdudlaşdığı istiqamət olaraq $z$ oxunu götürək. Pöşl-Teller potensialı 2 parametrlə xarakterizə olunur [6] - $\lambda$ və $\alpha$ . Hesablamalar göstərir ki, GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ kvant çuxurlarında təbəqənin eni $\cong 100A$ olan halda temperaturun $T \leq 100$K və elektronların səth sıxlığının $n \leq 10^{16}m^{-2}$ qiymətlərində elektronlar ən aşağı enerjili $N$=0 səviyyəsində olur. Ona görə də, biz Pöşl-Teller potensialının parametrini $\lambda$=1 götürəcəyik. Bu halda ($\lambda$=1, $N$=0) modifikasiya olunmuş Pöşl-Teller potensialını aşağıdakı şəkildə yazmaq olar [6]:

$$U(z) = \frac{\hbar^2\alpha^2}{m}\tanh^2\alpha z \qquad (1)$$

Qalan iki istiqamətdə ($x$ və $y$) hərəkət məhdudlaşmadığı üçün, (1) potensialına malik kvant çuxurunda elektronların dispersiya qanunu aşağıdakı şəkildədir [6]:

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m}(\alpha^2 + k^2) \qquad (2)$$

Burada $m$ - keçirici elektronların effektiv kütləsi, $\alpha$ – Pöşl-Teller potensialının parametri, $k = (k_x, k_y)$ – elektronların 2-ölçülü dalğa vektorudur.

Temperatur qradiyentinin 2-ölçülü elektron qazı müstəvisində yaradıldığı hala baxırıq (Bu istiqaməti $x$ ilə işarə edək: $\nabla T = \nabla T_x$ ). Aydındır ki, temperatur qradiyenti nəticəsində yaranan termoelektrik sahə ($E_x$) və elektrik cərəyanı ($j_x$) da $x$ oxu istiqamətində olacaq. Təbəqə müstəvisində kvantlanma baş vermədiyinə görə, keçirici elektronlar üçün relaksasiya müddəti yaxınlaşmasından və Bolsmanın kinetik tənliyindən istifadə edə bilərik [10]:

$$\frac{\hbar k_x}{m}\cdot\frac{\partial f(k_x,k_y)}{\partial x} - \frac{e}{\hbar}E_x\cdot\frac{\partial f(k_x,k_y)}{\partial k_x} = -\frac{f_1(k_x,k_y)}{\tau(\varepsilon)} \qquad (3)$$

Burada $E_x = -\frac{\partial}{\partial x}\left(\varphi_0 - \frac{\xi}{e}\right)$, $\varphi_0$ -elektrostatik potensial, $\xi$ - elektronların kimyəvi potensialı, $\tau(\varepsilon)$- relaksasiya müddəti, $f(k_x,k_y) = f_0(\varepsilon) + f_1(k_x,k_y)$ – temperatur qradiyenti nəticəsində tarazlıqdan çıxmış elektronların paylanma funksiyası,

$$f_0(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\frac{\varepsilon-\xi}{k_0T}+1} \qquad (4)$$

- tarazlıq halında Fermi-Dirak paylanma funksiyası ($k_0$ – Bolsman sabiti), $f_1(k_x,k_y)$ isə paylanma funksiyasına qeyri-tarazlıqdan yaranan əlavədir. Relaksasiya müddəti yaxınlaşmasında bu əlavə (3) tənliyindən tapılır:



131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com

$$f_1(k_x,k_y)=\frac{\hbar}{m}\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\,\tau(\varepsilon)\left(eE_x+\frac{\varepsilon-\xi}{T}\nabla_x T\right)k_x \qquad (5)$$

Elektronların yalnız ən aşağı enerjili $N$=0 səviyyəsində olduğu halda 2-ölçülü kvant təbəqəsi üzrə elektronların yaratdığı elektrik cərəyanı aşağıdakı ifadə ilə təyin edilir [10]:

$$j_x=2\sum_{k_x,k_y}(-e)\frac{\hbar k_x}{m}\,f_1(k_x,k_y) \qquad (6)$$

Burada 2 vuruğu spinə görə cırlaşmadan meydana çıxır. (5) bərabərliyini nəzərə alsaq, $k=(k_x,k_y)$ üzrə cəmləməni inteqrallama ilə əvəz etsək və polyar oxu $k_x$ üzrə götürməklə polyar koordinatlara keçsək elektrik cərəyanının (6) ifadəsi aşağıdakı şəklə düşər:

$$j_x=\frac{e^2\hbar^2}{2\pi m^2}\int_0^\infty k^3dk\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\tau(\varepsilon)\left(E_x+\frac{\varepsilon-\xi}{eT}\nabla_x T\right) \qquad (7)$$

Termo-ehq $\alpha=\frac{E_x}{\nabla_x T}$ nisbəti ilə müəyyən olunur və $j_x=0$ tənliyindən tapılır [10]. Onda (7)-dən termo-ehq üçün alırıq:

$$\alpha=-\frac{k_0}{e}\cdot\frac{J_1}{J_0} \qquad (8)$$

Burada aşağıdakı işarələmələr qəbul edilmişdir:

$$J_i=\int_0^\infty x^2dx\,\frac{e^{x-\eta}}{(e^{x-\eta}+1)^2}\tau(x)(x-\eta)^i\,;\,i=0,1 \qquad (9)$$

$$x=\frac{\hbar^2k^2}{2mk_0T}\,,\;\eta=\frac{\xi}{k_0T}-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2mk_0T} \qquad (10)$$

Pöşl-Teller potensiallı kvant çuxurunda elektronların $\xi$ kimyəvi potensialı [7] işində hesablanmışdır:

$$\xi=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}+k_0T\ln\left[\exp\left(\frac{\pi\hbar^2n}{mk_0T}\right)-1\right] \qquad (11)$$

(9) ifadəsində $\tau(x)=(\nu_{ak}+\nu_{pz}+\nu_i)^{-1}$ – elektronların ümumi relaksasiya müddətidir. Elektronların akustik fononların deformasiya və pyezoelektrik potensiallarından və aşqar ionlardan səpilmə tezlikləri aşağıdakı kimi ifadə olunur [8]:

$$\xi=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}+k_0T\ln\left[\exp\left(\frac{\pi\hbar^2n}{mk_0T}\right)-1\right] \qquad (12)$$

$$\nu_{ak}=\frac{4E_1^2k_0T\alpha m}{3\pi\rho\hbar^3v_0^2}\int_0^1\frac{t^2dt}{\epsilon^2(k,t)\sqrt{1-t^2}} \qquad (13)$$

$$\nu_{pz}=\frac{2k_0Tme^2\beta^2}{\pi\alpha\rho\hbar^3v_0^2}\int_0^1\frac{t^2dt}{\epsilon^2(k,t)\sqrt{1-t^2}}\int_0^\infty\frac{y^2dy}{y^2+\left(\frac{\pi kt}{\alpha}\right)^2}\,\mathrm{csch}^2y\,,$$

$$\nu_i=\frac{4\pi Z^2e^4m\,n_i\alpha^2}{\chi^2\hbar^3k^2}\int_0^1\frac{dt}{\epsilon^2(k,t)\sqrt{1-t^2}}\left[\int_0^\infty e^{-2kzt}(1-\tanh^2\alpha z)dz\right]^2 \qquad (14)$$

Burada

$$\epsilon(k,t)=1+\frac{me^2}{\hbar^2\chi kt}\left\{2\left(\frac{kt}{\alpha}\right)^2\Psi^{(1)}\left(-1+\frac{kt}{\alpha}\right)-\frac{1+\left(\frac{2kt}{\alpha}-1\right)\left(\frac{kt}{\alpha}\right)^2}{\left(\frac{kt}{\alpha}-1\right)^2}\right\}f_0\left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\right) \qquad (15)$$

– Pöşl-Teller potensiallı yarımkeçirici kvant çuxurunda səpici potensialların ekranlaşmasını xarakterizə edən dielektrik funksiya [8], $\Psi^{(1)}(z)=\frac{d^2}{dz^2}ln\Gamma(z)$ – triqamma-funksiya, $\Gamma(z)$ – qamma-funksiya, $f_0\left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\right)$ - ən aşağı enerjili halın ($k=0$) elektonlar tərəfindən tutulma ehtimalıdır. $\rho$ – kristalın sıxlığı, $v_0$– səsin kristalda sürəti, $\chi$ – statik dielektrik nüfuzluğu, $Ze$ və $n_i$, uyğun olaraq, ionların yükü və səth sıxlığı, $E_1$ – deformasiya potensialının sabiti, $\beta=4\pi\sqrt{0.8}\,e_{14}/\chi$ ($e_{14}$ – pyezopotensialın parametridir) [11].

Yuxarıda termoehq üçün alınan nəzəri nəticələri GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ kvant çuxurlarına tətbiq edək. Bu kvant çuxuru üçün : $m=0.067m_0$ (burada $m_0$ – sərbəst elektronun kütləsidir), $\rho=5.3\cdot10^3$ kq/m$^3$,

$v_0 = 5.14 \cdot 10^3$ m/s , $\chi = 12.9$ , $E_1 = 7.4$ eV , $e_{14} = 0.16$ C/m$^2$ [11].

Modifikasiya olunmuş Pöşl-Teller potensialının parametri olan $\alpha$ - nı qiymətləndirmək üçün potensialın (2) ifadəsində $\tanh^2 \alpha z$ funksiyasının qarşısındakı əmsalın kvant çuxurunun dərinliyinə ($\Delta$) ekvivalent olmasından istifadə edirik:

$$\frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} = \Delta \qquad (16)$$

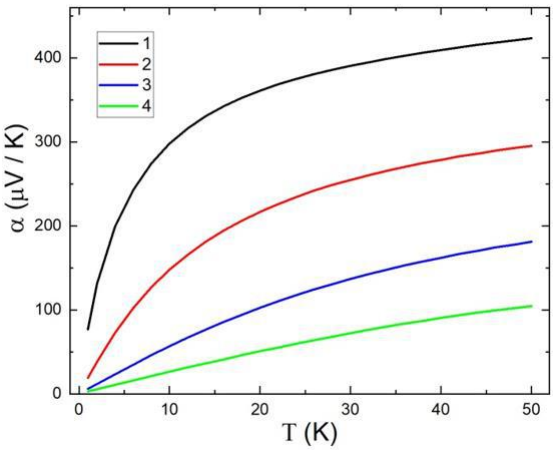
$\lambda$=1 parametrli kvant çuxurunda, çuxurun dərinliyinin $\Delta = 0.1$ eV qiymətində (16) tənliyindən $\alpha = 3 \cdot 10^8$ m$^{-1}$ alırıq. Ədədi hesablamalarda biz $\alpha$ - nın bu qiymətindən istifadə edəcəyik.

Hesablamalar göstərur ki, 2-ölçülü elektron qazında yürüklükdən fərqli olaraq termoelektrik hərəkət qüvvəsinin elektron hissəsi ionların səth sıxlığından zəif asılıdır. Elektronların səth sıxlığından və qəfəsin temperaturundan termo-ehqnin asılılığı isə güclüdür. Ona görə də bu işdə elektronların səth sıxlığının sabit qiymətlərində termoehqnin temperaturdan və sabit temperaturda onun elektronların səth sıxlığından asılılıqlarına diqqət verilmişdir.

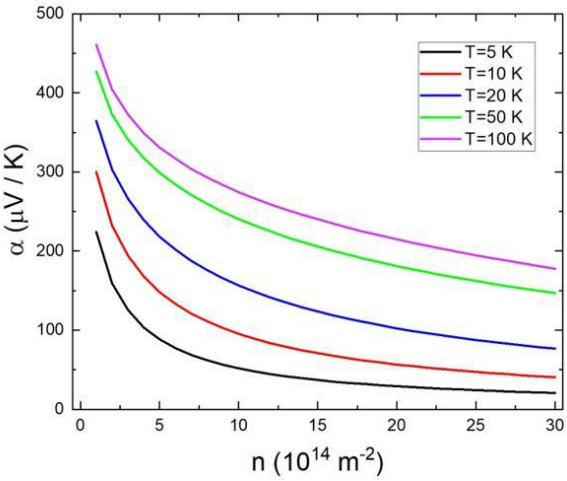
Qeyd edək ki, elektron və ionların konsentrasiyasının bir-birindən az fərqləndiyi 3-ölçülü aşqar yarımkeçiricilərdən fərqli olaraq, nazik təbəqələrdə elektron və ionların səth sıxlığı bir-birindən bir-iki tərtib (məsələn, [2] eksperimentində ≈60 dəfə) fərqlənir. Bunun səbəbi odur ki, $n_i$ kvant təbəqəsində olan ionların sayı ilə müəyyən olunur (bu sayı kvant təbəqəsi yaradılanda idarə etmək olur), $n$ isə kvant təbəqəsində atomların ionlaşmasından əlavə, həm də onu əhatə edən kristalda atomların ionlaşmasından əmələ gələn elektronların kvant çuxuruna dolması ilə formalaşır.

Elektronların səth sıxlığının müxtəlif qiymətlərində termo-ehqnin temperaturdan asılılıq qrafikləri şəkil 1-də göstərilmişdir. Termo-ehqnin qiyməti az da olsa, ionların səth sıxlığından da asılı olduğu üçün, ədədi hesablamanın aparıldığı hər bir hal üçün ionların istifadə edilmiş səth sıxlığı da göstərilmişdir.

Şəkil 1-dən göründüyü kimi elektronların səth sıxlığının böyük qiymətlərində termo-ehq temperaturdan xətti asılı olur. Bu, həmin səth sıxlıqlarında elektronların cırlaşmış halda olması ilə bağlıdır. Kiçik səth sıxlıqlarında elektronlar cırlaşmamış və ya zəif cırlaşmış halda olur. Bu halda da bütün temperatur intervalında termo-ehq temperaturun artması ilə artır, lakin kiçik temperaturlarda $T < 10K$) termo-ehq temperaturun artması ilə daha güclü surətdə artır, nisbətən böyük temperaturlarda isə bu asılılıq zəifləyir.




*Şəkil 1.* Termo-ehqnin temperaturdan asılılıq qrafikləri:
$1 - n = 10^{14}, n_i = 2 \times 10^{12}$,
$2 - n = 5 \times 10^{14}, n_i = 10^{13}$,
$3 - n = 2 \times 10^{15}, n_i = 5 \times 10^{13}$,
$4 - n = 5 \times 10^{15}, n_i = 10^{14} cm^{-2}$.




*Şəkil 2.* Sabit temperaturda termo-ehqnin elektronların səth sıxlığından asılılıq qrafikləri.

Şəkil 2-də temperaturun müxtəlif qiymətlərində termo-ehqnin elektronların səth sıxlığından asılılıq qrafikləri göstərilmişdir. Yuxarıda qeyd etdik ki, termo-ehqnin qiyməti ionların səth sıxlığından zəif də olsa asılıdır. Ona görə hesablamalarda $n_i$ - nin qiymətləri də verilməlidir. Nəticələri şəkil 2-də verilmiş bütün hesablamalar $\frac{n}{n_i} = 40$ qiymətləri üçün aparılmışdır. Şəkildən göründüyü kimi temperaturun istənilən sabit qiymətində elektronların səth sıxlığı artdıqca termo-ehq azalır. Bu azalma ilk növbədə səth sıxlığı artdıqca elektronların cırlaşma dərəcəsinin artması ilə bağlıdır.


[1] *W.E. Chickering, J.P. Eisenstein, J.L. Reno.* Phys. Rev. Lett., 103, 2009, 046807 (1-4).

[2] *R. Fletcher, J.C. Maan, G. Weimann.* Phys. Rev. B, 32, 1985, 8477-8479.

[3] *R. Fletcher, J.J. Harris, C.T. Foxon, M.Tsaousidou, P.N. Butcher.* Phys. Rev. B, 50 1994, 14991-14998.

[4] *S.K. Lyo*. Phys. Rev. B, 38, 1988, 6345-6347.

[5] *F.M.Hashimzade, M.M.Babayev, B.H.Mehdiyev and Kh.A.Hasanov.* Journal of Physics: Conference Series, 245, 2010, 012015.

[6] *S. Cruz y Cruz, S. Kuru, J. Negro.* Classical motion and coherent states for Pöschl–Teller potentials. Phys. Lett. A, 372, 2008, 1391–1405.

[7] *M.M.Babayev, Kh.B.Sultanova.* Fizika, XXIII – Az, 2017, 5-8.

[8] *M.M.Babayev,Kh.B.Sultanova,N.B.Mustafayev*. Chinese Journal of Physics, 56, 2018, 2977-2983.

[9] *M.M. Babayev, Kh.B. Sultanova, M.Q. Abbaslı*. Dependence of electron mobility on their surface density in a semiconductor quantum well with the modified Poschl-Teller confining potential. Fizika, XXV-En, 2019, 22-24.

[10] *Б.М. Аскеров.* Электронные явления переноса в полупроводниках. Москва, Наука, 1985, 318 стр.

[11] *В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон.* Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. Москва, Наука, 1984, 351 стр.

**M.M. Babayev, Kh.B. Sultanova**

## THERMOPOWER OF TWO-DIMENSIONAL ELECTRONIC GAS IN QUANTUM WELLS

The thermopower of electrons in a semiconductor quantum well with a modified Pöschl-Teller potential is calculated. The dependences of the thermopower on the surface electron density and on the temperature in the $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum well are investigated. It is shown that at large values of the surface electron density, the thermopower linearly depends on temperature, and at relatively low densities it grows weakly with increasing temperature.

**М.М. Бабаев, Х.Б. Султанова**

## ТЕРМОЭДС ДВУМЕРНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

Рассчитана термоэдс электронов в полупроводниковой квантовой яме с модифицированным потенциалом Пешля-Теллера. Исследованы зависимости термоэдс от поверхностной плотности электронов и от температуры в квантовой яме $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. Показано, что при больших значениях поверхностной плотности электронов термоэдс линейно зависит от температуры, а при относительно малых плотностях слабо растет с повышением температуры.

*Qəbul olunma tarixi: 16.07.2021*

# $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ HEKSAFERRİTİNİN YUXARI VƏ AŞAĞI TEMPERATURLARDA ATOM DİNAMİKASI

**A.İ. MƏMMƏDOV, S.H. CABAROV, R.Z. MEHDİYEVA, R.E. HÜSEYNOV**
*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,*
*AZ1143, Bakı, Azərbaycan, H. Cavid prospekti, 131*
r.e.huseynov@gmail.com@jinr.ru

$BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ heksaferriti sintez edilmiş, rentgen difraksiyası metodu ilə onun kristal quruluşu tədqiq olunmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, normal şəraitdə və otaq temperaturlarında bu birləşmənin kristal quruluşu P6/3mmc fəza qruplu heksaqonal simmetriyaya malik olur. Qəfəs parametrləri isə: $a$=5.8842 və $c$=23.1774 Å qiymətlərinə uyğun gəlir. $-190°C \leq T \leq 20°C$ aşağı temperatur və $20°C \leq T \leq 490°C$ yüksək temperatur intervalında $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ heksaferritinin atom dinamikası tədqiq edilmişdir. Raman spektroskopiyası metodu ilə alınmış spektrlərin analizi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, $-90°C \leq T \leq 490°C$ geniş temperatur intervalında bu birləşmədə quruluş faza keçidi baş vermir. Otaq temperaturunda alınmış Raman modaları həm aşağı temperaturlarda, həm də yüksək temperaturlarda müşahidə edilir.

**Açar sözlər:** seqnetoelektrik, ferrimaqnit, heksaferrit, multiferroik, rentgen difraksiyası, Raman spektroskopiyası
**PACS:** 81.40.Vw, 61.05.C-, 77.80.B-

## 1. GİRİŞ

Multiferroik materiallar eyni zamanda həm ferroelektrik, həm də ferromaqnit xassələrə malik olduqlarına görə geniş tədqiq edilirlər [1-3]. Bu materiallar arasında heksaferritlər mühüm yer tuturlar [4-6]. Onların belə mühüm əhəmiyyətinə əsas səbəb, geniş temperatur intervalında dayanıqlı quruluş və maqnit xassələrinə malik olmalarıdır [7-9]. $BaFe_{12}O_{19}$ heksaqonal birləşməsi və Fe atomlarının qismən diamaqnit metal atomları ilə əvəzlənməsi əsasında alınmış birləşmələr son zamanlar ən çox tədqiq edilən heksaferritlərdir. Barium heksaferrit geniş temperatur intervalında ($T_C$ ~ 750 K) ferrimaqnit xassələri göstərir. Fe atomlarının Al, In, Ga, Sc və s. diamaqnit atomları ilə qismən əvəz edilməsi ilə alınan birləşmələr də barium heksaferrit kimi yüksək temperaturlar oblastında maqnit xassələrinə malik olurlar [10-11].

Əvvəlki quruluş tədqiqatlarının nəticələrindən məlumdur ki, $BaFe_{12}O_{19}$ birləşməsinin kristal quruluşu heksaqonal simmetriyanın P6/3mmc fəza qrupuna uyğun gəlir və qəfəs parametrləri: $a$ = 5.8920(1) Å, $c$ = 23.183(1) Å qiymətlərinə malikdir [12]. $BaFe_{12-x}Me_xO_{19}$ (Me = Al, Ga, In; $x$ = 0.1- 1.2) birləşmələrində aparılmış quruluş tədqiqatları göstərmişdir ki, bu birləşmələrin kristal quruluşları da heksaqonal simmetriyanın P6/3mmc fəza qrupuna uyğun gəlir [13-14]. Nəzəri hesablamalar nəticəsində məlum olmuşdur ki, bu fəza qrupuna uyğun olaraq kristalda 42 Raman aktiv moda ($11A_{1g} + 14E_{1g} + 17E_{2g}$) və 30 infraqırmızı aktiv moda ($13A_{2u} + 17E_{1u}$) müşahidə edilə bilər. $150 sm^{-1} \leq \nu \leq 1000\ sm^{-1}$ tezlik intervalında aparılmış Raman spektroskopiyası tədqiqatları zamanı bu modalardan yalnız 10-u müşahidə edilmişdir: $\nu$ = 173, 184, 216, 340, 409, 467, 611, 614, 684 və 713 $sm^{-1}$ [15]. Müəyyən edilmişdir ki, bu Raman modaları: şpinel bloklarının, O – Fe – O rabitələrinin, $FeO_6$ oktaedrlərinin, $FeO_5$ bipiramidalarının və $FeO_4$ tetraedrlərinin rəqslərinə uyğun gəlmişdir.

$BaFe_{12-x}Ga_xO_{19}$ ($x$ = 0.1- 1.2) birləşmələrinin atom dinamikası otaq temperaturunda, normal şəraitdə Raman spektroskopiyası ilə tədqiq edilmişdir. Spektrlərdə $\nu$ = 200 - 800 $sm^{-1}$ tezlik intervalında 8 maksimum müşahidə edilmişdir: $\nu$ = 289.19, 325.78, 406.84, 463.44, 515.94, 608.60, 677.64 və 717.12 $sm^{-1}$. Müəyyən edilmişdir ki, bu rəqs modaları: O – Fe – O rabitələrinin, $Fe/GaO_6$ oktaedrlərinin, $Fe/GaO_6$ oktaedrlərinin, $Fe(2b)/Ga(2b)O_5$ bipiramidalarının və $Fe/GaO_4$ tetraedrlərinin rəqslərinə uyğundur [7].

$BaFe_{12-x}Al_xO_{19}$ ($x$ = 0.1- 1.2) birləşmələrinin atom dinamikası Raman spektroskopiyası və infraqırmızı spektroskopiya metodları ilə tədqiq edilmişdir. Raman spektrlərində 8 maksimum müşahidə edilmişdir ki, bu modalar da $BaFe_{12-x}Ga_xO_{19}$ ($x$ = 0.1- 1.2) birləşməsinə uyğun olaraq izah edilmişdir [16]. İnfraqırmızı spektroskopiya ilə $\nu$ = 400 - 800 $sm^{-1}$ tezlik intervalında alınmış spektrlərdə isə 4 maksimum müşahidə edilmişdir: $\nu$ = 443.52, 524.14, 604.21 və 720.82 $sm^{-1}$. Müəyyən edilmişdir ki, bu rəqs modaları: $Fe/AlO_6$ oktaedrlərinin və $Fe/AlO_4$ tetraedrlərinin rəqslərinə uyğundur [9].

Heksaferritlərin quruluş xassələrinin tədqiq edilməsi və atomlararası rabitələrin xarakterinin öyrənilməsi üçün, bu birləşmələrin atom dinamikalarının tədqiq edilməsi çox vacibdir. Təqdim edilən bu işdə, Raman spektroskopiyası metodu ilə $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ heksaferrit birləşməsinin atom dinamikası tədqiq edilmişdir. Təcrübələr $-190°C \leq T \leq 20°C$ aşağı temperaturlar (azot temperaturu) və $20°C \leq T \leq 490°C$ yüksək temperaturlar intervalında aparılmışdır.

## 2. TƏCRÜBƏ

Tədqiq edilən $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$-un ovuntu halında hazırlanmış keramika nümunəsi yüksək temperatur sobasında standart metodla "yüksək təmiz" markalı $Fe_2O_3$, $Sc_2O_3$ oksidlərindən və $BaCO_3$ karbonatından sintez edilmişdir.

$$BaCO_3+5.55\cdot Fe_2O_3+0.45\cdot Sc_2O_3 \rightarrow BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}+CO_2\uparrow$$

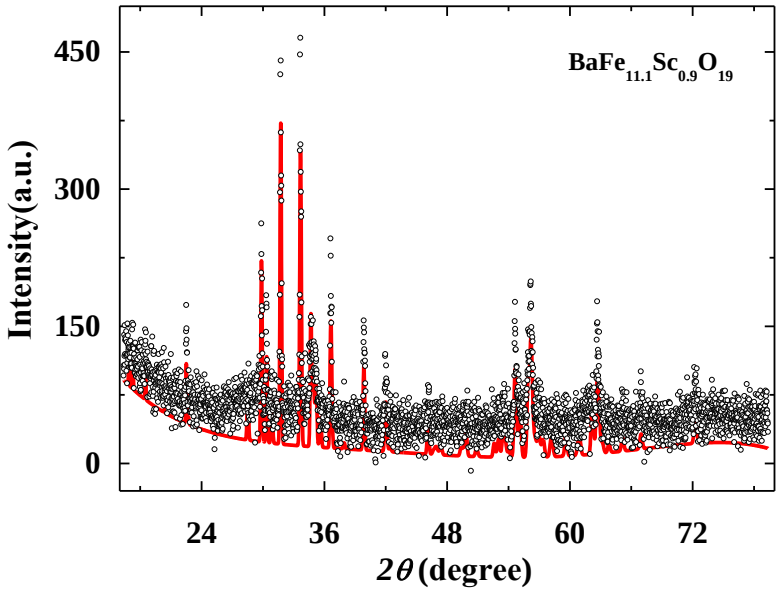
İlk olaraq oksidlər və karbonat müvafiq miqdarda qarışdırılmış, açıq havada 1473 K temperaturda 6 saat qızdırılmış, son mərhələdə isə açıq havada 1573 K temperaturda 6 saat qızdırılmışdır. Sintez prosesindən sonra nümunələr aşağı sürətlə soyudulmuşdur (100 K·saat$^{-1}$).

Alınmış ovuntu halında olan nümunələrin kristal quruluşları rentgen difraksiyası metodu ilə, D8 Advance (Bruker) difraktometrində tədqiq edilmişdir. Kristal quruluşun analizi FullProf proqramında Ritveld metodu ilə aparılmışdır [20].

Nümunələrin atom dinamikası, rabitələrin rəqsi hərəkətini və Raman tezlikləri, Mikro Raman Spektroskopiyası (XploRAHoriba) ilə 532 nm (25 mW) dalğa uzunluqlu bərk cisim lazerindən istifadə etməklə analiz edilmişdir. Xarakterik rəqs modalarını müsahidə etmək ücün $\nu$= 0 - 800 sm$^{-1}$ oblastında Raman spektrləri alınmışdır.

## 3. NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

$BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsinin kristal quruluşu otaq temperaturunda və normal şəraitdə rentgen difraksiyası metodu ilə tədqiq edilmişdir. Alınmış rentgen difraksiyası spektri şəkil 1-də verilmişdir. Spektrin Ritveld metodu ilə analiz edilməsi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, normal şəraitdə və otaq temperaturunda bu birləşmənin kristal quruluşu $P6_3mmc$ fəza qruplu heksaqonal simmetriyaya malik olur. Qəfəs parametrləri isə: $a$ = 5.8842 və $c$ = 23.1774 Å qiymətlərinə uyğun gəlir. Bu nəticə barium heksaferrit və $BaFe_{11.1}(Al,In,Ga)_{0.9}O_{19}$ birləşmələri üçün alınmış nəticələrə uyğun gəlir [16-18].




*Şəkil 1.* $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsinin otaq temperaturunda və normal şəraitdə alınmış rentgen difraksiyası spektri.

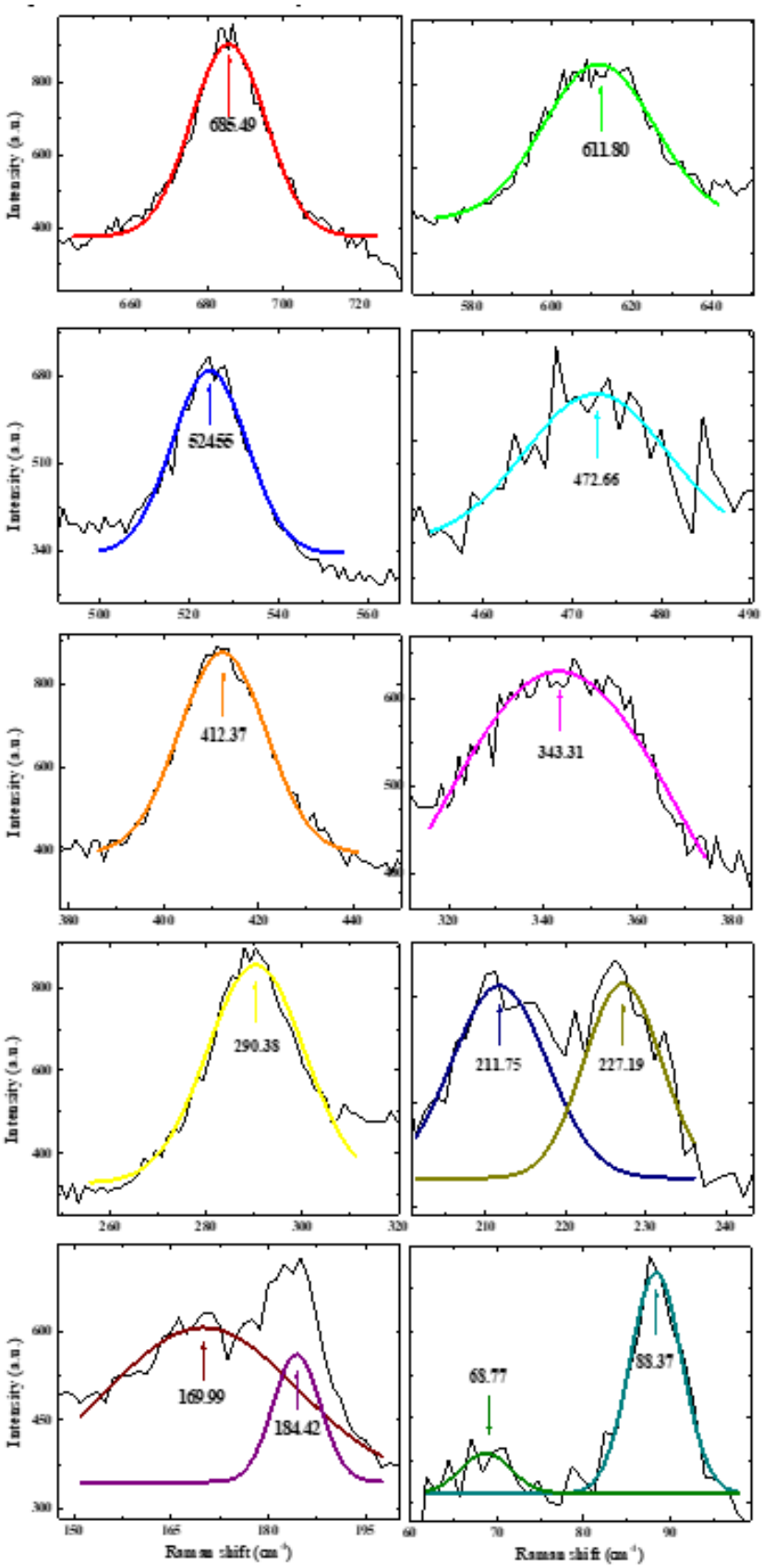
$BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsinin atom dinamikası otaq temperaturunda, normal şəraitdə Raman spektroskopiyası ilə tədqiq edilmişdir. Spektrlərdə $\nu$ = 60 - 800 cm$^{-1}$ tezlik intervalında 13 maksimum müşahidə edilmişdir: $\nu$ = 68.77, 88.37, 169.99, 184.42, 211.75, 227.19, 290.38, 343.31, 412.37, 472.66, 524.55, 611.80 və 685.49 sm$^{-1}$. Müəyyən edilmişdir ki, bu rəqs modaları O, Fe və Sc atomlarının əmələ gətirdikləri rabitələrin, şpinel blokların, oktaedrlərin, bipiramidaların və tetraedrlərin rəqslərinə uyğundur. Şəkil 2-də bu Raman modalarına uyğun gələn maksimumlar göstərilmiş və Qauss funksiyasına uyğun olaraq analiz edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki:

- ✓ $\nu_1$ = 68.77 sm$^{-1}$ modası şpinel bloklarının,
- ✓ $\nu_2$ = 88.37 sm$^{-1}$ modası şpinel bloklarının,
- ✓ $\nu_3$ = 169.99 sm$^{-1}$ modası şpinel bloklarının,
- ✓ $\nu_4$ = 184.42 sm$^{-1}$ modası şpinel bloklarının,
- ✓ $\nu_5$ = 211.75 sm$^{-1}$ modası O – Fe – O rabitələrinin,
- ✓ $\nu_6$ = 227.19 sm$^{-1}$ modası O – Fe – O rabitələrinin,
- ✓ $\nu_7$ = 290.38 sm$^{-1}$ modası O – Fe – O rabitələrinin,
- ✓ $\nu_8$ = 343.31 sm$^{-1}$ modası Fe(5)/$GaO_6$ oktaedrlərinin,
- ✓ $\nu_9$ = 412.37 sm$^{-1}$ modası Fe(5)/$GaO_6$ oktaedrlərinin,
- ✓ $\nu_{10}$ = 472.66 sm$^{-1}$ modası Fe(1)/$GaO_6$ və Fe(5)/$GaO_6$ oktaedrlərinin,
- ✓ $\nu_{11}$ = 524.55 sm$^{-1}$ modası bütün oktaedrlərin,
- ✓ $\nu_{12}$ = 611.80 sm$^{-1}$ modası bütün oktaedrlərin,
- ✓ $\nu_{13}$ = 685.49 sm$^{-1}$ cm$^{-1}$ modası Fe(2)/$GaO_5$ bipiramidalarının rəqslərinə uyğundur.

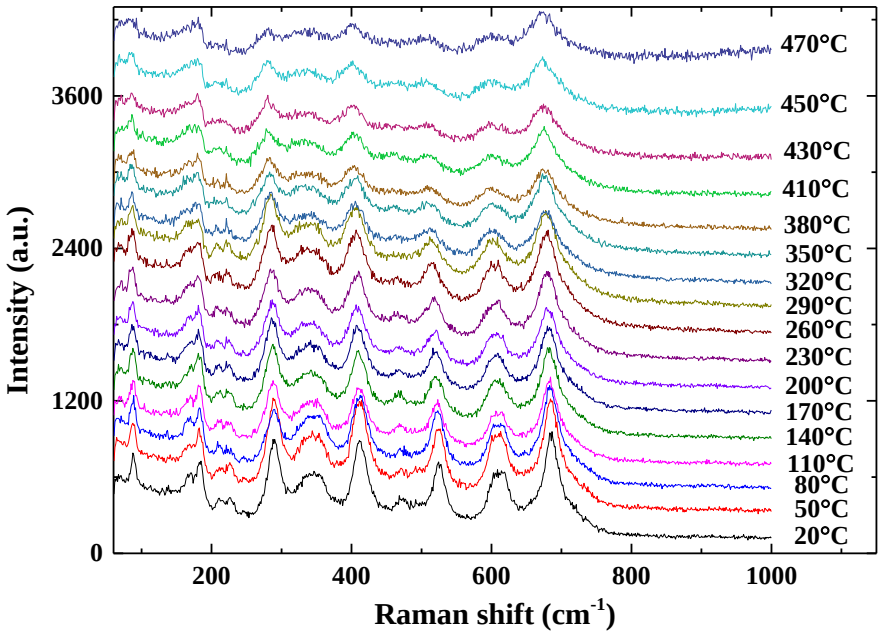
Göründüyü kimi ən kiçik rəqslər şpinel bloklarına uyğun gəlir ki, bu da şpinel blokların daha dayanıqlı sistem əmələ gətirmələri ilə əlaqədardır. Ən yüksək tezlikli modalar isə bipiramidalara uyğun gəlir. Bu da onu gostərir ki, oktaedrlər bipiramidalara nisbətən daha dayanıqlı sistem əmələ gətirirlər.

Məlumdur ki, temperaturun qiyməti yüksəldikcə kristal qəfəsi təşkil edən atomların rəqslərinin amplitudlarının qiymətləri artır. Ona görə də, temperaturun qiyməti yüksəldikcə kristalların atom dinamikasında dəyişiklik baş verir. Raman spektroskopiyası, birləşmələrin atom dinamikasında baş verən dəyişiklikləri, faza keçidlərini, quruluş çevrilmələrini təyin etmək üçün unikal metod hesab edilir [19-20]. $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ bir-

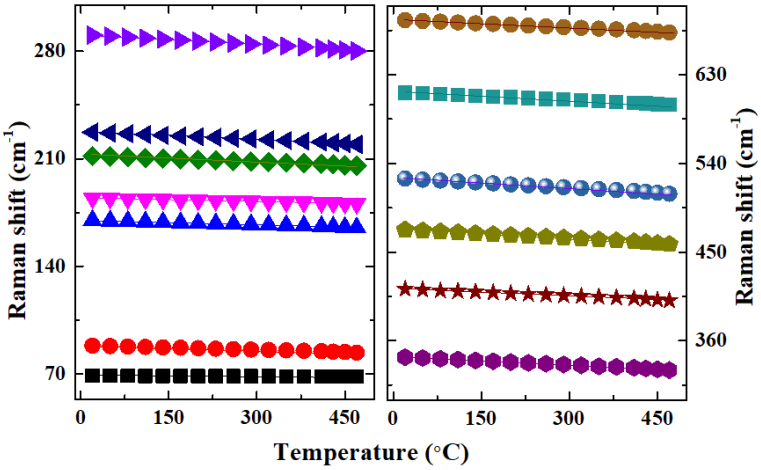
ləşməsinin atom dinamikasına yüksək temperaturun təsirini öyrənmək məqsədi ilə $20°C \leq T \leq 490°C$ temperatur intervalında Raman spektrləri alınmışdır. Müxtəlif temperaturlarda alınmış spektrlər şəkil 3-də verilmişdir. Göründüyü kimi otaq temperaturunda müşahidə edilən rəqs modalarının hamısı $T \leq 490°C$-ə qədər temperatur intervalında da müşahidə edilir. Lakin rəqs modalarının qiymətlərində azalma müşahidə edilir ki, bu da temperaturun təsiri ilə atomlararası rabitələrin uzunluqlarının artmasına uyğundur.




*Şəkil 2.* $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsinin otaq temperaturunda və normal şəraitdə alınmış Raman spektri.




*Şəkil 3.* $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsinin yüksək temperaturlarda alınmış Raman spektrləri.




*Şəkil 4.* Yüksək temperaturlarda $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsinin rəqs modaları.

Cədvəl 1.
Yüksək temperaturlar intervalında $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsində Raman modaları və bu modalar üçün alınmış $\alpha$ əmsalları.

| Raman modası | $sm^{-1}$ | Dəyişmə əmsalı | $°C^{-1}$ |
|---|---|---|---|
| $\nu_1$ | 68.77 | $\alpha_1$ | $1.48\times10^{-5}$ |
| $\nu_2$ | 88.37 | $\alpha_2$ | $10.82\times10^{-5}$ |
| $\nu_3$ | 169.99 | $\alpha_3$ | $6.15\times10^{-5}$ |
| $\nu_4$ | 184.42 | $\alpha_4$ | $4.28\times10^{-5}$ |
| $\nu_5$ | 211.75 | $\alpha_5$ | $6.33\times10^{-5}$ |
| $\nu_6$ | 227.19 | $\alpha_6$ | $7.38\times10^{-5}$ |
| $\nu_7$ | 290.38 | $\alpha_7$ | $7.59\times10^{-5}$ |
| $\nu_8$ | 343.31 | $\alpha_8$ | $8.21\times10^{-5}$ |
| $\nu_9$ | 412.37 | $\alpha_9$ | $6.02\times10^{-5}$ |
| $\nu_{10}$ | 472.66 | $\alpha_{10}$ | $6.70\times10^{-5}$ |
| $\nu_{11}$ | 524.55 | $\alpha_{11}$ | $6.29\times10^{-5}$ |
| $\nu_{12}$ | 611.80 | $\alpha_{12}$ | $4.32\times10^{-5}$ |
| $\nu_{13}$ | 685.49 | $\alpha_{13}$ | $3.94\times10^{-5}$ |

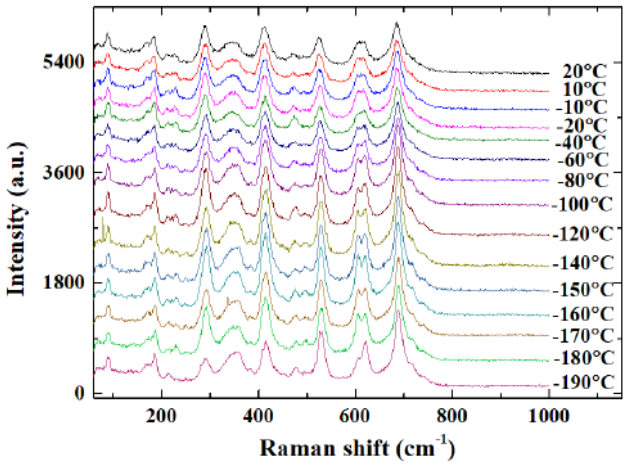
Şəkil 4-də yüksək temperaturlar oblastında $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsində Raman modalarının tezliklərinin temperatur asılılığı verilmişdir. Asılılıqlardan görünür ki, temperaturun qiyməti artdıqca Raman modalarının tezliklərinin qiymətlərində azalma baş verir. Bu azalma:

$$\alpha = -\frac{1}{\nu}\frac{d\nu}{dT} \qquad (1)$$

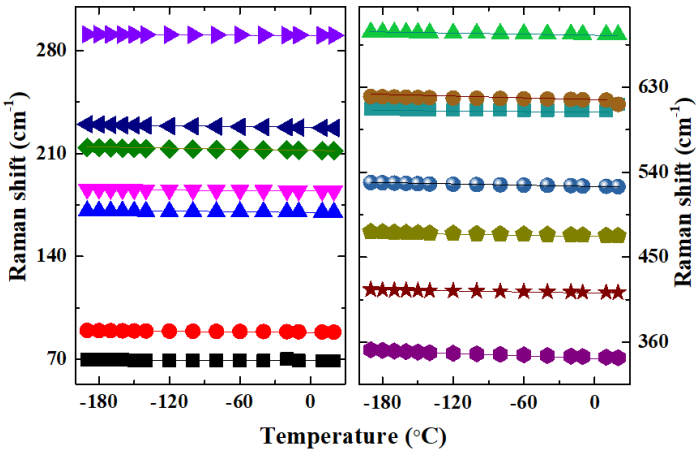
qanunu ilə interpretasiya edilmişdir. Müxtəlif Raman modaları üçün alınmış $\alpha$ əmsallarının qiymətləri cədvəl 1-də verilmişdir.

$BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsinin atom dinamikasına aşağı temperaturların təsirini öyrənmək məqsədi ilə $-190°C \le T \le 20°C$ temperatur intervalında Raman spektroskopiyası eksperimenti aparılmışdır. Aşağı temperaturlarda alınmış Raman spektrləri şəkil 4-də verilmişdir. Göründüyü kimi, otaq temperaturunda müşahidə edilən rəqs modalarının hamısı $T \ge -190°C$-ə qədər temperatur intervalında da müşahidə edilir. Lakin

temperaturun qiyməti yüksəldikcə rəqs modalarının qiymətlərində azalma müşahidə edilir ki, bu da yüksək temperaturlara uyğun olaraq aşağı temperaturlarda da temperaturun təsiri ilə atomlararası rabitələrin uzunluqlarının artmasına uyğundur. Aşağı temperaturlar oblastında $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsində Raman modalarının tezliklərinin temperatur asılılığı şəkil 5-də verilmişdir. Asılılıqlardan görünür ki, temperaturun qiyməti artdıqca Raman modalarının tezliklərinin qiymətlərində (1) qanununa uyğun olaraq azalma baş verir. Aşağı temperaturlarda müxtəlif Raman modaları üçün alınmış $\alpha$ əmsallarının qiymətləri cədvəl 2-də verilmişdir.




*Şəkil 5.* $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsinin aşağı temperaturlarda alınmış Raman spektrləri.




*Şəkil 6.* Aşağı temperaturlarda $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsinin rəqs modaları.

Cədvəl 2.

Aşağı temperaturlar intervalında $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsində Raman modaları və bu modalar üçün alınmış $\alpha$ əmsalları.

| Raman modası | $sm^{-1}$ | Dəyişmə əmsalı | $°C^{-1}$ |
|---|---|---|---|
| $\nu_1$ | 68.77 | $\alpha_1$ | $5.28\times10^{-5}$ |
| $\nu_2$ | 88.37 | $\alpha_2$ | $5.53\times10^{-5}$ |
| $\nu_3$ | 169.99 | $\alpha_3$ | $2.29\times10^{-5}$ |
| $\nu_4$ | 184.42 | $\alpha_4$ | $3.03\times10^{-5}$ |
| $\nu_5$ | 211.75 | $\alpha_5$ | $4.24\times10^{-5}$ |
| $\nu_6$ | 227.19 | $\alpha_6$ | $5.10\times10^{-5}$ |
| $\nu_7$ | 290.38 | $\alpha_7$ | $1.01\times10^{-5}$ |
| $\nu_8$ | 343.31 | $\alpha_8$ | $10.46\times10^{-5}$ |
| $\nu_9$ | 412.37 | $\alpha_9$ | $3.27\times10^{-5}$ |
| $\nu_{10}$ | 472.66 | $\alpha_{10}$ | $3.86\times10^{-5}$ |
| $\nu_{11}$ | 524.55 | $\alpha_{11}$ | $3.63\times10^{-5}$ |
| $\nu_{12*}$ | 605.07 | $\alpha_{12}$ | $1.52\times10^{-5}$ |
| $\nu_{12**}$ | 616.39 | $\alpha_{13}$ | $2.88\times10^{-5}$ |
| $\nu_{13}$ | 685.49 | $\alpha_{14}$ | $1.94\times10^{-5}$ |

## NƏTİCƏ.

Raman spektroskopiyası metodu ilə yüksək ($20°C \le T \le 490°C$) və aşağı ($-190°C \le T \le 20$) temperaturlarda $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsinin atom dinamikası tədqiq edilmişdir. Geniş temperatur intervalında alınmış spektrlərin analizindən məlum olmuşdur ki, yüksək və aşağı temperaturlarda Raman modaları demək olar ki, eynidir. Temperaturun təsiri ilə bu modaların tezliklərinin dəyişmə mexanizmi də eyni olur və $\alpha \sim 10^{-5}°C^{-1}$ qiymətinə malik olur (cədvəl 1 və 2). Bu onu göstərir ki, göstərilən temperatur aralığında $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ birləşməsində heç bir quruluş faza keçidi baş vermir.

Aşağı temperaturlarda, bütün oktaedrlərə məxsus olan və otaq temperaturunda $\nu_{12} = 611.80\ sm^{-1}$ tezliyində müşahidə edilən modada parçalanma baş verir. $T = -10°C$ temperaturda $\nu_{12*} = 605.07 sm^{-1}$ və $\nu_{12**} = 616.39 sm^{-1}$ tezliklərində Raman modaları alınmış və $T \ge -190°C$ intervalında müşahidə edilmişdir.

[1] *P. Kumar*. Multiferroic Materials and their Properties, Integrated Ferroelectrics, 2011, v.131, p.25.

[2] *D.P. Kozlenko, N.T. Dang, S.E. Kichanov, E.V.Lukin, A.M. Pashayev, A.I. Mammadov, S.H. Jabarov, L.S. Dubrovinsky, H.P. Liermann, W. Morgenroth, R.Z. Mehdiyeva, V.G.Smotrakov, B.N. Savenko*. Physical Review B, 2015, v.92, p.134409.

[3] *N.O. Golosova, D.P. Kozlenko, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, L.S. Dubrovinsky, A.I. Mammadov, R.Z. Mehdiyeva, S.H. Jabarov, H.-P. Liermann, K.V. Glazyrin, T.N. Dang, V.G. Smotrakov, V.V.Eremkin, B.N. Savenko*. Journal of Alloys and Compounds, 2016, v. 684, p.352.

[4] *A.V. Trukhanov, S.V. Trukhanov, V.A.Turchenko, V.V. Oleinik, E.S. Yakovenko, L.Yu. Matsui, L.L. Vovchenko, V.L. Launets, I.S.Kazakevich, S.G. Dzhabarov*. Physics of the Solid State, 2016, v.58, p.1792.

[5] *S.H. Jabarov, A.V. Trukhanov, S.V. Trukhanov, A.I.Mammadov,V.A.Turchenko,R.Z.Mehdiyeva, R.E. Huseynov*. Optoelectronics and Advanced Materials-Rapid Communications, 2015, v.9, p.468.

[6] *S.H. Jabarov*. International Journal of Modern Physics B, 2018, v.32, p.1850303.

[7] *A.V. Trukhanov, V.G. Kostishyn, L.V. Panina, S.H. Jabarov, V.V. Korovushkin, S.V. Trukhanov, E.L. Trukhanova*. Magnetic properties and Mössbauer study of gallium doped M-type barium hexaferrites, Ceramics International, 2017, v.43, p.12822.

[8] *F.G. Agayev, S.H. Jabarov, G.Sh. Ayyubova, M.N.Mirzayev, S.V.Trukhanov, E.L.Trukhanova, M.A. Darwish, S.V. Podgornaya, D.A. Vinnik, T.P. Hoang, N.T. Dang, A.V. Trukhanov*. Physica B: Condensed Matter, 2020, v.580, p.411772.

[9] *R.E. Huseynov, A.I. Mammadov, R.Z. Mehdiyeva, A.V. Trukhanov, S.V. Trukhanov, V.A.Turchenko, T.P. Hoang, N.T. Dang, S.H. Jabarov*. Journal of the Korean Physical Society, 2019, v.74, p.584.

[10] *V.A. Turchenko, S.V. Trukhanov, A.M. Balagurov, V.G. Kostishyn, A.V. Trukhanov, L.V. Panina, E.L. Trukhanova*. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2018, v.464, p.139.

[11] *M.A. Darwish, V.G. Kostishyn, V.V. Korovushkin, I.M. Isaev, A.T. Morchenko, L.V. Panina, S.V. Trukhanov, K.A. Astapovich, V.A. Turchenko, A.V. Trukhanov*. IEEE Magnetics Letters, 2019, v.10, p.1-5

[12] *X. Obradors, A. Collomb, M. Pernet*. Journal of Solid State Chemistry, 1985, v. 56, p.171.

[13] *A.V. Trukhanov, V.O. Turchenko, I.A. Bobrikov, S.V. Trukhanov, I.S. Kazakevich, A.M. Balagurov*. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2015, v.393, p.253.

[14] *A.V. Trukhanov, M.A. Darwish, L.V. Panina, A.T. Morchenko, V.G. Kostishyn, V.A.Turchenko, D.A. Vinnik, E.L. Trukhanova, K.A. Astapovich, A.L. Kozlovskiy, M. Zdorovets, S.V. Trukhanov*., Journal of Alloys and Compounds, 2019, v.791, p.522.

[15] *J. Kreisel, G. Lucazeau, H. Vincent.* J. Sol. Stat. Chem., 1998, v.137, p.127.

[16] *A.V. Trukhanov, N.T. Dang, S.V. Trukhanov, S.H. Jabarov, I.S. Kazakevich, A.I. Mammadov, R.Z. Mekhdiyeva, V.A. Turchenko, R.E. Huseynov*. Physics of the Solid State, 2016, v.58, p.992.

[17] *A.V.Trukhanov,S.V. Trukhanov, V.G. Kostishyn, L.V. Panina, I.S. Kazakevich, An.V. Trukhanov, V.O. Natarov, D.N. Chitanov, V.A. Turchenko, V.V. Oleynik, E.S. Yakovenko, L.Yu. Macuy, E.L. Trukhanova*. Materials Research Express, 2014, v.4, p.076106.

[18] *V. Turchenko, A.V. Trukhanov, S.V. Trukhanov, I.S. Kazakevich*. The investigation of crystal and magnetic structures of solid solutions $BaFe_{12-x}D_xO_{19}$ ($D$ = In and Ga, $x$ = 0.1-1.2), EPJ Web of Conferences, 2018, v.185, p.04011.

[19] *D.P. Kozlenko, N.T. Dang, N.O. Golosova, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, P.J. Lampen Kelley, E.M. Clements, K.V. Glazyrin, S.H. Jabarov, T.L. Phan, B.N. Savenko, H. Srikanth, M.H. Phan*. Physical Review B, 2018, v. 98, p.134435.

[20] *N.T. Dang, D.P. Kozlenko, S.E. Kichanov, S.G.Jabarov, A.I. Mammadov, R.Z. Mekhtieva, T.L. Phan, V.G. Smotrakov, V.V. Eremkin, B.N.Savenko*. Journal of Electronic Materials, 2017, v,46, p.3373.


**A.I. Mammadov, S.H. Jabarov, R.Z. Mehdiyeva, R.E. Huseynov**

## ATOMIC DYNAMICS AT HIGH AND LOW TEMPERATURES OF $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ HEXAFERRITE

$BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ hexaferrite was synthesized and the crystal structure was studied by X-ray diffraction. It was found that under normal conditions and at room temperatures, the crystal structure of this compound has hexagonal symmetry with the $P6_3/mmc$ space group. The lattice parameters correspond to the values: $a$ = 5.8842 Å and $c$ = 23.1774 Å. Atomic dynamics were studied of $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ hexaferrite in the range of low temperatures of - 190°C ≤ $T$ ≤ 20°C and high temperatures of 20°C ≤ $T$ ≤ 490°C. As a result of the analysis of the spectra obtained by the Raman spectroscopy method, it was determined that the structural phase transition does not occur in this compound over a wide temperature range -190°C ≤ $T$ ≤ 490°C. At the room temperature obtained Raman modes are observed at both low and high temperatures.

**А.И. Маммадов, С.Г. Джабаров, Р.З. Мехдиева, Р.Е. Гусейнов**

## АТОМНАЯ ДИНАМИКА ПРИ ВЫСОКИХ И НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ ГЕКСАФЕРРИТА $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$

Был синтезирован гексаферрит $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ и исследована кристаллическая структура методом дифракции рентгеновских лучей. Было обнаружено, что в нормальных условиях и при комнатной температуре кристаллическая структура этого соединения имеет гексагональную симметрию с пространственной группой $P6/_3mmc$. Параметры решетки соответствуют значениям: $a$ = 5,8842 Å и $c$ = 23,1774 Å. Изучена атомная динамика гексаферрита $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ в диапазоне низких температур - 190°C ≤ T ≤ 20°C и высоких температур 20°C ≤ T ≤ 490°C. В результате анализа спектров, полученных методом спектроскопии комбинационного рассеяния света, было определено, что структурный фазовый переход в этом соединении не происходит в широком диапазоне температур -190°C ≤ T ≤ 490°C. При комнатной температуре полученные рамановские режимы наблюдаются как при низких, так и при высоких температурах.

*Qəbul olunma tarixi: 17.07.2021*

# SONLU TEMPERATURDA $\omega$ MEZON – NUKLON MİNİMAL QARŞILIQLI TƏSİR SABİTİ $g_{\omega NN}(T)$

**N. Ə. NƏSİBOVA**
*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,*
*AZ1143, H.Cavid küç.131, Bakı, Azərbaycan*
n.nesibli88@gmail.com

Bu məqalədə AdS/KXD (Anti-de-Sitter/Kvant Xromodinamikası) yumşaq divar modelində $\omega$ vektor mezonun əsas və həyəcanlanmış hallarda olan nuklonlarla minimal qarşılıqlı təsir sabitinin ($g_{\omega NN}(T)$) temperatur asılılığına baxılmışdır. ω mezonun minimal qarşılıqlı təsir sabitinin temperaturdan asılılıq qrafiki qurulmuşdur.

**Aşar sözlər:** AdS/CFT duallıq, yumşaq divar modeli, vektor mezon, Güclü qarşılıqlı təsir sabiti
**PACS:**11.25. Tq.11.25.Wx. 13.75.Lb

## 1. GİRİŞ

Elementar zərrəciklərin qarşılıqlı təsir sabitləri və form-faktorlarının tədqiqi müasir nəzəri fizikanın qarşısında duran problemli məsələlərdən biridir.

Səpilmə matrisi nəzəriyyəsini güclü qarşılıqlı təsirin fenomenoloji məsələlərinə tətbiq etmək mümkün olmur. Buna səbəb KXD-də güclü qarşılıqlı təsir sabitinin kiçik enerjilərdə böyük qiymət almasıdır. Ötürülən enerji-impuls oblastını məhdudlaşdırmadığına görə AdS/KSN (Anti-de-Sitter/Konformal Sahə Nəzəriyyəsi) uyğunluğu prinsipi üzərində qurulan AdS/KXD modellərində isə belə çətinliklər meydana çıxmır. Məhz bu səbəbdən AdS/KSN uyğunluğu [1, 2] prinsipinə əsaslanan AdS/KXD modelləri [2-10] nuklonların mezonlarla qarşılıqlı təsir sabitlərinin və form-faktorlarının öyrənilməsində çox effektli bir metoddur.

Temperatur mühitində baş verən güclü qarşılıqlı təsirlər Kainatın ilkin mərhələsində meydana çıxan proseslər haqqında daha aydın təsəvvürlər yaradır.

Sonlu temperaturda AdS/KXD yumşaq divar modeli AdS metrikasının temperatura görə bükülməsi və temperaturdan asılı dilaton sahəsinin daxil edilməsi yolu qurulur.

AdS/Schwarzschild metrikası [11]

$$ds^2 = e^{2A(z)}[\, f(z,\ T)dt^2 - (d\bar{x})^2 - \frac{dz^2}{f(z,T)}] \tag{1}$$

kimi təyin olunur.

Burada *A(z)=log(R/z)*, *R AdS* fəzasının radiusu, $f(z,T) = z^4/H^4$ termal faktor, *H* - Havkinq temperaturu ilə $T=1/H\pi$ kimi əlaqəli olan hadisə üfüqünün vəziyyəti, $(\bar{x}, t)$ Minkovski fəzasının koordinatları, *z* - 5-ci ölçüyə görə koordinatdır. Eksponensial faktor isə inteqralı infraqırmızı sərhəddə sonlu etmək üçün daxil edilir.

Sonlu temperatura uyğun dilaton sahəsi [12] aşağıdakı kimi təyin olunur

$$\Phi(z,\ \ T) = K(T)^2 z^2 \tag{2}$$

burada,

$$K(T) = k * (1 + \Delta_T) \tag{3}$$

$$\Delta_T = -\frac{N_f^2T^2 - T^2}{12N_fF^2} - \frac{N_f^2T^4 - T^4}{144N_f^2F^4} \tag{4}$$

(3) və (4) ifadəsinə daxil olan *F=0.087 GeV, 0.1 GeV, 0.13 GeV* ... qiymətlər almaqla kiral limitdə şüalanma sabiti, $N_f=2,3,4$... kvark rayihə parametri və *k=383* olmaqla zərrəciyin kütləsi ilə əlaqəli parametrdir [13].

## 2. Sonlu temperaturda $\omega$ mezon ilə spini ½ olan barionların (nuklonların) minimal qarşılıqlı təsir sabiti.

$\Psi_{1M,\,2M}$ fermion sahələrinin vektor mezon sahəsi ilə minimal qarşılıqlı təsirinin laqranjian həddi $L^{(0)}$ bərabərdir [13]:

$$\mathcal{L}_{\omega NN}^{(0)} = \frac{1}{2}(\bar{\Psi}_1^M e_A^M \Gamma^M A_M \Psi_{1M} + \bar{\Psi}_2^M e_A^M \Gamma^M A_M \Psi_{2M})\,, \tag{5}$$

Burada, $e_A^M = z\eta_A^M = z\, diag\left(f(z,T), 1, 1, 1, -\frac{1}{f(z,T)}\right)$ olmaqla, 4 ölçülü fəzadan -5 ölçülü fəzaya keçid vielbeyni , $\Gamma^A=(\gamma^\mu, -i\gamma^5)$ isə Dirak matrisidir.

(5) ifadəsi aşağıda göstərilən sonlu temperaturdakı təsirin ifadəsində

$$S_{\omega NN}^{(0)y/d} = \int_0^\infty d^5x\sqrt{g}\, e^{-\Phi(z,T)}\mathcal{L}_{q/t}^{(0)} \tag{6}$$

nəzərə alınır. Müəyyən sadələşmələr aparılıqdan sonra, minimal qarşılıqlı təsir laqranjianının sonlu temperaturda $\omega$ vektor mezon- nuklon qarşılıqlı təsir sabiti üçün verdiyi əlavə $g_{\omega NN}^{(0)y/d}(T)$ ifadəsi aşağıdakı şəkildə olur:

131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com

$$g_{\omega NN}^{(0)y/d}(T) = \frac{1}{2}\int_0^\infty \sqrt{g}\, e^{-\Phi(z,T)} \frac{dz}{z^2} V_0(z,T)\, [|F_{1R}(z,T)|^2 + |F_{1L}(z,T)|^2]. \quad (7)$$

$\sqrt{g}$ metrikanın determinantıdır.
(7) ifadəsinə daxil olan $V_0=(z,T)$ $\omega$ vektor sahənin profil funksiyası olmaqla aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$V_0(z,T) = K(T)^2 z^2 \sqrt{2} L_0^{(1)}(K^2(T)z^2) \quad (8)$$

$F_{1L}(z, T)$ və sol $F_{1L}(z, T)$ isə sonlu temperatura nuklon sahəsinin uyğun sol və sağ profil funksiyaları olub

$$F_{1L}(z,T) = \sqrt{\frac{2\Gamma(n+1)}{\Gamma(m_L+n+1)}} K(T)^{m_L+1} z^{m_L+1/2} L_n^{m_L}(\Phi(z,T))$$

$$F_{1R}(z,T) = \sqrt{\frac{2\Gamma(n+1)}{\Gamma(m_R+n+1)}} K(T)^{m_R+1} z^{m_R+1/2} L_n^{m_R}(\Phi(z,T)). \quad (9)$$

kimi təyin olunur.

İfadələrə daxil olan $m$ parametri $m=\tau$-3/2 olunmaqla nuklonlar üçün $\tau$=3 və $m_L=\tau+1$, $m_R=\tau-1$ kimi təyin olunur. (9) ifadələrindəki profil funksiyaları aşağıdakı normallaşma şərtini ödəyir.

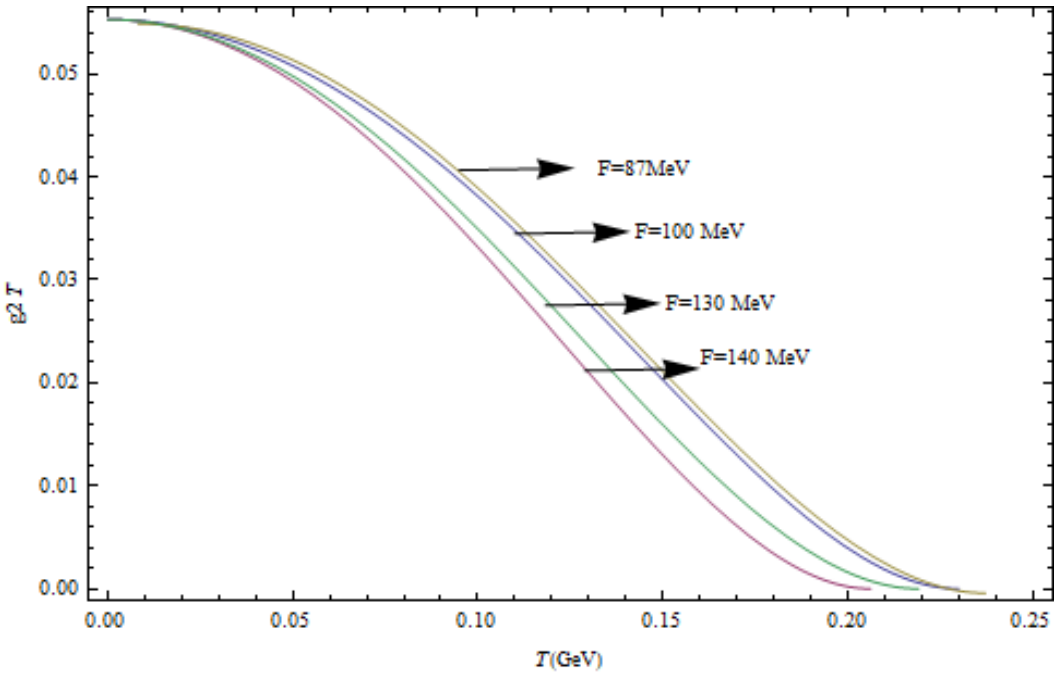
$$\int_0^\infty \frac{dz}{z^{2m_-}}\, e^{-\Phi(z,T)} F_{1L}(z,T) F_{1R}(z,T) = \delta_{nm} \quad (10)$$

Sonlu temperaturda kütlə spektri bərabərdir:

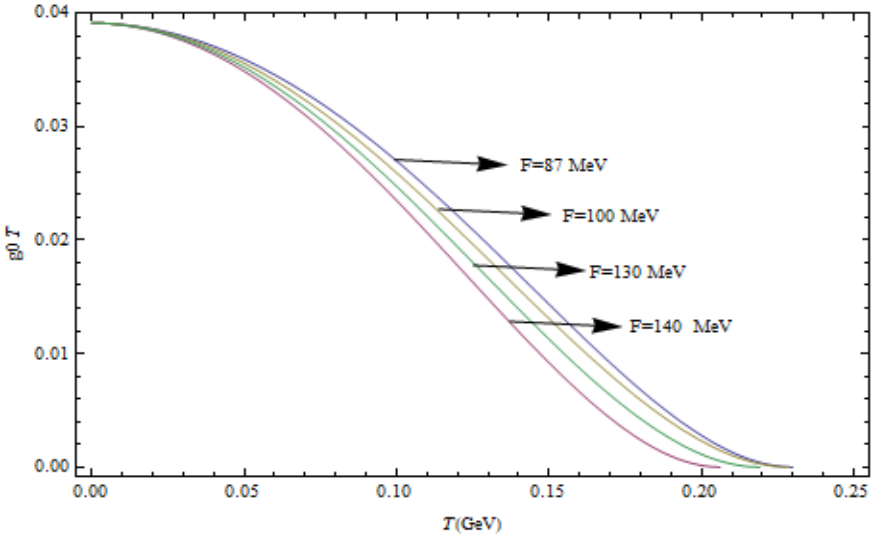
$$M(T) = M^2\,(0)(1+\Delta_T) + (6n-1)(n+m+1)\frac{\pi^4 T^4}{k^2} \quad (12)$$

burada, $M(T)$ temperatur, $M^2(0)$ isə soyuq hala uyğun kütlə spektridir [].

Beləliklə, şəkil 1 və şəkil 2 sonlu temperaturda $\omega$ mezonla əsas və həyəcanlaşmış haldakı nuklonların profil funksiyalarını minimal qarşılıqlı təsir sabitinin $g_{\omega NN}(T)$ ifadəsində nəzərə almaqla "Matematika" proqramının köməyi ilə qurulmuş qrafiklərini təsvir edir. Şəkillərdə sonlu temperaturda AdS/KXD-nin yumşaq divar modeli çərçivəsində $g_{\omega NN}$ $(T)$ -nin temperatur asılılığı $F$ şüalanma sabitinin müxtəlif qiymətlərində müqayisəli şəkildə tədqiq edilib.




*Şəkil 1.* Əsas halda olan $\omega$ mezonla, əsas halda olan nuklonların $g_{\omega NN}$ $(T)$ qarşılıqlı təsir sabitinin $F$=87MeV, 100 MeV, 130 MeV, 140 MeV qiymətlərində temperaturdan asılılığı.




*Şəkil 2.* Əsas halda olan $\omega$ mezonla, həyəcanlanmış halda olan nuklonların $g_{\omega NN}$ $(T)$ qarşılıqlı təsir sabitinin $F=87$ MeV, 100 MeV, 130 MeV, 140 MeV qiymətlərində temperaturdan asılılığı.

## NƏTİCƏ

Qrafik müsbət oblastda yerləşir və nuklonların $\omega$ mezonla minimal qarşılıqlı təsir sabitinin $g_{\omega NN}(T)$ qiyməti temperaturun artması ilə kəskin azalır. Havkinq temperaturunda bu qiymət sıfra bərabər olur. Havkinq temperaturundan daha yuxarı temperatur oblastı qvark-qlüon plazma halının yaranmasına uyğun gəlir. Aydındır ki, belə bir mühitdə zərrəciklər arasında qarşılıqlı təsir olmayacaq. Deməli, yalnız Havkinq temperaturundan aşağı temperaturlarda qarşılıqlı təsirlər mövcuddur.


[1] *B. Berenstein, J.Maldacena, Nastase H. Strings.* İn flat space and pp waves from N=4 Super Yang Mills, JHEP, 2002, 1-154.

[2] *Z. Abidin and C. Carlson.* Nucleon electromagnetic and gravitational form factors from holography. Phys. Rev. D, 2009, 79, №11, 115003.

[3] *Z. Abidin, C. Carlson.* Form-factors of vector mesons in an AdS/QCD model.Phys. Rev. D, 2007, 77, №9, 095007.

[4] *Ahn. H. Hong D., Park C. and S. Siwach.* Spin 3/2 Baryons and Form Factors in AdS/QCD, Phys. Rev.D, 2009, 054001.

[5] *C. Alexandrou, M. Brinet, J. Carbonell et. all.* Axial Nucleon form factors from lattice QCD. Phys. Rev. D, 2011, 83, №4045010.

[6] *T. Aliev, A. Ozpineci, M. Savci and V. Zamiralov.* Vector meson-baryon strong coupling contants in light cone QCD sum rules. Phys. Rev. D, 80, 2009, 016010.

[7] *O. Andreev.* $1/q^2$ Corrections and Gauge/String Duality, 73, Phys. Rev., 2006, 107901.

[8] *I.Anikin, Y. Braun, N. Offen.* 3, Axial form factor of the nucleon at large momen-tum transfers.Phys. Rev., 2016, 3, 034011.

[9] *S. Brodsky, G. Teramond.* 96, Hadronic Spectra and Light-Front Wave functions in Holographic QCD. Phys. Rev. Lett., 2006, 201601.

[10] *S. Brodsky, G. Teramond, H. Dosch, J. Erlich.* Light-Front Holographic QCD and Emerging Confinement. 584, Phys.Rept., 2015, 1-5.

[11] *Thomas Gutsche, Valery E. Lyubovitskij, Ivan Schmidtand, Andrey Yu.Trifonov, Thomas Gutsche.* Baryons in a soft-wall AdS-Schwarzschild approach at low temperature. 99, Phys.Rev., 2019,114023.

[12] *Thomas Gutsche, Valery E. Lyubovitskij, Ivan Schmidtand Andrey Yu. Trifonov, Thomas Gutsche.* Mesons in a soft-wall AdS-Schwarzschild approach at low temperature. 99, Phys.Rev., 2019, 054030.

[13] *Narmin Huseynova and ShahinMamedov.* ρ meson-nucleon coupling constant from the soft-wall AdS/QCD model. H*igh Energy Physics* 2015, 1408.5496

[14] *M. Henneaux.* Boundary terms in the AdS/CFT correspondence for spinor fields /in the proceedings of Conference: Mathematical methods in modern theoretical physics, Tbilisi:1998, pp. 161-170.

[15] *M. Henningson, K. Sfetsos.* Phys.Lett. B, 1998, v.431, №1-2, p.63-68.

[16] *A. Koshelev and O. Rytchkov.* The AdS/CFT correspondence. Phys. Lett. B, 1999, №450, pp. 368-376.

[17] *P. Matlock, K. Viswanathan.* The AdS/CFT Correspondence for the Massive Rarita-Schwinger Field. Phys. Rev. D, 2000, v.61, p. 026002.

[18] *W. Mück, K. Viswanathan.* Field Theory Correlators from Classical Field Theory on Anti-de Sitter Space II. Vector and Spinor Fields. Phys. Rev. D, 1998, v.58, p.106006.

[19] *R. Rashkov.* Note on the boundary terms in AdS/CFT correspondence for Rarita-Schwinger field Mod. Phys. Lett. A, 1999, №14, pp. 1783-1796.

**N. A. Nasibova**

## TEMPERATURE DEPENDENCE OF $\omega$ MESON - NUCLEONS MINIMAL COUPLING CONSTANT $g_{\omega NN}(T)$

In this paper, the temperature dependence of the minimal coupling constant of the $\omega$ vector meson ($g_{\omega NN}(T)$) with nucleons which are in ground and excited states has been considered in the framework of the soft - wall model of AdS/QCD (Anti-de-Sitter/Quantum Chromodynamic). The temperature dependence graph of the ω vector meson minimal coupling constant has been plotted.

**Н.А. Насибова**

## КОНСТАНТА МИНИМАЛЬНОЙ СВЯЗИ $\omega$ МЕЗОНА С НУКЛОНАМИ ПРИ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ $g_{\omega NN}(T)$

В данной работе температурная зависимость минимальной константы связи ω векторного мезона с нуклонами ($g_{\omega NN}(T)$) в основном и возбужденном состояниях в модели мягкой стены АДС/КХД (Анти-де-Сеттер/Квантовая Хромодинамика). Построена температурная зависимость минимальной константы взаимодействия критерия.

*Qəbul olunma tarixi: 22.07.2021*

# 10 FAİZLİ QADOLİNİUMLA AŞQARLANMIŞ KARBON NANOBORUNUN VOLT-AMPER XARAKTERİSTİKASI

**R.Q. ABASZADƏ[1,2]**
[1]*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,*
*Az-1143, Bakı şəhəri, H.Cavid pr. 131.*
[2]*Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti,*
*Az-1010, Bakı şəhəri, Azadlıq pr.20*
E_mail: abaszada@gmail.com r.abaszada@physics.science.az

Təqdim olunan məqalə 10 faizli qadoliniumla aşqarlanmış karbon nanoborunun volt-amper xarakteristikasına həsr olunmuşdur. Belə ki, düzbucaqlı paralelepiped şəklinə salınmış karbon nanoborunun volt-amper xarakteristikası müəyyənləşdirilmiş və gərginliyin müəyyən qiymətlərində əks differensial effekt müşahidə olunmuşdur. Müşahidə olunan effekt aşqarlanmış karbon nanoborularda daha intensiv xarakter daşıyır ki, bu da aşqarlanmanın təsiri ilə bağlıdır.

**Açar sözlər:** Karbon nanoboru, volt-amper xarakteristikası
**PACS:** 51.50.+V, 52.80.−s, 61.48 De +C, 73.63.Fg

## 1. GİRİŞ.

Elm və texnikanın sürətli inkişafı nanoelektronika qurğularının yeni modifikasiyalarla zənginləşdirilməsi aktuallığını artırmışdır. Bu da, öz növbəsində cihazqayırma sahəsində inqilabi yeniliklərlə müşahidə olunmağa başlamışdır. İlk dəfə 1991-ci ildə yaponiyalı alim Saomi İidjima tərəfindən karbon nanoboruların alınması həyata keçirilmiş və mühüm xüsusiyyətlərinin olması müəyyənləşdirilmişdir [1]. Elektrik qövsü metodu ilə alınmış karbon nanoborunun təmizliyi, keyfiyyəti, səth morfologiyası skanedici elektron mikroskopu (SEM) və Raman səpilməsi metodları ilə analiz edilmişdir. Yüksək keyfiyyətli karbon nanoborunun sintez olunması və uyğun olaraq Raman spektrində müşahidə olunan piklərin azdivarlı karbon nanoborulara xas olduğu göstərilmişdir [2]. Elektrik qövsü metoduna əsasən alınmış karbon nanoborunun volt-amper xarakteristikası tədqiq olunmuşdur. 25MPa sıxıcı təzyiqin köməyi ilə düzbucaqlı paraleopiped şəklinə salınmış karbon nanoborunun volt-amper xarakteristikası ölçülmüş, gərginliyin müəyyən qiymətlərində əks differensial effekt müşahidə olunmuşdur [3]. Qrafen əsaslı qrafen oksid nümunəsinin otaq temperaturunda tədqiqi zamanı da əks differensial effekt müşahidə olunmuşdur. Bunun effektik laylararası sulfur qrupları ilə əlaqəli olduğu müəyyənləşdirilmişdir. Bundan başqa göstərilmişdir ki, əks differensial effektin funksional qrupların yaratdığı lokal səviyyələr arasındakı keçidlərlə də bağlıdır [4].

Məlum olduğu kimi, nanoquruluşların volt-amper xüsusiyyətlərinin öyrənilməsi həm təcrübi, həm də nəzəri cəhətdən olduqca mühüm əhəmiyyətə malikdir. Belə ki, bu tədqiqatlar nəticəsində yükdaşıyıcıların generasiyasının, rekombinasiyasının, eləcə də köçürmə hadisələrinin öyrənilməsi istiqamətində lazimi informasiyaların alınmasına köməklik göstərir. Bundan başqa, volt-amper xarakteristikasının tədqiqi ilə cihazqayirma istiqamətində yeni nailiyyətlət əldə etmək mümkündür.

Karbon nanoborularının nəzəri və təcrübi olaraq elektrik və maqnit xassələrinin araşdırılması zamanı yükdaşıyıcıların kvant təbiəti ilə bağlı müvafiq effektlər müşahidə olunmuşdur. Keçiricilik spektrinin və VAX analizinin nəticələri göstərir ki, karbon nanoborularında ballistik keçiricilik [5-7], tunel [8] və pilləvari (sıçrayışlı) keçiricilik [9, 10] müşahidə olunur. Hal-hazırda karbon nanoboruların əsasında yeni növ tranzistorların yaradılması mümkün olmuşdur [11].

Təqdim olunan məqalədə məqsəd kimi 25MPa təzyiq altında sıxılaraq düzbucaqlı paralelepiped şəklində hazırlanmış karbon nanoborunun volt-amper xarakteristikasını tədqiq etməkdən ibarətdir.

## 2. TƏCRÜBİ HİSSƏ

Təmiz karbon nanoboru və 10 faizli qadoliniumla aşqarlanmış karbon nanoborular uzunluğu 12 mm, eni 4 mm və dərinliyi 4 mm olan düzbucaqlı paralelepiped şəkilli yuvanın içərisinə doldurularaq 10 dəqiqə ərzində 25MPa sıxıcı təzyiq altında saxlanılmışdır. Nümunəyə bir-birinə paralel yerləşdirilmiş kontaktlar qoyulmuş, müqavimətlərin də uyğun olaraq $R$=0,3kOm və $R$=0,4kOm olduqları nəzərə alınaraq, volt-amper xarakteristikaları müəyyənləşdirilmiş və aşağıdakı şəkildə qrafikləri alınmışdır.

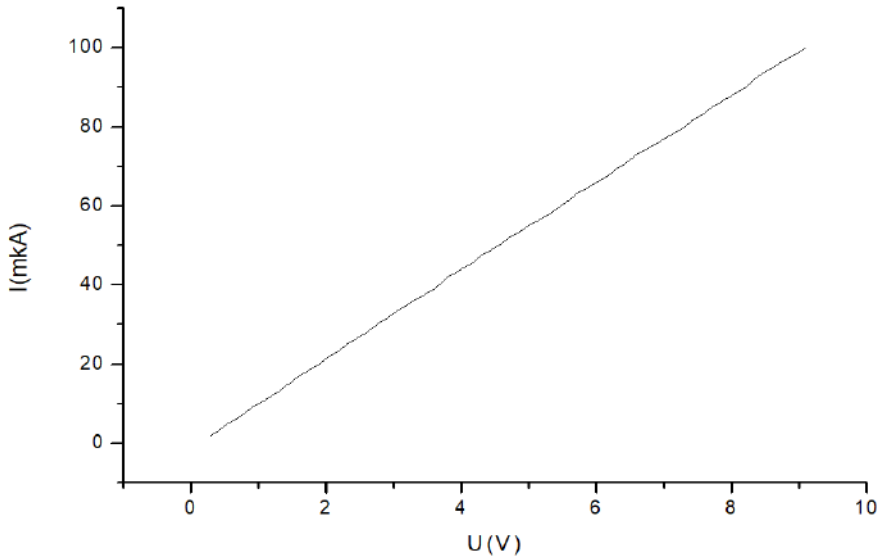
## 3. NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil 1-dən görünür ki, gərginliyin 1,3V qiymətinə qədər cərəyan şiddəti xətti xarakter daşıyır. $U$=1,3 olduqda, cərəyan şiddətinin artması ilə gərginliyin kvadratik artması baş verir. Bu artım $U$=1,5 qiymətində maksimumla nəticələnir, 1,6V-da isə yenidən xətti formada artmağa başlayır. Bu proses gərginliyin 1,65÷1,7V; 1,8÷1,9V; 1,95÷2,05V; 2,05V÷2,1V; 2,2V÷2,3V; 3,1V÷3,24V; 3,9V÷4,07V; 4,12V÷4,3V qiymətlərində baş verir. Şəkil 2-dən görünür ki, gərginliyin 0,23V qiymətinə qədər cərəyan şiddəti xətti xarakter daşıyır. $U$=0,23V olduqda, cərəyan şiddətinin artması ilə gərginliyin kvadratik artması baş verir. Bu artım $U$=0,47 qiymətində maksimumla nəticələnir, 0,47V-da isə yenidən xətti formada artmağa başlayır. Bu proses gərginliyin 0,68÷0,8V; 1,1÷1,22V;

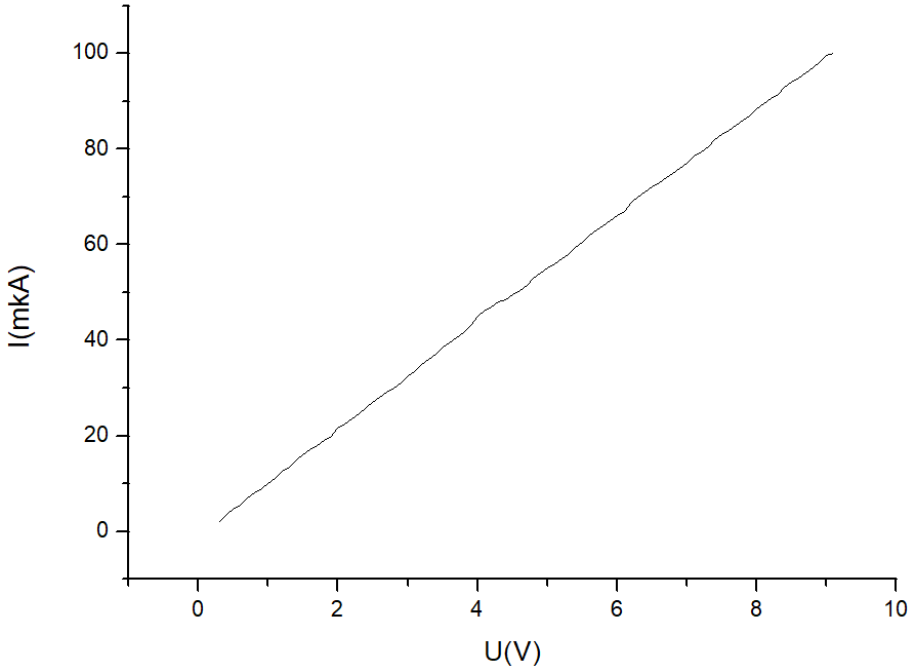


131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com

1,85÷2,07V; 2,3V÷2,4V; 3,05V÷4,3V qiymətlərində pilləvari artımla, 4,1V÷4,3V; 4,85V÷5,01V qiymətlərində isə piklərlə müşahidə olunur. Cərəyan şiddətinin artmasıyla gərginliyin belə dəyişmələrə məruz qalması əks differensial effektin baş verməsiylə izah oluna bilər ki, bu da öz növbəsində aşağı ölçülü sistemlərin tətbiqi baxımından olduqca mühüm xüsusiyyətlərdən hesab olunur. Bu, nanoborunun diametrinin dəyişməsi və tunel cərəyanının meydana çıxması ilə bir başa bağlıdır. Karbon nanoborunun və qadoliniumla aşqarlanmış karbon nanoborunun volt-amper xarakteristikasının müqayisələli analizinin nəticələri aşqarlanmanın hesabına əks differensial effektin daha çox müşahidə olunduğunu deməyə imkan verir. Bu da, öz növbəsində müasir elektronika üçün qurğuların yaradılmasında smart materiallar kimi istifadəsini daha da aktual edir.




*Şəkil 1.* Elektrik qövsü metodu ilə alınmış və 25MPa təzyiq altında sıxılmış karbon nanoborunun VAX-sı.




*Şəkil 2.* 10 faizli qadoliniumla aşqarlanmış və 25MPa təzyiq altında sıxılmış karbon nanoborunun VAX-sı.


[1] *S. Iidjima*. Synthesis of Carbon Nanotubes, Nature, 354, 1991, pp.56-58.

[2] *R.Q. Abaszadə, S.A. Məmmədova, R.İ. Ələkbərov, A.M. Nəbiyev, E.M. Əliyev, Ş.K. Səfərəliyev, O.A. Kapuş*. Karbon nanoboruların alınması və analizi, Texniki Universitetin Elmi Əsərləri, №3, 2019, səh.11-18.

[3] *R.Q.Abaszadə, İ. Qasımoğlu, R.İ. Ələkbərov, O.A. Əliyev, E.Ə. Xanməmmədova*. Energetikanın problemləri, №2, 2021, səh.13-16.

[4] *S.R. Figarova, E.M. Aliyev, R.G. Abaszade, R.I. Alekberov, V.R. Figarov*. Journal of Nano Research, 2021, vol.67, pp.25-31.

[5] *Poncharal Ph. C. Berger, Yi Yan, Z.L. Wang, W.A. de Heer*. J. Physical Chemistry, 2002, vol.106. pp.121004–121029.
[6] J. *Karamdel, M.T. Ahmadi, M. Damghanian, B.Y. Majlis, C.F. Dee, R. Ismail.* Materials Research Innovations, 2009. v.13 (3), pp.211–213.
[7] *Y. Chiu, V.V. Deshpande, H. W.Ch. Postma.* Phys. Rew. Letters, 2005, vol.95, pp.226101–226104.
[8] *А.А. Захарченко, Б.К. Петров, С.И. Курганский, А.Ф. Клинских.* Вестник ВГУ, 2008, №1, pp. 29–34.
[9] *M.A. Grujicic, G. Gao, W. Roy.* Journ. of Materials Science, 2004, vol.39, pp.4441–4449.
[10] *С.В.Булярский, Ю.В.Рудь, Л.Н.Вострецова, А.С. Кагарманов, О.А. Трифонов*. ФТП, 2009, том.43, № 4, стр. 460–466.
[11] *A. Srivastava, J.M. Marulanda, Y. Xu, A.K. Sharma*. Carbon - Based Electronics, Transistors and Interconnects at the Nanoscale, Taylor & Francis Group LLC, 2015, 140 p.

**R.G. Abaszade**

## VOLTS-AMPERE CHARACTERİSTİCS OF CARBON NANOTUBES DOPED 10 PERCENTGADOLİNİUM

The presented article is devoted to the volts-ampere characteristics of carbon nanotubes doped with 10% gadolinium. Thus, the volts-ampere characteristics of the carbon nanotube were measured in the form of a rectangular parallelepiped, and a negative differential effect was observed at the given voltage values. The observed effect is more pronounced when using carbon nanotubes, which is associated with the effect of additives.

**Р.Г. Абасзаде**

## ВОЛЬТ-АМПЕРНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК, ЛЕГИРОВАННЫХ 10 ПРОЦЕНТНЫМ ГАДОЛИНИЕМ

Изучены вольт-амперные характеристики углеродных нанотрубок прямоугольного сечения, легированных 10% гадолинием и установлено в них наличие ярко выраженного отрицательного дифференциального эффекта.

*Qəbul olunma tarixi: 17.08.2021*

# NÖQTƏVİ DEFEKTLƏRİN GaX(X=S, Se) TİPLİ İKİÖLÇÜLÜ (2D) KRİSTALLARININ XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ VƏ ENERGETİK PARAMETRLƏRİN SIXLIQ FUNKSİONALI NƏZƏRİYYƏSİ İLƏ HESABLANMASI

**S.N. MUSTAFAYEVA, S.S. HÜSEYNOVA**
*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu*
*H.Cavid pr.131,AZ-1143,Bakı, Azərbaycan*
*E mail: solmust@gmail.com*

GaS quruluşlu laylı birləşmələrin GaS (36, 48 atomlu) və GaSe (48 atomlu) nöqtəvi defektli superqəfəslərinin sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi (DFT) metodu ilə hesablamaları aparılmışdır. Bu superqəfəslər üçün hesablanan qəfəs parametrləri təcrübi qiymətlərlə uyğunluq təşkil edir. Həm Ga, həm də S vakansiyası olan superqəfəslərin zona quruluşu, hallar sıxlığı və vakansiya halları üçün atomlar arasındakı məsafə lokal sıxlıq yaxınlaşması (LDA) və ümumiləşdirilmiş qradiyent yaxınlaşması (GGA) çərçivəsində hesablanmışdır. Həm vakansiyasız, həm də təkvakansiyalı superqəfəslər üçün qadağan olunmuş zolağın eninin ($\Delta E_g$) LDA ilə hesablanmış qiymətlərinin GaS və GaSe üçün olan təcrübi qiymətlərdən kiçik olması DFT çərçivəsində izah edilmişdir. Bu uyğunsuzluğu düzəltmək üçün, daha dəqiq desək, $\Delta E_g$ qiymətini təcrübi qiymətə uyğun tənzimləmək üçün qradiyent korreksiyası metodundan (GGA-PEA yaxınlaşması) istifadə edilmişdir. Superqəfəslərin energetik parametrlərinin hesablanmasında yalnız elektron sıxlığından deyil, həm də onun törəmələrindən və ya korrelyasiya-mübadilə funksionalına əlavələrdən (korreksiyadan) istifadə edilmişdir. Vakansiyalı GaS superqəfəsində lokal maqnitləşmə halı spin polyarizasiyası nəzərə alınmaqla sıxlıq funksionalı üsulu ilə hesablanmışdır.

**Açar sözlər:** GaS(Se), funksional sıxlıq nəzəriyyəsi, DFT-hesablamaları, superqəfəslər, məxsusi defektlər, qəfəs və energetik parametrlər, magnit momenti
**PACS:** 61.72.Ji, 07.05.Tp, 74.62Dh

## 1. GİRİŞ

Laylı quruluşlu $A^{III}B^{VI}$ qrup xalkogenid yarımkeçiricilər (GaX (X = S, Se)) yüksək elektrik, optik və mexaniki xassələrlə birlikdə kristalloqrafik anizotropiya səbəbindən praktiki əhəmiyyətli materiallardır. Bu ikiölçülü (2D) laylı birləşmələr nano- və mikroelektronikada qeyri-xətti optikada, optoelektronikada, elektrik sensorlarında və teraherts cihazlarında tətbiq üçün perspektivlidir. GaS və GaSe, heksaqonal quruluşda kristallaşan materiallardır ki, onlarda hər bir lay qatı van der Waals (VDW) qüvvələri ilə birləşən S-Ga-Ga-S tipli təkrarlanan kristalloqrafik elementlərdən ibarətdir. Laylı GaS, qadağan olunmuş zolağın eni ($E_g$) ~2.5 eV olan əsasən $n$-tipli yarımkeçiricidir [1]. GaSe isə $E_g \approx 2$ eV olan $p$-tipli elektrik xüsusiyyətlərini nümayiş etdirir [2]. GaS və GaSe əsasən elektron cihazlarda kvant nöqtələri (QDs), nano tellər və nanoçubuqlar kimi nanoölçülü quruluşlar şəklində istifadə oluna bilər [3].

Bu nanoölçülü strukturların əksəriyyəti özünütəşkiletmə prosesləri ilə formalaşır. Elektron cihazlarda bu nanoquruluşlardan səmərəli istifadə etmək üçün özünütəşkiletmə hadisələrini anlamaq və bu nanoquruluşların təkamülünü idarə edə bilmək vacibdir. Bu özünü təşkil edən hadisələrin səth xassələri və nanoquruluşlarda lokal deformasiya/gərginlik paylanmaları ilə əlaqəli olduğu məlumdur [4, 5]. Ancaq nanoquruluşlu materialların bu vacib xassələrini təcrübi üsullarla birbaşa ölçmək asan deyil. Digər tərəfdən, atomistik modelləşdirmə üsullarından istifadə edildikdə bu nanoölçülü xassələr olduqca effektiv şəkildə araşdırıla bilər. Nano quruluşlu materialların atom səviyyəsindəki davranışını öyrənməyin ən dəqiq üsulu ilkinlik prinsipindən (ab initio) olan hesablamalardır. Ancaq ilkinlik prinsipindən olan hesablamalarda istifadə ola biləcək atomların sayı çox məhduddur (bir neçə yüz). Burada qeyd etmək lazımdır ki, ölçüsü 10-20 nm olan bir kvant nöqtəsində və ya kvant teldəki atomların sayı bir neçə yüz minə çata bilər. Buna görə də, nanostrukturların təkamülünün nəzəri araşdırmaları üçün milyonlarla atomu əhatə edə bilən yarıempirik atomlararası potensiala əsaslanan atomistik modelləşdirmədən də istifadə olunur.

Anizotropiya xüsusiyyətləri GaX tipli kristallarda energetik quruluşa təsir edir. GaX-də laylar daxilində olan əsasən kovalent rabitə və laylar aralarındakı zəif VDW əlaqəsi GaX-ə anizotrop xassələri verir. Məsələn, GaSe kristalından olan nazik lövhə nümunələrdən keçən, elektrik yükünün və kütləsinin ötürülməsi ilə əlaqəli olmayan həyəcanlanmış elektron halı (eksiton) [6] işində tədqiq edilmişdir. Fotolüminessensiya (FL) və absorbsiya təcrübələri, 10 K-də GaSe nümunəsinin $c$-oxuna perpendikulyar olaraq qütbləşən işığ vasitəsi ilə aparılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, eksitonun udma maksimumu ilə FL spektri maksimumu (ən yüksək enerjili zirvəsi) arasında ~34 meV olan açıq enerji fərqi müşahidə olunur. Fotolüminessensiya və udma spektrlərinin temperaturdan asılılığı göstərir ki, eksitonun udma zirvəsi sərbəst eksiton və bağlı eksitonun vəziyyətləri arasındakı enerji fərqi ilə əlaqəlidir. FL zirvəsi 10 K-də bağlı eksitonun rekombinasiyasından qaynaqlanır. Güclü bağlı eksitonun bu təsiri 50 K-ə qədər sabitdir. Üstəlik, inteqral FL intensivliyinin və FL ömrünün temperaturdan asılılığı göstərir ki, FL şüalanması 0.5 meV çıxarılmış aktivasiya enerjisinə malik olan qeyri-şüalanma proseslə müşahidə edilir. Beləliklə göstərilmişdir ki, GaSe nazik lövhədə bağlı eksiton və sərbəst eksiton vəziyyətləri quruluşdan asılı olaraq güclü dəyişir. Eksitonun udma maksimumu ilə 50 K-dən aşağı olan FL maksimumu arasında böyük enerji fərqi müşahidə edilir.

131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com

GaX tip 2D materialların fiziki xassələri təcrübi yollarla çoxdan tədqiq edilir [1,2], lakin müasir hesabama üsulları ilə GaX üçün tapılan [7, 8] və ya proqnozlaşdırılan parametrlərə defektlərin təsiri az tətdiq edilib, hesablamaların dəqiqliyi lazımı səviyyədə deyil və bəzi hallarda onlar təcrübi qiymətlərlə uzlaşmirlar. Bu uyğunsuzluqlar həm quruluş, həm kimyəvi əlaqənin xüsusiyyətləri, həm də istifadə edilən hesablama üsullarının dəqiqliyi ilə təyin edilir.

Bu işin məqsədi GaX heksaqonal quruluş tipində olan nizamlanmış vakansiyalı GaS və GaSe laylı kristalların qəfəs parametrlərini, zona-elektron quruluşlarını və maqnitlənməsini hesablamaqdır.

## 2. HESABLAMA METODLARI

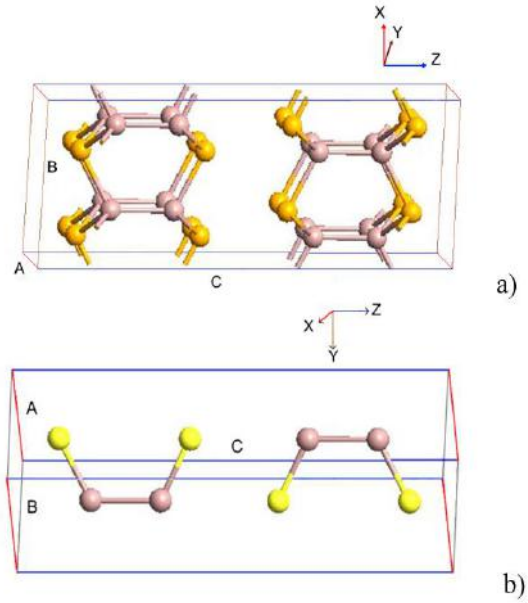
Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi (density functional theory - DFT) çərçivəsində hesablamalar lokal sıxlıq yaxınlaşmasından istifadə etməklə Atomostix ToolKit proqramı vasitəsilə yerinə yetirilmişdir. Hesablama metodikası [9, 10] işlərində yazıldığı kimi aparılmışdır. Hesablamalarda Double Zeta Polarized (DZP) bazis setləri istifadə olunmaqla, Perdew-Zunger (PZ) mübadilə korelyasiya funksionalı tətbiq olunmuşdur. Elektron-ion qarşılıqlı təsiri normanı qoruyan Fritz-Haber-Institute (FHI) tam relyativistik ion psevdopotensialları ilə nəzərə alınmışdır. Baxılan halda kristalın strukturunun optimallaşdırılması zamanı atomlararası qarşılıqlı təsir qüvvəsinin maksimal qiyməti 0.01eV/Å, mexaniki gərginlik tenzorunun maksimal qiyməti isə 0.01eV/Å$^3$-dan kiçik olana qədər, yəni tarazlıq quruluş parametrlərinə gətirilənə qədər optimallaşdırma proseduru davam etdirilmişdir. Brillüen zonası üzrə inteqrallama Monkhorst-Pack sxemi üzrə 2x2x2 *k*-nöqtə istifadə olunmaqla xüsusi nöqtələr üzrə cəmləmə ilə əvəz olunmuşdur. Dalğa funksiyalarının ayrılışında kinetik enerjinin maksimal qiyməti 150 Ry-i aşmamışdır. Təməl prinsiplərdən hesablamalar GaS-in 36, 48 və GaSe-nin 32 atomlu, o cümlədən vakansiya saxlayan superqəfəsləri üçün aparılmışdır.

Sıxlıq funksional nəzəriyyəsi hesablamalarında Vyana ab initio simulyasiya paketi (VASP) kodlaşdırılmış proyektorda artırılmış dalğa (PAW) metodu tətbiq olunmuşdur və mübadilə korrelyasiya funksiyası üçün ümumiləşdirilmiş qradiyent yaxınlaşmasından (GGA) [11] istifadə olunmuşdur.

## 3. NƏTİCƏLƏR VƏ MÜZAKİRƏLƏR

3.1 Kristalik qəfəs parametrləri

İdeal kristal, bildiyimiz kimi, dövri qəfəs üzərində qurulmuş üçölçülü atomlardan ibarətdir. Belə bir kristalda defektlərin olması bu dövri quruluşu pozur və materialın xassələrini əhəmiyyətli dərəcədə dəyişdirir. GaS və GaSe kristallarında nizamlaşdırılmış nöqtəvi məxsusi defektlərin bu materialların xassələrinə təsirinin hesablanmasının nəticələrinə baxaq.




*Şəkil 1.* 32 atomlu GaSe (a) və GaS(b) birləşmələrinin primitiv özəyinin təsviri

Əvvəlcə GaS və GaSe laylı birləşmələri üçün quruluşun sadə (şəkil 1) halına baxaq. Şəkildə sarı rəngdə S(Se) elementi, çəhrayı rəngdə isə Ga elementi təsvir edilmişdir. Heksaqonal quruluşda olan qəfəs parametrlərində elektron xassələrinin hesablamaları üçün (GaSe)32, (GaS)36 və 48 atomlu superqəfəslərdən istifadə olunmuşdur.

Cədvəl-1-də $Ga_{18}S_{18}$ superqəfəsi üçün qəfəs parametrlərinin, qadağan olunmuş zolağın eni $\Delta E_g$ və təcrübi nəticələrin müqayisəsi verilmişdir.

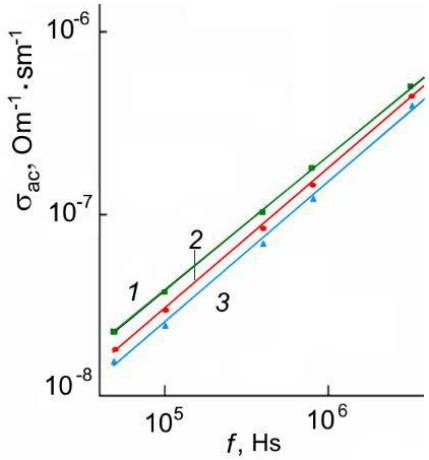
Cədvəl 1.

| $Ga_{18}S_{18}$ parametri | Hesablama | | Eksperiment, 300 K | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | LDA | GGA | [12] | [13] | [14] | (JCPDC card, No. 30-0576) |
| *a*, Å | 3.585 | 3.584 | 3.583 | 3.581 | 4.002 | 3.59 |
| *c*, Å | 15.50 | 15.47 | 14.475 | 15.450 | 15.44 | 15.49 |
| $\Delta E_g$, eV | 1.65 | 3.83 [14] | 2.51 | 2.53 | | |

Kristal sonsuz təkrarlanan sıralardan, torlardan, qəfəslərdən ibarətdir və içindəki atom nümunəsinin detalları eyni şəkildə davamlı olaraq təkrarlanmalıdır. İdeal kristaldakı (o cümlədən, GaS, GaSe) bütün halların dalğa funksiyaları bütün kristalda paylanır və hər vahid qəfəsdə eyni ehtimal amplituduna malikdir. Bu səbəbdən, kristalloqrafik dövrilik (periodiklik) prinsipi, lokal vəziyyətlərin, yəni dalğa funksiyaları sonlu vahid qəfəs xaricində məsafə ilə sönən vəziyyətlərin, mövcud olmasına icazə vermir.

Bununla belə, hər hansı bir aşqarın kristala daxil edilməsi və ya başqa bir defektin quruluşda ortaya çıxması səbəbindən, quruluşda periodiklik pozulur və lokal enerji vəziyyətlərə icazə verilir. Əksər hallarda lokal vəziyyətlər kristalın əsas energetik boşluğunda ya-

ranır ki, bu da yarımkeçiricilərin (GaS, GaSe) xassələrinə (elektrik, optik, fotovoltaik, termoelektrik) güclü təsir göstərir.




*Şəkil 2.* GaS monokristalının tezlikdən asılı olan AC-keçiriciliyi: şüalanmadan əvvəl (əyri 1) və elektron şüalanmasından sonra (əyri *2* – şüalanma dozası $2\cdot10^{12}$ sm$^{-2}$) və (əyri *3* – şüalanma dozası $10^{13}$ sm$^{-2}$) .

Dəyişən cərəyanda keçiriciliyin (alternating current (AC) conductivity) ölçülməsi ilə apardığımız təcrübələrin nəticələri, məsələn, GaS monokristalının ($\Delta E_g$ = 2.51 eV) elektronlarla müxtəlif dozalarda şüalandırılması göstərir ki, 300 K-də şüalanmadan əvvəl (əyri *1*) və sonra (əyrilər *2* və *3*) kristalın keçiriciliyi tezlikdən asılı olaraq əhəmiyyətli dərəcədə fərqlənir (şəkil 2).

GaS monokristalının şüalanması radiasiya defektlərinin yaranmasına səbəb olur və kristalda olan defektlərin tavlanmasını və köçürülməsini stimullaşdırır. Bu hal Fermi səviyyəsinin yaxınlığındakı lokal halların enerjisinin yenidən bölgüsünə gətirib çıxarır. Buna görə də, GaS nümunəsindəki elektron şüalanma dozası toplandıqca Fermi səviyyəsinə yaxın lokallaşdırılmış halların enerji zolağı genişlənir.

### 3.2 GaS superqəfəsində Ga və S vakansiyası

Cədvəl 2-də 36 və 48 atomdan ibarət olan vakansiyalı GaS superqəfəslərində qəfəs parametrləri, zona quruluşu, ferromaqnit (FM) və antiferromaqnit (AFM) halları üçün alınan nəticələr verilib.

Cədvəl 2.

| $Ga_xS_x$ superqəfəsdə vakansiya halı | Vakansiyanın yaratdığı enerji səviyyəsi, eV | Lokal maqnit momenti | Vakansiyalı $Ga_xS_x$ qəfəs parametrləri, Å |
|---|---|---|---|
| $V_{Ga}$ ($Ga_{23}S_{24}$) | 0.45 | $0.395\mu B$ (FM)<br>$0.20\mu B$ (FM) [15] | $a$ = 3.585, $c$ = 15.500 |
| $V_{2Ga}$ ($Ga_{22}S_{24}$) | 1.3 | AFM | $a$ = 3.585, $c$ = 15.500 |
| $V_{Ga}$ ($Ga_{17}S_1$) | 0.6 | AFM | $a$ = 4.002, $c$ = 15.440 |
| $V_S$ ($Ga_{18}S_{17}$) | 1.02 | AFM | $a$ = 4.002, $c$ = 15.440 |

Hesablamalar göstərir ki, tək Ga vakansiyası ($a$=3.585Å, $c$ = 15.500 Å) halında superqəfəs ($Ga_{23}S_{24}$) $V_{Ga}$ olan sahədə lokal maqnit momenti ($\mu B$) əldə edir. Superqəfəsin $V_{Ga}$ nəzərən başqa sahələrində spin yuxarı və spin aşağı halların eyni olduğu müşahidə edilir ki, bu da antiferromaqnit halına uyğundur. Başqa sözlə, məxsusi Ga vakansiyaları ($V_{Ga}$) olduqda GaS-də vakansiya yaxınlığında lokal maqnit momenti (FM) yaranır, lakin $S$ vakansiya halı ($V_S$) olduqda, isə maqnetizm müşahidə olunmur (AFM). GaS üçün bu nəticələr, yəni atomların maqnit momentlərinin uzun məsafəli ferromaqnit nizamlığının qurulması, DFT GGA yaxınlaşması ilə GaS üçün tapılan qiymətlərlə uyğunluq təşkil edir [15]. GaS-in məlumat kitabından olan qəfəs parametrləri $a$ = 3.587 Å, $c$ = 15.492 Å-dir [16].

### 3.3 $Ga_{17}S_{18}$ superqəfəsi

Nəticələrin təhlili zamanı nöqtəvi defektlərin nomenklaturasına uyğun olaraq kristaldan "çıxarılmış" $A$ atomunun yaratdığı boşluğu, yəni vakansiyanı $V_A$ kimi göstərək. DFT metodlarında əsas fiziki kəmiyyət, sistemi təşkil edən bütün elektronların koordinatlarının funksiyası olan elektron sıxlığıdır ($\rho$). Hartree-Fock metodunda bir elektron üçün $\rho_i(r) = |\varphi_i(r)|^2$ və molekulun bütün elektronlarının yaratdığı elektron sıxlığı üçün isə $\rho_{\text{total}}(r) = \sum_{i=1}^{N}|\varphi_i(r)|^2$ yazmaq olar. Sistemin hallar sıxlığını (DOS) $E$ və $E + \delta E$ enerji aralığında olan enerji vahidi üçün icazə verilən halların sayı kimi təyin edək. Fərz edək ki, tədqiq olunan konkret kristal (sistem) hamiltonian $H$ ilə təsvir edilmişdir və onun enerji səviyyələri $E_k$ ilə işarə edilmişdir. Bu enerji səviyyələri diskret (ayrı) və ya arasıkəsilməz ola bilər. Bu sistemdəki hissəciklər kristaldakı atomlar kimi dövri yerləşə bilər və ya amorf bərk maddədə olduğu kimi tamamilə təsadüfi ola bilər. Bu halda sistemin DOS üçün bu bərabərliyi yazmaq olar: $n(E) = \sum_k \delta(E - E_k)$, burada $\delta(x)$ - Dirak delta funksiyası, $k$ – bütün mümkün hallardır.

Sıxlıq funksionalının nəzəriyyədə ümumi elektron enerjisi belə hesablanır:

$$E_{\text{DFT}}[\rho] = T_{\text{S}}[\rho] + E_{\text{ne}}[\rho] + J[\rho] + E_{\text{XC}}[\rho] \quad (1)$$

burada $T_S$ – Kohn-Sham orbitallarından ibarət olan Slater determinantı ($S$) ilə hesablanan kinetik enerji, $E_{\text{ne}}$ – elektronların nüvələrə cəzb edilməsi enerjisi, $J$ – elektronların Kulon itələmə enerjisi, $E_{\text{XC}}$ – hesablamaya daha böyük töhfə verən mübadilə-korrelyasiya funksionalıdır. Ümumi enerji $E_{\text{DFT}}$ tənliyindən göründüyü

kimi, çox elektronlu problemin dəqiq həlli üçün, elektron korrelyasiya enerjisini ehtiva edən mübadilə-korrelyasiya enerjisini $E_{XC}$ tapmaq lazımdır. Başqa sözlə, bir determinant olmasına baxmayaraq, sıxlıq funksional nəzəriyyəsi dalğa funksiyasının nümayişi kimi, korrelyasiya enerjisini nəzərə alır. Yeganə problem mübadilə-korrelyasiya funksionalının formasının əvvəldən dəqiq bilinməməsidir və buna görə də, onun təxmini təsvirini axtarmaq lazımdır. Fərqli DFT üsulları birbirindən yalnız $E_{XC}[\rho]$ funksional formasının seçilməsi, fərqli tənzimlənən parametrlər dəstinin olması ilə fərqlənir.

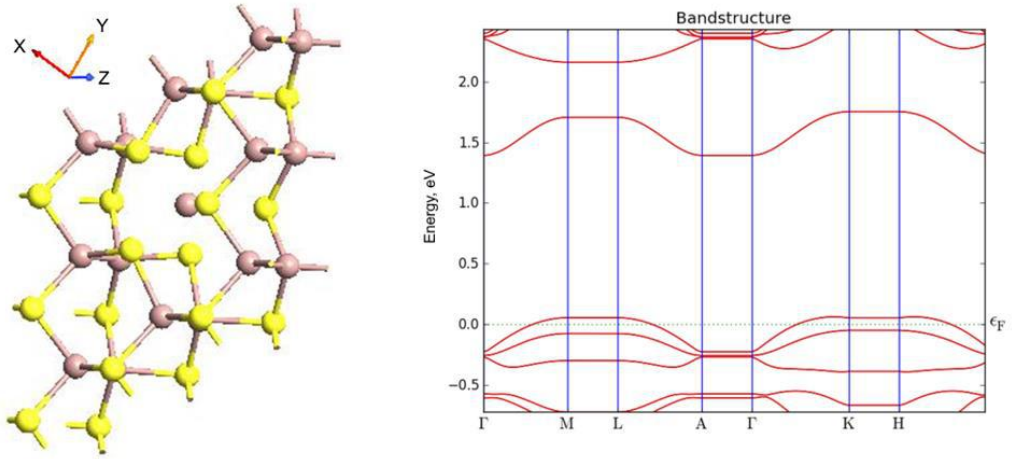
İlk yanaşmada, $E_{XC}$-ni mübadilə $E_X$ və korrelyasiya $E_C$ potensialına ayırmaq olar:

$$E_{XC}[\rho] = E_X[\rho] + E_C[\rho] = \int \rho(r)\varepsilon_X(\rho(r))dr + \int \rho(r)\varepsilon_C(\rho(r))dr \qquad (2)$$

$E_X$ və $E_C$ funksionallarını hesablamaq üçün sadə yaxınlaşma lokal sıxlıq approksimasiyasıdır (local density approximation – LDA; ümumi hal üçün lokal spin sıxlığı approksimasiyası – LSDA). Bu halda elektron sıxlığı elektron qaz kimi fərz edilir və sıxlıq funksiyası tədricən dəyişən qəbul edilir.

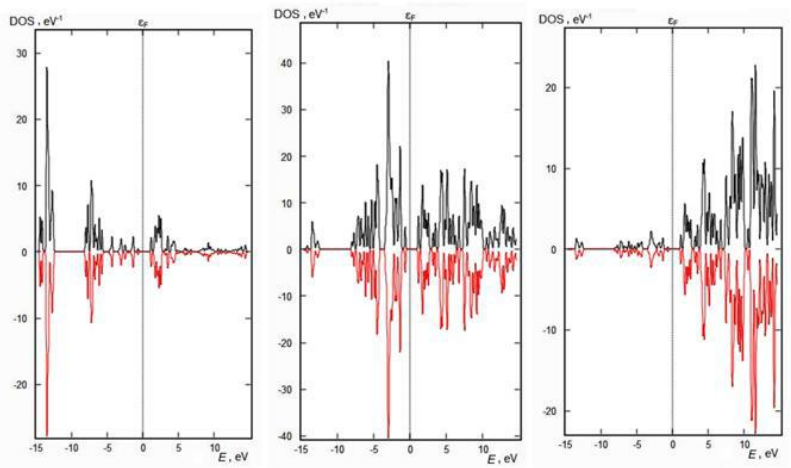
Daha dəqiq nəticələr $E_X$ və $E_C$-ni yalnız $\rho$ sıxlığı ilə deyil, həm də onun birinci ($\nabla\rho$) və ikinci ($\nabla 2\rho$) törəmələri ilə əlaqələndirən ümumi gradient yaxınlaşması (Generalized Gradient Approximation – GGA) üsulu ilə əldə edilir. LSDA və GGA funksionalları ilə aparılan hesablamaların nəticələri aşağıda verilib.

GaS quruluş tipli laylı birləşmələrin (GaS və GaSe) superqəfəsləri üçün $n(E)$ kəmiyyətinin LSDA ilə hesablanmış qiymətləri DOS qrafikləri kimi aşağıda göstərilmişdir. 36 atomlu Ga vakansiyalı $Ga_{17}S_{18}$ superqəfəsinin (heksoqonal, $a$ = 4.002Å, $c$ = 15.440Å, fəza qrupu (194), Pearson: $hP_n$, Hermann-Mauguin: $P6_3/mmc$) verilmiş parametrlərində zona quruluşu və hallar sıxlığı şəkil. 3 və 4-də göstərilmişdir.




a) b)

*Şəkil 3.* 36 atomdan ibarət olan GaS superqəfəsində (model $Ga_{17}S_{18}$) Ga vakansiya halı üçün atom quruluşu (a) və zona quruluşu (b)



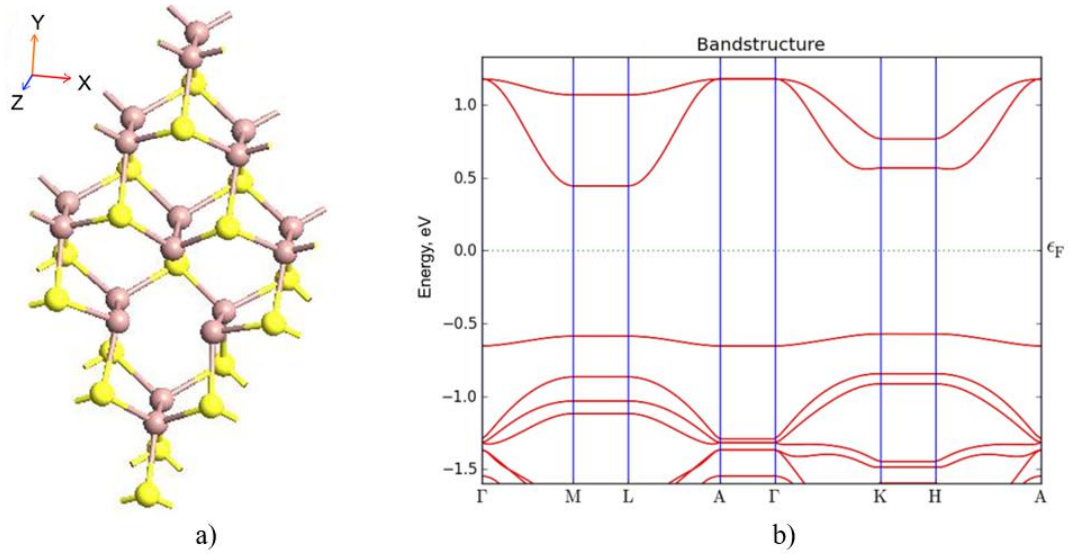

a) b) c)

*Şəkil 4.* $Ga_{17}S_{18}$-superqəfəslərinin Ga vakansiyasının spin yuxarı və spin aşağı hallarının -*s*,- *p*, -*d* elektronlarının hallar sıxlığı qrafikləri: a) *s*-halı, b) *p*-halı, c) *d*-halı

DOS qrafiklərinin təhlilindən aydın olur ki, məxsusi atomlarda olan bir vakansiyalı GaS və GaSe superqəfəslərində DOS spektrləri vakansiyasız halla müqayisədə praktiki olaraq dəyişmir. Bunu, GaS laylı quruluşlu kristal üçün Ga-Ga (0.248 nm) və S-S (0.237 nm) rabitələri arasında rabitə uzunluğunun dəyişməməsi ilə bağlamaq olar [17,18].

3.4. GaS superqəfəsində S vakansiyası ($Ga_{18}S_{17}$)

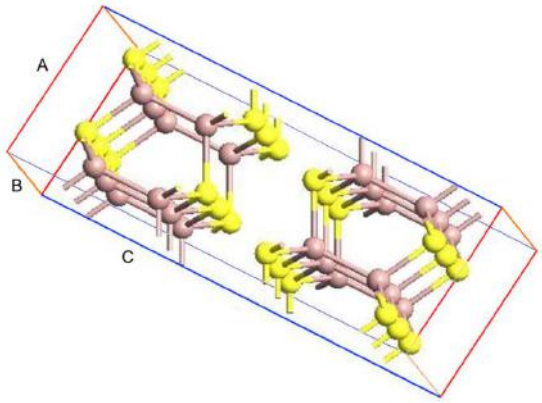
36 atomdan ibarət olan S vakansiyalı $Ga_{18}S_{17}$ superqəfəsinin (hexaqonal, $a$ = 4.002Å, $c$ = 15.440 Å, fəza qrupu 194, Pearson: $hP_n$, Hermann-Mauguin: $P6_3/mmc$) verilmiş parametrlərində zona quruluşu şəkil 5-də göstərilmişdir.




*Şəkil 5.* 36 atomdan ibarət olan GaS superqəfəsində S vakansiya halı olduqda ($Ga_{18}S_{17}$) atom (a) və zona quruluşu (b).

Çəpinə (əyri) (Γ→K) zonaya malik olan energetik quruluşda GaS superqəfəsində S vakansiyasının olması halında da LDA hesablamaları $\Delta E_g$ qiymətininin təcrübi qiymətə nisbətən az olduğunu göstərir (şəkil 5).

3.5. GaS superqəfəsində Ga vakansiyası ($Ga_{23}S_{24}$)




*Şəkil 6.* $Ga_{23}S_{24}$–də 35-ci Ga vakansiya halında atomların quruluşu

Heksoqonal $2 \times 3$ ölçüdə 48 atomdan ibarət olan Ga vakansiyalı GaS superqəfəsində (hexaqonal, $a$=3.585Å, $c$ = 15.500Å, fəza qrupu 194, Pearson: $hP_n$, Hermann-Mauguin: $P6_3/mmc$) atomlarının strukturu şəkil 6-da göstərilmişdir.

Hesablamalardan məlum olur ki, GaS superselində Ga vakansiyası yaratdıqda, ($Ga_{23}S_{24}$) qadağan olunmuş zona daxilində enerjisi 0.45eV olan energetik səviyyə yaranır. Mülliken elektron yerləşməsi analizindən bu superqəfəs üçün Ga vakansiyası halında ümumi maqnit momentinin qiyməti $0.305\mu B$ alınır. Həmçinin, iki qonşu Ga-Ga, Ga-S atomları arasında rabitə uzunluğu uyğun olaraq $d_{Ga_{40}-Ga_{41}} = 2.4$ Å, $d_{Ga_{11}-S_{22}} = 2.37$Å olduğu müəyyən edilir.

3.6 $Ga_{16}Se_{16}$ superqəfəsində Se vakansiyası ($Ga_{16}Se_{15}$)

Cədvəl 3-də GaSe birləşməsinin Se vakansiya halında qadağan olunmuş zonanın eninin, həm nəzəri, həm də təcrübi qiymətlərinin müqayisəsi verilmişdir. GaSe-nin qəfəs parametrləri üçün beynəlxalq bankda verilən qiymətlər bunlardır: JCPDS card, No. 37-931; $a = 3.75$ Å, $c = 15.91$ Å. 32 atomdan ibarət olan superqəfəsin düzünə qadağan olunmuş zonada LDA yaxınlaşmasında $\Delta E_g$= 0.99eV qiymətini alır.

Cədvəl 3.

| $Ga_{16}Se_{16}$ Parametrləri | Metod | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | LDA | GGA | Eksperiment, 300 K | | |
| $a$, Å<br>$c$, Å<br>$\Delta E_g$, eV | 3.742<br>15.919<br>1.6 | 3.706<br>15.778<br>3 [14] | 3.755 15.940 [14]<br>2 [14] | 3.755 15.475 [14] | 3.755<br>15.492 [16]<br>2.03 [16] |

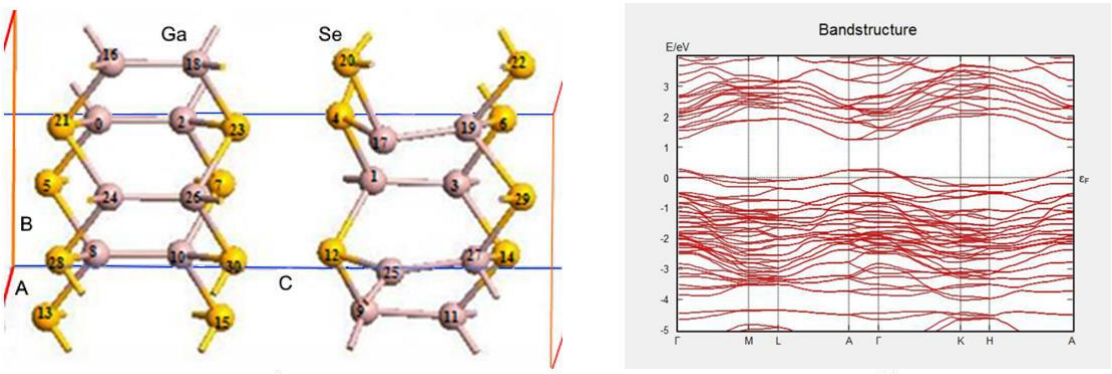
Cədvəl 4.

| Metod | Atomlar arası əlaqə uzunluğu, Å | | |
|---|---|---|---|
| | Se-Ga (laydaxili) | Ga-Ga (layarası) | Se-Se (layarası) |
| LDA | $Se_{12}$–$Ga_{25}$ (2.466)<br>$Se_{4}$–$Ga_{17}$ (2.662) | $Ga_{24}$–$Ga_{26}$ (2.39) | $Se_{30}$–$Se_{12}$ (3.6995) |
| Təcrübə [16] | 2.463 | 2.457 | 3.880 |

Cədvəl 4–də GaSe superqəfəsində Se vakansiyası halında laydaxili və laylararası rabitənin uzunluğu (Se-Ga, Ga-Ga və Se-Se) hesablanmış və təcrübi qiymətlərlə müqayisəsi verilmişdir.

Uyğun olaraq superqəfəsdə 12-ci yerdə yerləşən Se və 25-ci Ga atomları, 24-cü Ga və 26-cı Ga atomları, həmçinin 4-cü Se və 17-ci Ga, 30-cu Se və 12-ci Se atomları arasında olan əlaqə uzunluğunun hesablanmış qiymətləri təcrübədən alınan qiymətlərlə yaxşı uzlaşır.

Şəkil 7-də 32 atomlu superqəfəsin (model $Ga_{16}Se_{15}$) 31-ci Se atomunun vakansiya halı və zona quruluşu verilmişdir. Çəhrayı rəngdə Ga və sarı rəngdə Se atomları superqəfəsdə (31-ci Se atomunun vakansiya halı) sıralanma ardıcıllığı ilə nömrələnmişdir.




a) b)

*Şəkil 7.* 32 atomlu GaSe-nin Se vakansiyalı $Ga_{16}Se_{15}$ superqəfəsinin atomlarının yerləşməsi (a) və zona quruluşu (b).

GaS və ya GaSe-də qəfəsin dərin mərkəzlərdə nizamlanan vakansiya halında qəfəsin relaksasiyasına baxaq. Bu vəziyyətdə, məsələn, bir Ga atomun çıxarılması dörd elektronun itirilməsi ilə nəticələnir. Bu, neytral GaS və ya GaSe, dörd müsbət yük əlavə etməyə bərabərdir. Güclü kimyəvi əlaqə modelinə uyğun olaraq yarımkeçiricinin (GaS və ya GaSe) içindəki elektronlar bu müsbət yükləri ekranlaşdırıb reaksiya verəcəklər. Beləliklə, əsasən kovalent rabitəli GaS və ya GaSe yarımkeçiricilərində olan vakansiyalar, dörd cütləşməmiş qırılmış əlaqələr əmələ gətirirlər. Dörd qırılmış kimyəvi əlaqə, qonşu əlaqələr arasında iki cüt əlaqə yaratmaqla "bərpa" oluna bilər. Başlanğıcda əlaqəsi qırılan atomlar arasındakı məsafələr ideal kristaldakı əlaqələrin uzunluğundan daha böyük olduğuna görə, əlaqəsi qırılan atomlar yeni əlaqə yaratmaq üçün bir-birinə yaxınlaşmalıdır. Qonşu atomların bu yerdəyişməsinə elastik enerji də daxildir ki, bu da əvvəlcə qırılan əlaqələrdə yerləşən dörd elektronun enerjisinin azalması ilə kompensasiya olunur. Hər bir yeni əlaqə bağlı vəziyyətdə iki elektron yerləşdirə biləcəyi üçün, qırılmış əlaqədə hər bir elektronun enerjisinin azalması, örtmə parametrləri ($Vss$, $Vpp$ и $Vsp$) tərtibindədir.

Cədvəl 1-dən göründüyü kimi qallium və kükürd vakansiyaları ilə nizamlanmış GaS, GaSe superqəfəslərinin qəfəs parametrlərinin hesablanan qiymətləri təcrübi məlumatlarla uyğunluq təşkil edir. Lakin $\Delta E_g$ hesablanan qiymətlərində ədəbiyyatdan məlum olan "qadağan olunmuş zona problemi" ortaya çıxır. Başqa sözlə, GaS, GaSe superqəfəsləri üçün $\Delta E_g$ lokal sıxlıq yaxınlaşması ilə hesablanan qiymətləri təcrübi qiymətlərdən az olur.

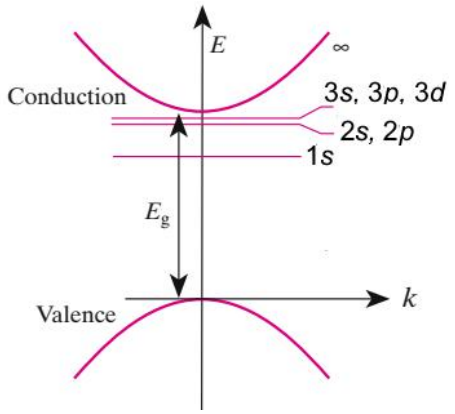
Termodinamiki nöqteyi nəzərindən baxdıqda $T$ = 0 K-də, defektəmələgəlmə reaksiyalarının hər biri üçün lazım olan və ya ayrılan enerji sistemin entalpiyasının ($H$) dəyişikliyi ilə bağlıdır. Sonlu temperaturda, defektəmələgəlmə reaksiya enerjisi Qibbs sərbəst enerjisindəki ($G$) olan dəyişiklikdir və o, entalpiyanın dəyişməsi ilə belə əlaqədardır: $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$, haradakı $S$ sistemin entropiyasıdır.

Lakin həm Ga, həm də S (Se) vakansiyası olan GaS və GaSe superqəfəslərin LDA üsulla hesablanmış zona quruluşu, hallar sıxlığı və vakansiya saxlayan superqəfəslər üçün atomlararası əlaqə təcrübi qiymətlərdən fərqlənir. Yuxarıda qeyd edilən "qadağan olunmuş zona probleminin" həlli üçün DFT metodundan götürülən orbitallara uyğun olan mübadilə-korrelyasiya enerjisini uyğunlaşdırmaq lazım olur. Bu halda məsələn, ümumi qradiyent approksimasiyası (GGA) və ya qradient korreksiyası üsulunda, Hartree-Fok metodunda mübadilə enerjisi ilə eyni şəkildə hesablanan $E_X$ enerji ifadəsinə əlavə olunan hibrid üsullardan istifadə edilir.

Tədqiq etdiyimiz bir laylı GaS-in $Ga_{18}S_{18}$ superqəfəsi üçün lokal sıxlıq yaxınlaşması çərçivəsində hesablanılan $\Delta E_g$=1.65eV (Ga vakansiyası halında) və $\Delta E_g$= 1.83eV (S vakansiya halında) qymətlərinin GaS-in təcrübi $\Delta E_g$= 2.5 eV qiymətdən fərqini aradan

qaldırmaq üçün GGA-PBE yaxınlaşmasından istifadə edilmiş və Ga-un *d*-elektronlarının sıxlıq hallarına təsiri nəzərə alınmışdır. Həmçinin $Ga_{16}Se_{16}$ superqəfəsinin Ga və Se vakansiyası halında LDA-hesablanan qiymətləri ($\Delta E_g$=1.6eV və $\Delta E_g$=1.7eV uyğun olaraq) təcrübi qiymətdən ~ 2.1 eV aşağıdır. GGA-PBE yaxınlaşması ilə hesablanan $\Delta E_g$ qiymətləri təcrübədən alınan qiymətlərlə uyğunluq təşkil edir.

Başqa sözlə, yuxarıda qeyd edilən $\Delta E_g$ qiymətlərindəki fərqlərin səbəbi lokal sıxlıq yaxınlaşmasında aparılan hesablamalarda ümumi enerjiyə olan əlavə təsirlərin nəzərə alınmamasıdır. Bu təsirlərdən mübadilə-korrelyasiya funksionalının optimal seçilməsi və Ga-un d-elektronlarının korrelyasiya-mübadilə funksionalına ($E_{\mathrm{XC}}$ $[\rho]$) təsiri ilə əlaqələndirmək olar. Parabolik keçiricilik zonası yaxınlığındakı donor atomunun (GaS və GaSe üçün Ga-un) bəzi bağlı vəziyyətlərinin sxematik diaqramı şəkil 8-də göstərilmişdir.




*Şəkil 8.* Qeyri parabolik keçiricilik zonası yaxınlığında ($n = \infty$) donor elektronun bağlanmış vəziyyətlərinin ($n$ = 1, 2 və 3) sxematik diaqramı.

Lokal spin-polyarlaşması yaxınlaşmasında $E_{\mathrm{XC}}$ $[\rho]$ funksionalın formasının seçilməsi, $\Delta E_g$ qiymətini tam tənzimləməyə imkan vermir. Yuxarıda göstərildiyi kimi, GaS və GaSe superqəfəsləri üçün hesablanan $\Delta E_g$ qiymətlərində daha dəqiq nəticələr $E_{\mathrm{X}}$ və $E_{\mathrm{C}}$-ni yalnız $\rho$ sıxlığı ilə deyil, həm də birinci ($\rho$) və ikinci ($2\rho$) törəmələri ilə əlaqələndirən qradient korreksiyası GGA-PBE üsulu ilə əldə edimişdir.

## NƏTİCƏLƏR

GaS və GaSe superqəfəslərinin DFT metodu ilə hesablamaları göstərir ki, 36, 48 atomdan ibarət olan GaS və 32 atomdan ibarət olan GaSe superqəfəsləri üçün hesablanan qəfəs parametrləri təcrübi qiymətlərlə uyğunluq təşkil edir. Həm Ga, həm də S vakansiyası olan superqəfəslərin zona quruluşu, hallar sıxlığı və vakansiya saxlayan superqəfəslər üçün atomlararası əlaqə məsafəsi təcrübi qiymətlərdən fərqlənir. O cümlədən, qadağan olunmuş zolağın eni 2.5 eV olan, bir laylı GaS-in $Ga_{18}S_{18}$ superqəfəsi üçün Ga vakansiyası halında $\Delta E_g$=1.65eV, S vakansiya halında isə $\Delta E_g$=1.83eV uyğun qiymətlər alınmışdır. Həmçinin, $Ga_{16}Se_{16}$ superqəfəsinin Ga vakansiyası halında $\Delta E_g$=1.6eV, Se vakansiya halında $\Delta E_g$=1.7eV uyğun qiymətlər alınmışdır ki, bu qiymətlər də təcrübi qiymətlərdən (~2.1 eV) azdır. Bu fərqlərin səbəbi lokal sıxlıq yaxınlaşmasında aparılan hesablamalarda ümumi enerjiyə olan əlavə təsirlərin nəzərə alınmamasıdır. Bu təsirlərdən əsas olanı Ga-un *d*-elektronlarının korrelyasiya-mübadilə funksionalına ($E_{\mathrm{XC}}$ $[\rho]$) təsiridir. Lokal spin polyarlaşması yaxınlaşmasında da $E_{\mathrm{XC}}$ $[\rho]$ funksionalın formasının seçilməsi, $\Delta E_g$ qiymətini tam tənzimləyə bilmir. Daha dəqiq nəticələr $E_{\mathrm{X}}$ və $E_{\mathrm{C}}$-ni yalnız $\rho$ sıxlığı ilə deyil, həm də birinci ($\rho$) və ikinci ($2\rho$) törəmələri ilə əlaqələndirən qradient korreksiyası (GGA-PBE yaxınlaşması) üsulu ilə əldə edilir. 48 atomlu $Ga_{24}S_{24}$ superqəfəsi üçün 35-ci Ga atomunun vakansiyası zamanı superqəfəsin vakansiya yaxınlığında atomların maqnit momentlərinin uzun məsafəli ferromaqnit nizamlığının qurulması ilə yaranan lokal maqnit momentinin hesablanmış qiyməti $Ga_{23}S_{24}$ (0.305$\mu$B) olmuşdur ki, bu da GaS üçün məlum olan qiymətlərə (0.20$\mu B$) yaxındır.


[1] *S.N. Mustafaeva, M.M. Asadov*. Solid State Commun., 1983, vol. 45, no. 6, pp. 491-494. https://doi.org/10.1016/0038-1098(83)90159-X

[2] *S.N. Mustafaeva, M.M. Asadov*. Mater. Chem. Phys., 1986, vol. 15, pp. 185-189. ttps://doi.org/10.1016/0254-0584(86)90123-9

[3] *D.J. Late, B. Liu, H.S.S.R. Matte, C.N.R. Rao, V.P. Dravid*. Substrates. Advanced Functional Materials, 2012, vol. 22, no. 9, pp. 1894-1905. https://doi.org/10.1002/adfm.201102913

[4] *Y. Zhang*. Electronic structures of impurities and point defects in semiconductors. Chinese Physics B, 2018. vol. 27, no. 11, p. 117103. https://doi.org/10.1088/1674-056/27/11/117103

[5] *P.Y. Yu, M. Cardona*. Fundamentals of Semiconductors. Physics and Materials Properties. 2005. Springer Berlin. Heidelberg. New York. 639 p. ISBN 3-540-41323-5

[6] *C. Wei, X. Chen, D. Li, H. Su, H. He, J.-F. Dai*. Bound exciton and free exciton states in GaSe thin slab. Sci. Rep. 2016, vol. 6, p. 33890. https://doi.org/10.1038/srep33890

[7] *З.А. Джахангирли*. Физика Твердого Тела, 2012, том 54, вып. 5, с. 1024-1027.

[8] *З.А. Джахангирли, Ф.М. Гашимзаде, Д.А. Гусейнова, Б.Г. Мехтиев, Н.Б. Мустафаев*. Физика Твердого Тела, 2016, том 58, вып. 9, с. 1707-1708.

[9] *M.M. Asadov, S.N. Mustafaeva, S.S. Guseinova, V.F. Lukichev*. Physics of the Solid State, 2020, vol. 62, No. 11, pp. 2224-2231. https://doi.org/ 10.1134/S1063783420110037

[10] *M.M. Asadov, S.N. Mustafaeva, S.S. Guseinova, V.F. Lukichev, D.B. Tagieva*. Physics of the Solid State, 2021, vol. 63, No. 5, pp. 797–806. https://doi.org/10.21883/FTT.2021.05.50822.268

[11] *J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof*. Physical Review Letters, 1996, vol. 77, no 18, pp. 3865–3868.

https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.3865
[12] *S.M.Asadov, S.N.Mustafaeva, A.N.Mammadov*. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2018, vol.133, no2, pp.1135-1141. https://doi.org/10.1007/s10973-018-6967-7
[13] *C. H. Ho, S.L. Lin.* Journal of Applied Physics, 2006, vol. 100, p. 083508. https://doi.org/10.1063/1.2358192
[14] *S.M. Asadov, S.N. Mustafaeva,V.F. Lukichev*. Russ. Microelectronics, 2020, vol. 49, No. 6, pp. 452-465. https://doi.org/ 10.1134/S1063739721010042
[15] *X. Wu, X. Dai, H. Yu, H. Fan, J. Hu, W. Yao.* Condensed Matter Mesoscale and Nanoscale Physics, arXiv:1409.4733 [cond-mat.mes-hall]
[16] *M. Isik, E. Tugay, N. Gasanly,* Optical properties of GaS crystals: Combined study of temperature dependent band gap energy and oscillator parameters, Indian Journal of Pure and Applied Physics. 2017, vol.55, pp. 583-588.
[17] *Madelung O*. Semiconductors: Data Handbook. Springer, Berlin, Heidelberg. (2004). ISBN: 978-3-642-62332-5.
[18] *A. Kuhn, A. Chevy, R. Chevalier*. Phys. Status Solidi A, 1975, vol. 31, pp.469-475. https://doi.org/10.1002/pssa.2210310216

**S.N. Mustafaeva, S.S. Huseynova**

## INFLUENCE OF POINT DEFECTS IN THE PROPERTIES OF TWO-DIMENSIONAL (2D) CRYSTALS GaX (X=S, Se) TYPE AND CALCULATION OF ENERGY PARAMETERS BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Calculation of the GaS (36, 48 atoms) and GaSe (48 atoms) point defect supercells like as GaX layered structure-compounds were performed by the method of density functional theory (DFT). The calculated lattice parameters for these supercells accept to the experimental values. Band structure, density of states, and distance between atoms for vacancy supercells with both Ga and S vacancies were calculated within the local density approximation (LDA) and generalized gradient approximation (GGA). The values of the bandgap ($\Delta E_g$) calculated by LDA for both without vacancy and single vacancy supercells are less than the experimental values for GaS and GaSe. In order to correction this inconsistency, the gradient correction method (GGA-PEA approximation) was used to correct the value of $\Delta E_g$ to the experimental value. The calculation of the energy parameters of supercells were used not only the electron density, also its derivatives or additions (corrections) to the correlation-exchange function. In the vacancy GaS supercell the state of local magnetization was calculated by the density functional method with allowance for spin polarization.

**С.Н. Мустафаева, С.С.Гусейнова**

## ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В СВОЙСТВАХ ДВУМЕРНЫХ (2D) КРИСТАЛЛОВ ТИПА GaX (X = S, Se) И РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПО ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ПЛОТНОСТИ

Расчет суперячеек с точечными дефектами GaS (36, 48 атомов) и GaSe (48 атомов), таких как слоистые структурные соединения GaX, проводился методом теории функционала плотности (DFT). Расчетные параметры решетки этих суперячеек согласуются с экспериментальными значениями. Зонная структура, плотность состояний и расстояние между атомами для вакансионных суперячеек с вакансиями Ga и S рассчитывались в рамках приближения локальной плотности (LDA) и приближения обобщенного градиента (GGA). Значения ширины запрещенной зоны ($\Delta E_g$), рассчитанные методом LDA как для безвакансионных, так и для одиночных суперячеек, меньше экспериментальных значений для GaS и GaSe. Чтобы исправить это несоответствие, был использован метод коррекции градиента (приближение GGA-PEA) для корректировки значения $\Delta E_g$ соответствие экспериментальных значений. При расчете энергетических параметров суперячейки использовались не только электронная плотность, но и ее производные или дополнения (поправки) к корреляционно-обменной функции. В вакансионной суперячейке GaS состояние локальной намагниченности рассчитывалось методом функционала плотности с учетом спиновой поляризации.

*Qəbul olunma tarixi: 17.08.2021*

# $Ni_{0.4}Zn_{0.6}Fe_2O_4$ və SmS ƏSASLI FD-REZİSTOR NANOREZONATORUNUN ŞÜALANMA XARAKTERİSTİKASI

**Ş.N. ƏLİYEVA**
*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,*
*AZ-1143, Bakı , H. Cavid prospekti, 131*
*Shahla-aliyeva22@rambler.ru*

Aktiv layı qranullaşdırılmış SmS və $Ni_{0.4}Zn_{0.6}Fe_2O_4$ olan üçlaylı nanorezonatorun lüminessensiya və bəzi optik xassələri öyrənilmişdir. Spektrin görünən oblastında yüksək intensivliyə malik lüminessensiyanın mövcudluğu və otaq temperaturunda $\lambda$ = 532 nm dalğa uzunluqlu YAGNd lazeri ilə həyəcanlandırma zamanı (lazerin gücü 8mVt böyük olduqda) THz şüalanma müəyyən edilmişdir.

**Açar sözlər:** nazik təbəqə, ferrit, hiper rezonans effekt, tezlikdən asılı rezistor
**PACS:** 41.20Gz;42.72Ai

## 1. GİRİS

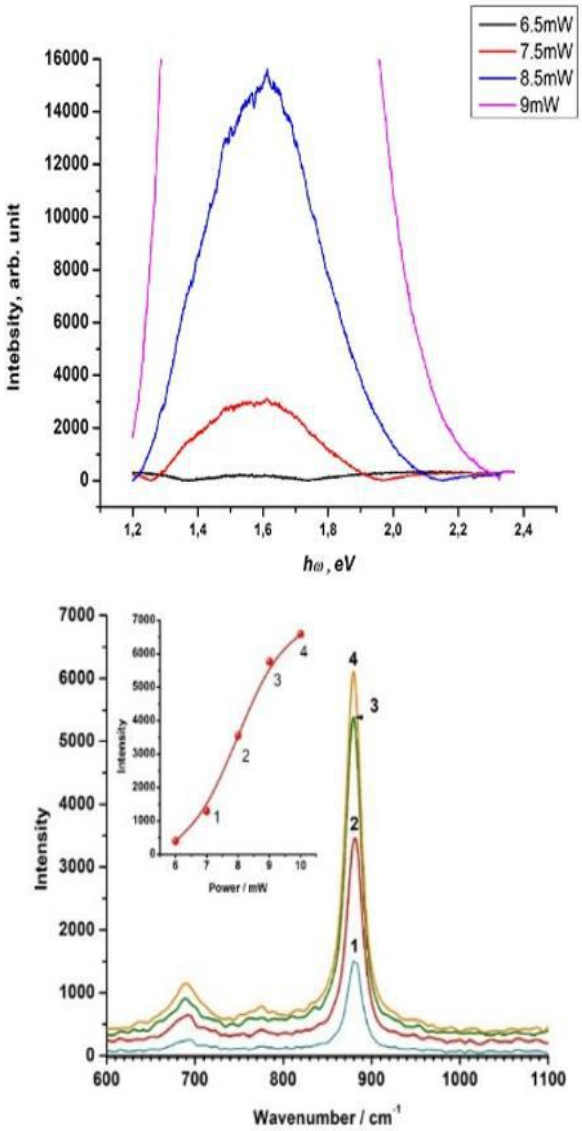
Tezlikdən asılı rezistorun praktiki tətbiqi haqqında [1-6] işlərimizdə məlumat verilmişdi. Belə ki, bu rezistorların praktiki tətbiqinin daha ətraflı öyrənilməsi diqqəti günəş şüası nəticəsində alüminium keçiricilərdə müşahidə olunan lüminessensiya həyəcanlanmasına çəkdi (xüsusən də isti ölkələrdə). Qeyd edək ki, oksidləşmiş alüminium ($Al_2O_3$) dielektrikdir. Təcrübə nəticələrinin təsdiq etdiyi kimi, keçirici üzərinə (Ni-Zn) ferrit təbəqəsi çökdürüldükdən sonra, tezlikdən asılı (FD-frequency dependence) rezistor quruluşca üçlaylı Fabry-Perot paketini (interferometri) təmsil edə bilər. Beləliklə, bu məqalədə tezlikdən asılı rezistorun lüminessensiya effektlərinin tədqiqatları ilə bağlı nəticələrindən bəhs edilir.

## 2. TƏCRÜBƏLƏR VƏ MÜZAKİRƏ

[1-6] işlərində oksidləşmiş səthə malik sapfir və şüşə altlıqlara submikron təbəqələrin çökdürmə texnologiyası tədqiq olunmuşdur. Kontrol AFM təcrübələrində bu təbəqələrin bəzi xarakterik xüsusiyyətləri qeydə alınmışdır. Belə ki, təbəqə səthləri qranular olmasına baxmayaraq mükəmməlliyə malikdir və lazer ilə həyəcanlandırma zamanı bu nümunələrin lüminessensiya spektrlərində (1.2-2.3 eV) həm görünən, həm də terahers diapazonda müşahidə olunan generasiyaya oxşar yüksək intensivlikli maksimum mövcuddur. Qeyd edək ki, məcburi şüalanma mexanizmi optik həyəcanlanmış elektronların və deşiklərin zonalararası şüalanma rekombinasiyasına zəmin yaradır. Bu isə yalnız təbəqədə invers yerləşmənin itkisinə səbəb olan mərkəzlərdə olur [7, 8].

[9, 10] işlərində $SiO_2$-Si altlıqlı polikristal ZnO layının optik həyəcanlanması zamanı lazer generasiyasının müşahidə edilməsi barədə məlumat verilmişdi. Müəlliflər göstərmişlər ki, layların yüksək olmayan keyfiyyətini üçlaylı nanorezonatorun parametlərini, yəni bir-birindən kəskin fərqlənən sındırma əmsalına malik $n_{hava}<n_{ZnO}$ , $n_{ZnO}>n_{SiO_2}$ layları və bu layların qalınlıqlarını düzgün seçməklə kompensə etmək olar.

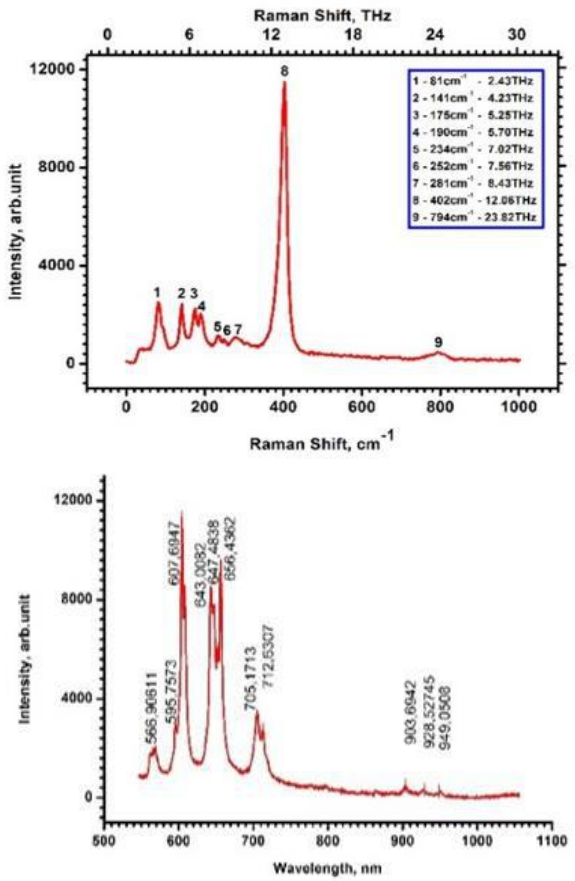
Təcrübi tədqiqatlarımızın da göstərdiyi kimi, bu nanorezonatorun təbəqələri üçün təsvir olunan hal üçlaylı rezonatorlar üçün də təsdiqlənmişdi: hava-(Ni-Zn) ferrit təbəqəsi-$SiO_2$ (yaxud $Al_2O_3$), hava-SmS-$SiO_2$ (və ya $Al_2O_3$). Nanorezonatorun şüalanma xüsusiyyətləri şəkil 1 və 2-də göstərilmişdir.




*Şəkil 1.* Lazer ilə həyəcanlandırma zamanı nanorezonatorun fotolüminessensiya və Raman spektrləri (lazerin gücü: 1- 7mW; 2 – 8mW; 3 – 9mW; 4 – 10mW) [5,6]



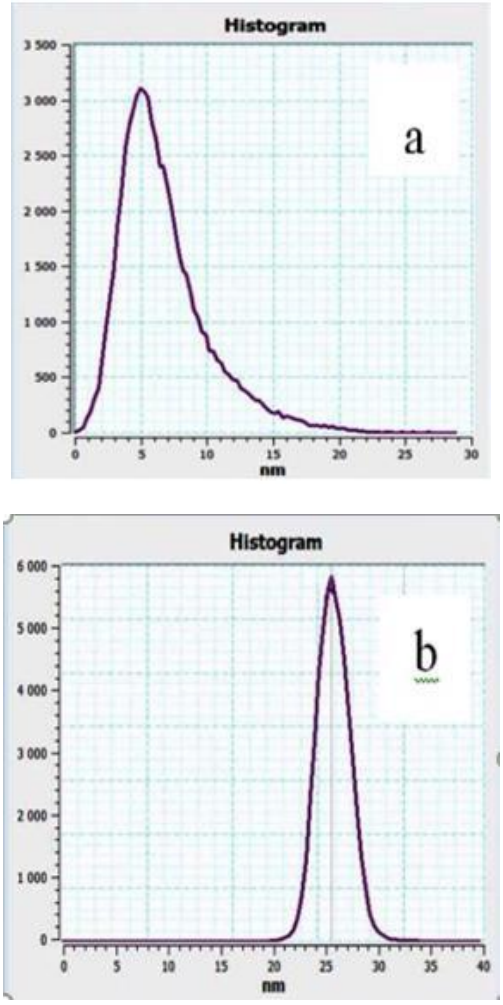
131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com



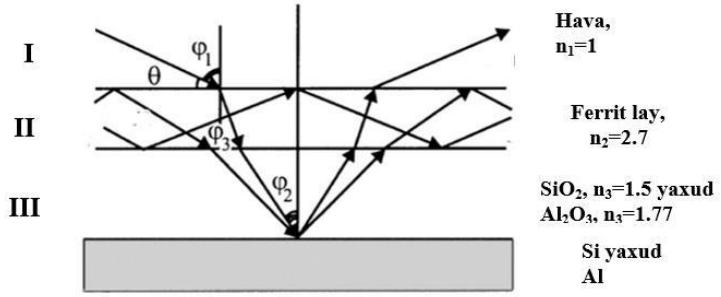

*Şəkil 2.* $\lambda$=532nm dalğa uzunluqlu titan-sapfir lazeri ilə həyəcanlandırma zamanı 500-1100nm oblastında və 300K temperaturda 50nm qalınlıqlı sapfir altlıqlı yarımkeçirici SmS nazik təbəqəsinin Raman və fotolüminessensiya spektirləri.

Təcrübələrdən də göründüyü kimi, təbəqə qalınlığının artması generasiyanın yox olmasına səbəb olur ki, bu da hiperrezonansın olma fikrini təkzib edir. Digər tərəfdən, (Ni-Zn) ferritlərinin də aid olduğu şpinel birləşmələr defektli quruluşa malikdir. Qranulalarının ölçüsü minimum olan ferrit nazik təbəqələrində lüminessensiya pikinin intensivliyi maksimal olur [5,6]. Şəkil 3-də isə SmS təbəqəsinin səth topoqrafiyasının histoqramı verilmişdi.

Səthin qranulaları aradan qaldırmaq məqsədi ilə işlənilməsi maksimumun amplitudunu kəskin şəkildə aşağı salır. Müşahidə olunan effekt bucaq asılılığına malikdir. Şəkil 4-də işdə istifadə olunan nanorezonatorun blok-sxemi təsvir olunmuşdur [3,4]. Nanorezonatorun aktiv elementi – sındırma əmsalı 2.7 olan ferrit təbəqəsidir. Ferrit təbəqə dielektrik təbəqələrlə əhatə olunub: sındırma əmsalı 1.5 olan silisium oksidi və sındırma əmsalı 1.0 olan hava. Sındırma əmsallarındakı böyük fərq təbəqələrarası laylarda güclü əksolunma və ferrit tərəfindən şüalanan işığın interferensiyasını göstərir (işıq optik sıxlığı böyük mühitdən optik sıxlığı az olan mühitə keçdiyi zaman tam daxili əks olunma müşahidə olunur). Ferrit və $SiO_2$ laylarının qalınlıqları, uyğun olaraq 100nm və 150nm-dir.




*Şəkil 3.* SmS təbəqəsinin səth topoqrafiyasının histoqramı: a- tablandırmaya qədər; b- 600°C temperaturunda tablandırmadan sonra.




*Şəkil 4.* Nanorezonatorun blok sxemi.

Qeyd edək ki, şüalanma bucağından asılı olaraq rezonatordan çıxan işıq 3 tip ola bilər (şəkil 4):

I. Üz səthdən şüalanan işıq.

II. Hava/$Ni_{0.4}Zn_{0.6}Fe_2O_4$ sərhəddində tamamilə əks olunan işıq ($Ni_{0.4}Zn_{0.6}Fe_2O_4/SiO_2$ (yaxud $Al_2O_3$) sərhəddindən deyil).

III. İşıq şüalanması iki sərhəd arasında tam əks olunma $\theta_2$ bucağından böyük şüalanmanın 75%-ni təşkil edir.

Verilmiş polyarizasiyanın *m* tərtibli modunun mövcud olmadığı ferrit qatının qalınlığı aşağıdakı ifadələrlə təyin olunur [9,10]:

$$\left(\frac{d}{\lambda}\right)_{TE} = \frac{1}{2\pi\sqrt{n_2^2 - n_3^2}} * \left( m\pi + \tan^{-1}\left(\frac{n_3^2 - n_1^2}{n_2^2 - n_3^2}\right)^{1/2} \right)$$

$$\left(\frac{d}{\lambda}\right)_{TE} = \frac{1}{2\pi\sqrt{n_2^2 - n_3^2}} * \left( m\pi + \tan^{-1}\frac{n_2^2}{n_1^2}\left(\frac{n_3^2 - n_1^2}{n_2^2 - n_3^2}\right)^{1/2} \right)$$

Burada *m*-modun tərtibi, *d*- ferrit layının qalınlığıdır. $Ni_{0.4}Zn_{0.6}Fe_2O_4$ ferrit təbəqəsi üçün hesablanmış mini mal qalınlıqlar aşağıdakı cədvəldə verilmişdir.

| Modun sayı *N* (İkinci tip) | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|---|---|
| d2, nm (TE) | 48.43 | 182.22 | 316.01 | 449.79 | 583.38 |
| $d_2$, nm (TM) | 41.96 | 175.75 | 309.533 | 443.32 | 577.103 |

Cədvəldən də göründüyü kimi, 100-150nm qalınlıqlı ferrit lay üçün 250nm qalınlıqdan fərqli olaraq iki mod deyil, yalnız bir mod mövcud olur. Bunu həmçinin şəkil 1-də də müşahidə etmək olar. Belə ki, burada da təbəqə qalınlığı 100nm tərtibindədir və modun qeydə alınması səthə 0° bucaq altında olur.

Generasiyaedici layda bir əlaqəli modun (II tip) mövcudolma şərtini ətraflı olaraq nəzərdən keçirək. Bu halda əks olunan şüada bir keçid üçün faza sıçrayışı $\pi$–nin tam mislinə bərabər olur.

$$N\pi = \frac{1}{2\pi\sqrt{n_2^2 - n_3^2}} * \left( m\pi + \tan^{-1}\left(\frac{n_3^2 - n_1^2}{n_2^2 - n_3^2}\right)^{1/2} \right)$$

$$N\pi = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_2 d_2 \cos\varphi_3 + \chi_{21} + \chi_{23}$$

$\chi_{21} + \chi_{23}$ – təbəqələri ayıran sərhəddə tam daxili əksolunma hesabına faza sürüşməsidir. Tam daxili əksolunma üçün bucağın sərhəd qiyməti $\sin\varphi_3^0 = \frac{n_3}{n_2} = 0.658$ şərtindən təyin edilir.

Hava-ferrit sərhəddi üçün analoji hesablama 200nm-dən böyük qalınlıqlarda iki əlaqəli modun olduğunu göstərdi. Bizim halda ikinci əlaqəli mod (üçüncü tip) sapfir layına nüfuz edir. Dalğa vektorunun perpendikulyar proeksiyası üçün rezonans şərtinin eyni zamanda hər iki sapfir və ferrit layında mövcud olmaması səbəbindən bu modun intensivliyi yalnız ferrit layında yayılan birinci modun (ikinci tip) intensivliyindən kifayət qədər aşağı olur.

Şüalanma modlarının (I tip) intensivliklərinin sönməsini laylararası sərhədə perpendikulyar, daha doğrusu Z oxu istiqamətində yayılan 532 nm dalğa uzunluqlu işığın interferensiya minimumunun hesablamalarından əldə etmək olar. Bu halda sapfir və ferrit laylarının optik uzunluğunun ikiqat qiyməti tək sayda yarımdalğa uzunluğuna bərabər olmalıdır:

$$n_3 d_3 + n_1 d_1 = \frac{(2N+1)\lambda}{2}.$$

Beləliklə, ferrit layının yüksək keyfiyyətli olması üçlaylı nanorezonatorun parametrlərinin seçilməsi yolu ilə kompensə olunmuşdur.

## 3. NƏTİCƏLƏR

Aktiv elementi $Ni_{0.4}Zn_{0.6}Fe_2O_4$ yaxud SmS olan üçlaylı Fabry-Perot nanorezonatorunun riyazi modeli verilmişdi. İlk fəfə olaraq üçlaylı Fabri-Pero nanorezonatorunda şüalanma generasiyası ($E$=1.6eV və $\gamma$=26.4THs) müşahidə edilmişdir.

**MİNNƏTDARLIQ**

Bu iş Qrant № **EİF-BGM-3-BRFTF-2+/2017-15/04/1-M-02** Azərbaycan Respublikası Prezidenti yanında Elmin İnkişafı Fondunun maliyyə dəstəyi ilə həyata keçirilmişdir.

İşin ərsəyə gəlməsində dəyərli məsləhətlərinə və köməkliyinə görə f.-r.e.d. T.R.Mehdiyevə dərin minnətdarlığımı bildirirəm.

[1] *T.R.Mehdiyev, A.M.Gashimov, N.R.Babayeva, A.A. Habibzade*. AJP Fizika, Vol. XIV, No.3, pp. 207-217, 2008.

[2] *A.A. Habibzadeh, T.R. Mehdiyev, A.M.Hashimov,E.V.Dmitriyev, N.R.Babayeva*. International Journal for Knowledge, Science and Technology, Vol.1, No. 1, pp. 49-56, 2009.

[3] *A.A. Habibzadeh, N.R. Babayeva, A.M.Hashimov, T.R. Mehdiyev*. "Magnetoelectric and magnetoelasic properties of ferromagnetic shell of frequency dependent r.esistor", 6th International Conference on Technical and Physical Problems of Power Engineering (ICTPE-

2010), pp.617-621, Tabriz, Iran, 14-16 September 2010.

[4] *Sh. Aliyeva, S.Aliyeva, T. Mehdiyev*. International Journal on Technical and Physical Problems of Engineering (IJTPE), Issue 14, Vol. 5, No. 1, 2013, pp.119-126, March 2013.

[5] *T.R. Mehdiyev, Sh.A. Ahmadova, A.A.Sadigova, Sh.N. Aliyeva, X.A. Gasanova.* Investigation of photoluminescence properties of Ni-Zn ferrites, ICTPE 2020, pp.66-69, Istanbul, Turkey, 12-13 October 2020.

[6] *T.P. Mehdiyev, A.M. Gashimov, Sh.N.Aliyeva, I.F. Yusibova, A.V. Agashkov, B.A. Bushuk*. "Luminescent and optical properties of (Ni, Zn) ferrites", IJTPE, , Vol. XIII, No.1, pp.81-90, 2021.

[7] *K.Tang, G.K. L. Womg, M. Kawasaki, A.Ohtomo, H. Koinuma, Y. Segawa*. Solid State Commun. Vol.103, pp.459, 1997.

[8] *Z.K. Tang, G. K. L. Wong, P. Yu*. Appl. Phys. Lett. 72, pp. 3270, 1998

[9] *A. Gruzintsev, G. Emelchenko, C. Barthou, P. Benalloul, V. Volkov*. "Single-mode lasing from ZnO-$SiO_2$ thin film nanoresonators obtained by magnetron sputtering method", Photonic Crystal Materials and Devices III, Proc. of SPIE, Vol. 6182, pp.61822C:1-6, 2006.

[10] *A.N. Gruzintsev, V.T. Volkov, C. Barthou∗, P. Benalloul.* Semiconductors or physics of the solid state, Vol. 36, No. 6, pp.741-745, 2002

**Sh.N. Aliyeva**

## RADIATIVE CHARACTERISTICS OF NANORESONATOR OF FD RESISTOR BASED ON $Ni_{0.4}Zn_{0.6}Fe_2O_4$ and SmS

We have studied the luminescent and some optical properties of a three-layer nanocavity, the active layer of which is based on a granular layer of SmS or $Ni0.4Zn_{0.6}Fe_2O_4$ ferrite. The presence of high-intensity luminescence in the visible region of the spectrum and the generation of terahertz radiation by excitation of YAG Nd ($\lambda$ = 532 nm) with a power above 8 mW and room temperature have been established.

**Ш.Н. Алиева**

## ИЗЛУЧАТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА НАНОРЕЗОНАТОРА FD-РЕЗИСТОРА НА ОСНОВЕ $Ni_{0.4}Zn_{0.6}Fe_2O_4$ и SmS

Изучены люминесцентные и некоторые оптические свойства трехслоевого нанорезонатора, активный слой которого выполнен на основе гранулированного слоя SmS или $Ni_{0,4}Zn_{0,6}Fe_2O_4$ феррита. Установлено наличие высокоинтенсивной люминесценции в видимой области спектра и генерация ТГц –излучения при возбуждении YAG Nd ($\lambda$=532нм) мощностью выше 8 мВт в комнатной температуре.

*Qəbul olunma tarixi: 24.08.2021*

# $Ni_{0.4}Zn_{0.3}Cu_{0.3}Fe_2O_4$ FERRİTİNİN QURULUŞ VƏ FİZİKİ XASSƏLƏRİ

**İ.F. YUSİBOVA**
*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,*
*AZ-1143, Bakı , H. Cavid prospekti, 131*

$Ni_{0.4}Zn_{0.3}Cu_{0.3}Fe_2O_4$ ferriti ifrat təmiz komponentlərin: NiO, ZnO, CuO, $Fe_2O_3$ yüksəktemperaturlu ərimə metodu ilə 950°C temperaturda əldə edilmişdir. Alınmış nümunənin rentgenfaza, İQ diapazonunda diffuz əksolma və DTA analizi aparılmışdır. Diffuz əksolma spektrlərində 4000-400 $sm^{-1}$ diapazonunda şpinel ferritlərə xas olan hər iki udulma zolağı:604-542$sm^{-1}$ və 463-416 $sm^{-1}$ müşahidə edilir.

**Açarsözlər:** ferrit, termik metod, rentgenfaza, İQ spektroskopiya, DTA analiz, altqəfəs
**PACS:** 41.20Gz;42.72Ai

## 1. GİRİŞ

Ferrimaqnetiklərin bir qrupunu təşkil edən ferritlər $MOFe_2O_3$ ümumi formuluna malik dəmir oksidləridirlər. Burada M – iki valentli metal oksididir ($Mn^{2+}$, $Fe^{2+}$, $Co^{2+}$, $Ni^{2+}$, $Cu^{2+}$, $Zn^{2+}$, $Mg^{2+}$, $Cd^{2+}$). Yüksək xüsusi müqavimətə, yüksək maqnit nüfuzluğuna və kiçik maqnit itkisinə, yüksək istiliyə və korroziyaya davamlılıq, yüksək termodinamik stabillik,məxsusi elektrik müqaviməti və elektrolitik aktivlik kimi üstün xüsusiyyətlərə malik olmaları onların tətbiq imkanlarını genişləndirir.

Ferritlərin malik olduğu üstünlüklərdən biri də onların yüksək tezliklərdə tətbiqinin mümkünlüyüdür. Bununla yanaşı bu materiallar digər metallik və amorf maqnit analoqlarla müqayisədə daha ucuz əldə olunurlar. Şpinel quruluşlu ferrit materiallar bir çox elektron və maqnit qurğularında, həmçinin elektrod materiallarda tətbiq olunurlar. Müasir dövrdə istehsal olunan hər bir elektronika elementi ferromaqnit şpinel ferrit tərkibinə malikdir. Səsucaldıcılar, elektromaqnit küylərinin düzləndiriciləri, nəmlik qeydediciləri, yaddaş qurğusu, qeydedici başlıqlar, geniş zolaqlı transformatorlar, filtrlər, induktivlik dolağı və s. ferrit əsaslıdırlar. Ferritlərin xüsusiyyətləri bir neçə faktordan aslıdır: tərkibi, alınma üsulu, müxtəlif kationlarla əvəzləmələr, tablama temperaturu və müddəti, dənəciklərin ölçüsü və yerləşməsi. Mürəkkəb struktura malik ferritlərin fiziki xüsusiyyətləri tetraedrik və oktaedrik altqəfəslərdə metal ionlarının yerləşməsindən aslıdır. Ferritlərin xüsusiyyətlərini yaxşılaşdırmaq məqsədi ilə müxtəlif metodlardan istifadə olunub. Ən üstün metod əvəzləmə metodudur. Bu üsul ferritlərin elektrik maqnit və optik xüsusiyyətlərini yaxşılaşdırmağa imkan verir. Ni-Cu-Zn ferritləri müxtəlif elektromaqnit qurğularda geniş tətbiq olunurlar. Bu ferritlər yüksək müqavimətə, yüksək nüfuzluğa və kiçik maqnit itkisinə malikdirlər.

## 2. NÜMUNƏNİN HAZIRLANMASI

Məlumdur ki, ferrit materiallarının strukturu və fiziki xassələri onların kimyəvi tərkibindən, istifadə olunan xammaldan, sintez şəraitindən və usulundan asılıdır. Ferritləri sintez etmək üçün, bir çox texnoloji üsullar mövcuddur [1]. Bu üsulları 3 qrupa bölmək olar: birləşmə, parçalanma və çökdürmə. Həmçinin bu üsulların kombinasiyasından da istifadə olunur. Xammal kimi metal oksidlərindən, duzlarından və hidroksidlərdən istifadə olunur. Yüksək temperaturda bərk faza halında olan metal oksidlərinin diffuziyası nəticəsində kubik quruluşlu ferritlər yaranır. Diffuziyanın baş verməsi üçün komponentlərin kimyəvi aktivliyi, hissəciklərin ölçüləri və homogenliyinin təsiri böyükdür, çünki alınacaq ferritin fiziki xüsusiyyəti bu prosesin gedişatından bir başa aslıdır. Yüksək maqnit xassələrinə malik bu ferritlərin sintezi prosesində istifadə olunacaq xammal yüksək dərəcədə təmiz olmalıdır. Sintez prosesinin mərhələli şəkildə olduğunu nəzərə alaraq, proses zamanı materialın çirklənmə dərəcəsini minimuma endirməyə çalışmaq lazımdır [1, 2].

Bildiyimiz kimi, ferritlərin hazırlanma temperaturu əsasən prosesə daxil olan komponentlərdən asılıdır. Digər ferritlərdən fərqli olaraq, Ni-Zn əsaslı ferritlər yüksək elektromaqnit xüsusiyyətlər nümayiş etdirirlər və bu materiallar yuksək tezlik diapazonunda geniş tətbiq imkanına malikdirlər. Lakin Ni-Zn əsaslı ferritlərin cox yüksək temperaturda əldə olunması bu nümunənin mikrostrukturuna və sıxlığına təsir etdiyinə görə, tərkib komponentlərinin əlavəsi və ya əvəzlənməsi nümunənin daha aşağı temperaturlarda əldə olunmasına imkan verir.

Ni-Zn əsaslı ferritlərə Cu ionunun əlavəsi daha aşağı temperaturda kompozit almağa imkan verir, ancaq Cu ionu nümunələrin xüsusi müqavimətini aşağı salır ki, bu da onların yuksək tezliklərdə istifadəsi üçün əlverişsizdir. Ona görə də, bizə lazım olan xüsusiyyətlərə malik material hazırlamaq üçün, Ni, Zn və Cu-un miqdari nisbətini, onların məxsusi xüsusiyyətlərini nəzərə almaq lazımdır.

Ni-Cu-Zn nanotozları yüksək temperaturlu sintez metodu ilə əldə edilmişdir. Müvafiq metal oksidlərin ZnO, NiO, CuO, Fe2O3 (bütün hallarda 99% təmiz) tərkibə uyğun stexiometrik miqdarları xammal kimi istifadə olunmuşdur. Sintez prosesinin gedişatı [13] işlərində geniş təsvir olunub

Sintez olunmuş ferrit tozunun keyfiyyəti XRDD8 ADVANCE (Bruker, Germany) rentgen difraktometri ilə qiymətləndirilmişdir. Difraksiya mənzərəsi CuK∞ ($\lambda$=1.54060Å) şüalanmalı monoxromatorla skan rejimində qeyd olunmuşdu. Kristalın ölçüləri tozların rentgen difraksiya piklərinin eninə uyğun olaraq Şerrer formuluna əsasən hesablanmışdır ($d=\kappa\lambda/\beta cos\theta$) [2, 5].



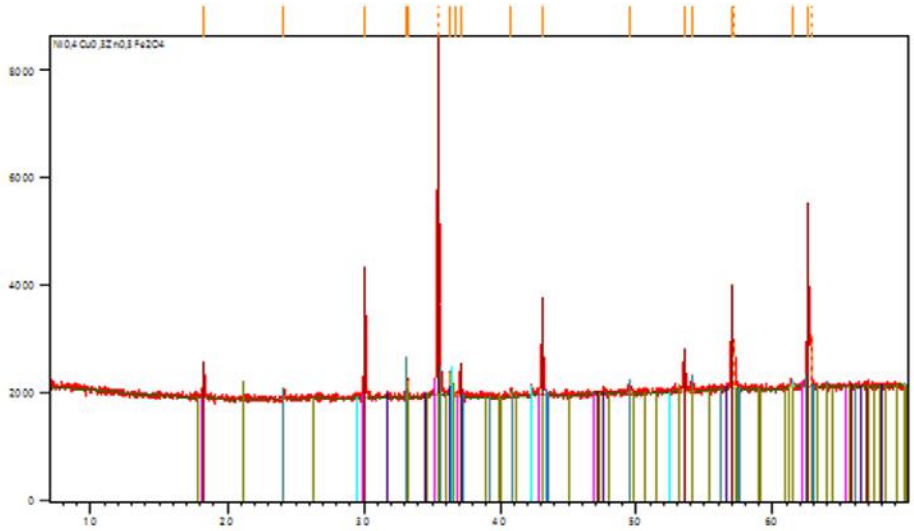
131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com

$Ni_{0.4}Zn_{0.3}Cu_{0.3}Fe_2O_4$ ferrit tozunun infraqırmızı spektrləri vakuum kamerasında standart spektral ayırdetməsi 0.5sm$^{-1}$olan 4000-400 sm$^{-1}$ spektral diapazonunda, Easi Diff TMM diffuz əksetmə əlavəli (PİKE Technologies, USA) infraqırmızı Furye Vertex70 spektrometrində (Bruker, Germany) tədqiqolunmuşdur [11, 12]. Həmçinin, nümunələrin DTA analizi aparılmışdır.

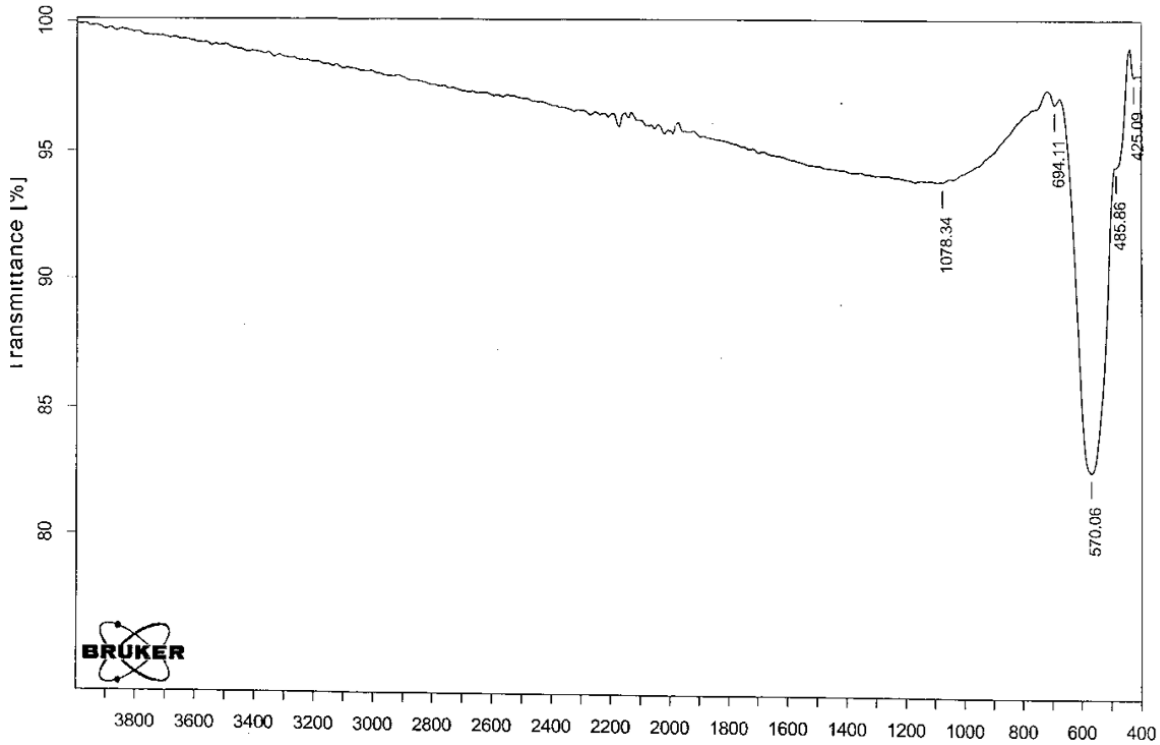
## 3. ALINMIŞ NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

Kristalloqrafik cəhətdən şpinel quruluşlu ferritlər təpə nöqtələrində oksigen ionu yerləşmiş səthə mərkəzləşmiş kubik quruluşa malikdir. Qəfəs iki altqəfəsdən təşkil olunub: tetraedrik («A») və oktaedrik («B»). Ferritlərin xarakterik xüsusiyyətləri bu altqəfəslərdə dolayı mübadilə qarşılıqlı təsirinin olmasıdır [1, 2]

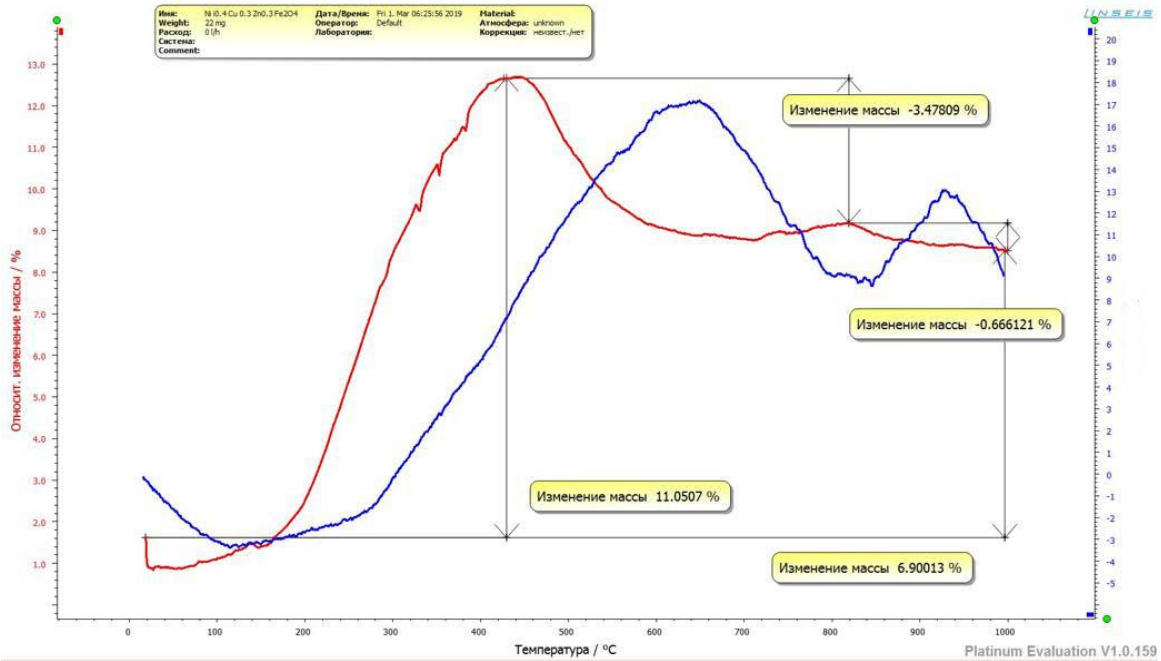
$Ni_{0.4}Zn_{0.3}Cu_{0.3}Fe_2O_4$ ferrit tozunun rentgen difraksiya spektri şəkil 1-də göstərilmişdir. Kubik şpinel quruluşa xas olan (111), (220), (311), (222), (400), (422), (511) və (440) maksimumları tədqiq olunan ferrit nümunəsində müşahidə olunmuşdur. Bu isə $Ni_{0.4}Zn_{0.3}Cu_{0.3}Fe_2O_4$ ferritinin $Fd\bar{3}m$-$O_h^7$ fəza simmetriya quruluşlu şpinel ferrit olmasını göstərdi. Ən güclü əksolunma maksimumu (311) müstəvisində qeydə alınmışdır [4, 5, 7]. Məlumdur ki, ferritlərin keramika üsulu ilə sintezi əsasən yüksək temperaturlarda mümkün olur. Bizim işdə $Ni_{0.4}Zn_{0.3}Cu_{0.3}Fe_2O_4$ ferrit nümunələri 950°C temperaturda həyata keçirilmişdir. Qeyd edək ki, Ni-Zn ferritlərinə CuO əlavə etdikdə, Cu ionları diffuziyanın artmasına və bişirilmə prosesində bərk faza reaksiyasını sürətləndirərək dənəciklərin böyüməsinə səbəb olur [4, 6].




*Şəkil 1.* $Ni_{0,4}Cu_{0,3}$ $Zn_{0,3}Fe_2O_4$ ferrit tozunun rentgen difraksiya spektri.




*Şəkil 2.* $Ni_{0,4}Cu_{0,3}$ $Zn_{0,3}Fe_2O_4$ ferrit tozunun diffuz əksolunma spektirləri.




*Şəkil 3.* $Ni_{0,4}Cu_{0,3}Zn_{0,3}Fe_2O_4$ ferrit tozunun DTA analizi.

Məlumdur ki, $Fd\bar{3}m$ fəza simmetriya quruluşlu şpinel ferritlərin İQ- diffuz əkolunma spektrlərində tetraedrik və oktaedrik altqəfəslərinin metal ionlarının M-O əlaqəsinə uyğun iki əsas udulma zolağı müsahidə olunmalıdır. Şəkil 2-də $Ni_{0,4}Cu_{0,3}Zn_{0,3}Fe_2O_4$ tozlarının İQ diffuz əksolunma spektrləri verilmişdir. Şəkildən də göründüyü kimi, bu nümunələrin İQ spektrlərdə şpinel ferritlərə xas olan hər iki udulma zolağı: 604- 542$sm^{-1}$ və 463-416 $sm^{-1}$ müşahidə edilir [9, 11, 12].

DTA analizi rentgen faza analizinin nəticələrini təsdiqləyir (şəkil 3).

Bu spektrlərin daha geniş interpretasiyasını gələcək işlərmizdə təqdim edəcəyik.

## 4. NƏTİCƏ

Ferritin rentgen faza analizində müşahidə olunan bütün maksimumlar $Fd\bar{3}m$-$O_h^7$ fəza simmetriya quruluşuna malik şpinel strukturlu ferritlərin rentgen spektrlərinə xarakterikdir. Həmçinin, nümunələrin 4000-400$sm^{-1}$ spektral diapazonda diffuz əksolunmasının infraqırmızı spektrləri tədqiq edilmişdir.

Bu iş Qrant №EİF-BGM-3-BRFTF-2+ /2017-15/04/1- M-02 Azərbaycan Respublikası Prezidenti yanında Elmin İnkişafı Fondunun maliyyə dəstəyi ilə həyata keçirilmişdir

[1] *Н.Н. Шольц, К.А. Пискарев.* Ферриты для радиочастот, Москва 1966, 131с.
[2] *M. Usakova, J.Lukac, R.Dosoudil, V.Jancarik, A.Gruskova, E. Usak, J. Slama, J. Subrt.* J. Mater Sci: Mater Electron. 2007,18: p.1183-1189.
[3] *A.S. Padampalle, A.D.Suryawanshi, D.D.Suryawanshi, S.S. Patil and S.K. Gurav.* 2018: Special İssue A2:168-171.
[4] *E.B. Гортер.* УФН, т. LVII, вып. 2, 1955, с. 279-346.
[5] *Ş.N. Əliyeva.* Azerbaijan Journal of Physics, vol. XVII, N 1, Section: Az, March, 2011.
[6] *M.F. Huq, D.K. Saha, R. Ahmed and Z.H. Mahmmood.* Ni-Cu-Zn Ferrite Research: A Brief Review. J. Sci. Res., 2013, 5(2), 215-233.
[7] *S. Akhter, D.R. Paul, Md.A. Hakim, D. Kumar Saha, Al-Mamun Md., A. Parveen.* Materials Sciences and Applications, 2011, 2, 1675-1681.
[8] *S.N.Aliyeva,A.M.Kerimova, R.B.Abdullayev, T.R. Mehdiyev.* Physics of the Solid States 2017, v. 59, İSSUE 3, p. 543-549.
[9] *Ш.Н.Алиев, А.М.Керимова, Р.Б.Абдуллаев, Т.Р.Мехтиев.* ФТТ, т.59 вып. 3, с. 528-533.
[10] *M. Molaahmadi1, S. Baghshahi1, A. Ghasemi.* J Mater Sci: Mater Electron 27, 2016, p.11447- 11456.
[11] *R.D. Waldron.* Phys. Rev., 1955, 99, 1727.
[12] *AbdelmajidLassoued, Mohamed Ben hassine, Fabienne Karolak, BrahimDkhil, Salah Ammar, Abdellatif Gadri.* Journal of Materials Science Materials in Electronics. September 2017.
[13] *İ.F. Yusibova.* AJP, Section: Az, cild XXVI, 2020, N 2, s. 44-49.

**I.F. Yusibova**

## STRUCTURAL AND PHYSICAL PROPERTIES OF FERRITE $Ni_{0.4}Zn_{0.3}Cu_{0.3}Fe_2O_4$

$Ni_{0.4}Zn_{0.3}Cu_{0.3}Fe_2O_4$ ferrite was synthesized by high-temperature alloying of ultra-pure components: NiO, ZnO, CuO, Fe2O3 at a temperature of 950°C. X-ray diffraction analysis, diffuse reflection in the IR range, and DTA analysis of the obtained sample were carried out. In the diffuse reflectance spectra in the range 4000-400 $cm^{-1}$, in addition to supplementary ones, two absorption bands characteristic of spinel ferrites are observed: 604-542 $cm^{-1}$ and 463-416 $cm^{-1}$.

**И.Ф. Юсибова**

## СТРУКТУРНЫЕ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФЕРРИТА $Ni_{0.4}Zn_{0.3}Cu_{0.3}Fe_2O_4$

$Ni_{0.4}Zn_{0.3}Cu_{0.3}Fe_2O_4$ феррит синтезирован методом высокотемпературного сплавления сверхчистых компонентов: NiO, ZnO, CuO, $Fe_2O_3$ при температуре 950°C. Проведены рентгеноструктурный анализ, диффузное отражение в ИК-диапазоне и ДТА-анализ полученного образца. В спектрах диффузного отражения в диапазоне 4000-400 $см^{-1}$, кроме дополнительных, наблюдаются две характерные для шпинельных ферритов полосы поглощения: 604-542 $см^{-1}$ и 463-416 $см^{-1}$.

*Qəbul olunma tarixi: 30.08.2021*

**V.M. Salmanov, B.H. İbrahimov**

## KVANT NÖQTƏ İFRAT QƏFƏSDƏ ZONALARARASI İŞIQ UDULMASINA HƏNDƏSİ ÖLÇÜLƏRİN TƏSİRİ

Məqalədə kvant nöqtəli ifratqəfəs sistemlərdə zonalararası düz keçidlər öyrənilmişdir. Zonalararası udulma əmsalı üçün analitik ifadə alınmış və astana tezliyi kvant nöqtəli ifratqəfəs sistemin həndəsi ölçülərindən asılılığı müəyyən edilmişdir. Udulmanın astana tezliyinin kvant nöqtəli ifratqəfəs sisteminin ölçüsünün artması ilə azaldığı müəyyən olunmuşdur.

**M.V. Kazimov**

## InSb-CrSb, InSb-Sb, GaSb-CrSb EVTEKTİK KOMPOZİTLƏRİNİN RAMAN SƏPİLMƏSİ

Yarımkeçirici-metal tipli InSb-CrSb, InSb-Sb, GaSb-CrSb evtektik kompozitləri şaquli Bricmen üsulu ilə sintez edilmişdir. GaSb-CrSb, InSb-CrSb və InSb-Sb evtektik kompozitlərindəki metal qatqılar ətrafında fazalararası zonanın mövcudluğu, quruluş və element tərkibi öyrənilmişdir. Raman spektrində aşkar olunan piklərin GaSb, InSb birləşmələrinə və Sb-Sb əlaqəsinə uyğun olduğu aşkar edilmişdir.

**E.R. Həsənov, Ş.Q. Xəlilova, R.K. Mustafaeva**

## İKİ DƏRƏCƏLİ GaAs YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ TEZLİYİN TƏYİNİ

Kristalın ölçülərinin müəyyən tezlikdə böyümə sürəti ilə qeyri-sabit dalğanın həyəcanlanmasında əsas rol oynadığı və cari rəqslərin maqnit sahəsi ilə tənzimlənməsinin mümkünlüyü göstərilir. Rəqslərin tezliyinin qiymətləri tapılmışdır. Xarici elektrik sahəsinin qiyməti və rəqslərin tezliyi başlanğıc nöqtədə müəyyən edilmişdir.

**V.H. Ağayev**

## OKSİD LAYLI ALTLIĞA BUXARLANDIRILMIŞ AMORF SELEN ELEKTROFOTOGRAFİYA TƏBƏGƏLƏRİNİN XÜSUSİYYƏTLƏRİ

Məqalədə müxtəlif qalınlıqlı oksid laylı altlıqlara buxarlandırılmış selen elektrofotografiya təbəgələri tədqiq olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, optimal parametrlər oksid layın 3 qalınlığında alınır.

**E.İ. Cəfərov, A.M. Cəfərova, Ş.M. Nağıyev, S.K. Novruzova**

## MORROU-BRAUNŞTEYN HAMİLTON OPERATORUNA MALİK KOORDİNATDAN ASILI EFFEKTİV KÜTLƏLİ ŞREDİNGER TƏNLİYİNİN DƏQİQ HƏLLİ OLAN HARMONİK OSSİLYATORUN KONFAYMENT MODELİ

$H_0 = M^{\alpha}(x)\hat{p}_x M^{\beta}(x)\hat{p}_x M^{\alpha}(x)/2 \quad (2\alpha + \beta = -1)$ Morrou-Braunşteyn kinetik enerji operatoruna malik qeyri-relyativistik kvant harmonik ossilyatorunun dəqiq həll oluna bilən konfayment modeli təklif edilmişdir. Kanonik yanaşmada koordinatdan asılı effektiv kütləyə malik uyğun Şredinger tənliyi koordinat təsvirində həll edilmişdir. Həm stasionar halların dalğa funksiyaları, həm də diskret enerji spektrinin aşkar ifadələri tapılmışdır. Göstərilmişdir ki, enerji spektri qeyri-ekvidistant şəklə malikdir və həm $a$ konfaynment parametri, həm də $\alpha$ Morrou-Braunşteyn partametrindən asılıdır. Koordinat təsvirində stasionar halların dalğa funksiyaları Gegenbauer çoxhədliləri ilə ifadə olunurlar. $a \to \infty$ limitində həm enerji spektri, həm də dalğa funksiyaları qeyri-relyativistik harmonik ossilyatorun məlum ekvidistant enerji spektrini ve Ermit çoxhədliləri ilə ifadə olunan stasionar hallarının dalğa funksiyalarını tam olaraq bərpa edirlər. Bu limit altında həm də effektiv kütlənin koordinatdan asılılığı yoxa çıxır.

**V.A. Tanrıverdiev, V.S. Tağıyev.**

## DÜZBUCAQLI NANOMƏFTİLDƏ $S = \frac{1}{2}$ və $S = 1$ İZİNQ SPİNLƏR SİSTEMİNİN DİNAMİKASI

Glauber- stoxastik dinamikadan istifadə edərək effektiv sahə yanaşması çərçivəsində zamana görə dəyişən maqnit sahəsində kinetik qarışıq (1/2, 1) spinlərdən ibarət özək-qabıq strukturlu İzinq nanoməftildə dinamik davranışlar tədqiq edilir. Sistemdəki fazaları əldə etmək üçün orta qabıq və özək spinlərin maqnitləşmələrinin zamandan asılılığı araşdırılır. Orta maqnitləşmənin zaman dəyişikliyinin davranışlarını müəyyənləşdirmək üçün qarşılıqlı təsir parametrlərinin, temperaturun və xarici maqnit sahəsinin müxtəlif qiymətlərində dinamik effektiv tənliklər sisteminin stasionar həlləri öyrənilmişdir. Sistemin paramaqnit ($p$), ferrimaqnit ($i$), maqnetik olmayan (nm) fazaları və həmçinin qarşılıqlı təsir parametrlərindən çox asılı olan qarışıq fazalrarın olduğu müəyyən edilmişdir.

**A. M. Məmmədova**

## KOORDİNATDAN ASILI KÜTLƏYƏ MALİK HARMONİK OSSİLYATORUN KİNETİK ENERJİ OPERATORU QALİLEY İNVARİANTLIĞI İLƏ UYĞUNLAŞAN KONFAYNMENT MODELİNİN BİRCİNS QRAVİTASİYA SAHƏSİNDƏ DƏQİQ HƏLLİ

Kvant harmonik ossilyatorunun xarici bircins qravitasiya sahəsinin təsiri altında dəqiq həll oluna bilən konfaynment modeli tədqiq edilmişdir. Koordinatdan asılı olaraq dəyişən effektiv kütlə sayəsində konfaynment effektinə nail olunmuşdur. Uyğun Şredinger tənliyinin dəqiq həll edilməsi üçün Nikiforov-Uvarov metodu tətbiq edilmişdir. Stasionar halların dalğa funksiyalarının və enerji spektrinin analitik ifadələri tapılmışdır.

**ISSN 1028-8546**

**2021, volume XXVII, №3**
**Section: Az**

# *MÜNDƏRİCAT*

1. Polimer - nanoölçülü və polimer - mikroölçülü kompozitlərin hibridinin yaradılması üçün pyezoelektrik fazalı altlığın alınması texnologiyası
**M.Ə. Qurbanov, F.N. Tatardar, İ.S. Ramazanova, A.F. Nurəliyev, Z.A. Dadaşov** 3
2. Qaz boşalmaların təsirinə məruz qalan polimer materialların modifikasiyası
**X.F. Əliyeva, F.Ş. Cəfərova, G.Ə. Muradova** 7
3. *p*-CdTe/*n*-CdZnS anizotip heterokeçidinin fiziki xassələri
**E.F. Nəsirov** 10
4. Yarımkeçirici nanohissəciyin səthində qaz molekullarının adsorbsiyası
**R.R. Hüseynov, R.Ə. Əlizadə, V.S. Tağıyev, N.B. Mustafayev** 14
5. Elektrik sahəsinin təsiri ilə polietılen+nanogil nanokompozitlərdə baş verən molekulyar proseslər
**A.R. Sadıqova, A.Ə. Hadıyeva, P.B. Əsilbəyli, E.S. Səfiyev** 17
6. Kvant çuxurlarında ikiölçülü elektron qazının termoelektrik hərəkət qüvvəsi
**M.M. Babayev, X.B. Sultanova** 23
7. $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$ heksaferritinin yuxarı və aşağı temperaturlarda atom dinamikası
**A.İ. Məmmədov, S.H. Cabarov, R.Z. Mehdiyeva, R.E. Hüseynov** 27
8. Sonlu temperaturda $\omega$ mezon – nuklon minimal qarşılıqlı təsir sabiti $g_{\omega NN}(T)$
**N. Ə. Nəsibova** 34
9. 10 faizli qadoliniumla aşqarlanmış karbon nanoborunun volt-amper xarakteristikası
**R.Q. Abaszadə** 38
10. Nöqtəvi defektlərin GaX(X=S, Se) tipli ikiölçülü (2D) kristallarının xassələrinə təsiri və energetik parametrlərin sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi ilə hesablanması
**S.N. Mustafayeva, S.S. Hüseynova** 41
11. $Ni_{0.4}Zn_{0.6}Fe_2O_4$ və SmS əsaslı FD-rezistor nanorezonatorunun şüalanma xarakteristikası
**Ş.N. Əliyeva** 49
12. $Ni_{0.4}Zn_{0.3}Cu_{0.3}Fe_2O_4$ ferritinin quruluş və fiziki xassələri
**İ.F. Yusibova** 53
13. **FİZİKA, 2021, vol. XXVII №3 section: En** buraxılışında dərc olunan məqalələrin qısa xülasəsi 57

www.physics.gov.az