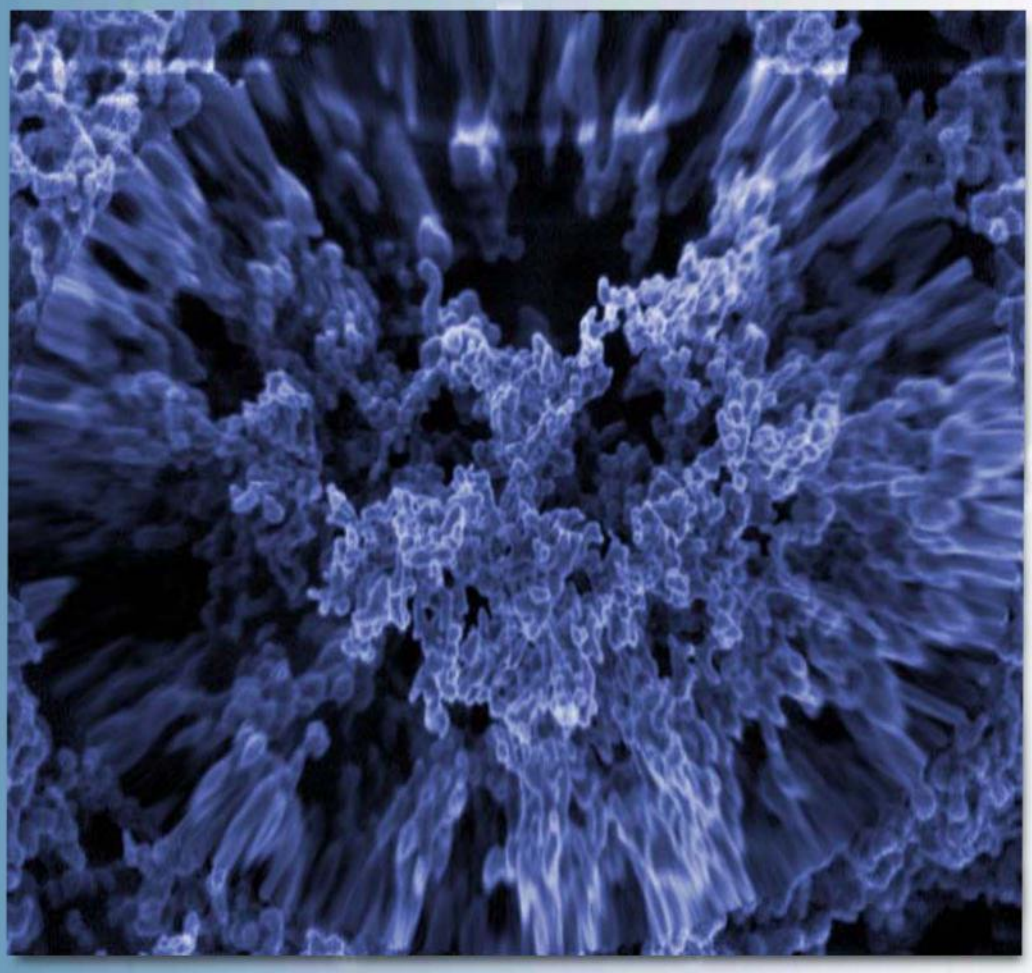
ISSN 1028-8546

Volume XXVIII Number 1
Section: Az March, 2022

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. XXVIII, Number 01, 2022
Section: 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
Boris Denker, Russia
Vyacheslav Tuzlukov, Belarus
Gennadii Jablonskii, Belarus
Vladimir Man'ko, Russia
Mirhasan Seyidov, Turkey
Dieter Hochheimer, USA
Victor L'vov, Israel
Huseyn Ibragimov, Azerbaijan
Nazim Mamedov, Azerbaijan
Majid Ebrahim-Zadeh, Spain
Anatoly Boreysho, Russia
Mikhail Khalin, Russia
Javad Abdinov, Azerbaijan
Faik Mikailzade, Turkey
Tayar Djafarov, Azerbaijan
Kerim Allahverdiyev, Azerbaijan
Talat Mehdiyev, Azerbaijan
Zakir Jahangirli, Azerbaijan
Salima Mehdiyeva, Azerbaijan
Nadir Abdullayev, Azerbaijan
Oktay Tagiyev, Azerbaijan
Ayaz Bayramov, Azerbaijan
Tofiq Mammadov, Azerbaijan
Shakir Nagiyev, Azerbaijan
Rauf Guseynov, Azerbaijan

TECHNICAL EDITORIAL BOARD

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

$TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ BƏRK MƏHLULUNUN NÜMUNƏLƏRİNİN HAZIRLANMASI METODUNUN AFM FAZA KEÇİDİNƏ VƏ ELEKTRİK XASSƏLƏRİNİƏ TƏSİRİ

A.İ. CABBAROV
Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,
Bakı, AZ-1143, Azərbaycan
ayd.jabb@list. ru

$TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulu təmiz elementlərindən birbaşa sintez yolu ilə alınmışdır. Alınmış bərk məhlulun termo-e.h.q. və elektrik keçiriciliyi 77-350K temperatur intervalında tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, 2.5%-li Ga bərk məhlulunun nümunəsinin alınma üsulundan asılı olaraq Neel temperaturu monokristalda T_N = 150 K, preslənmiş nümunələrdə isə T_N = 180,5 K olur. Nümunənin termo-e.h.q.-in T_N = 150 K-də monokristalda və müvafiq olaraq preslənmiş nümunələrdə 255 K və 284 K-də *p*-tipindən *n*-tipinə keçməsi müşahidə olunur.

Açar sözləri: bərk məhlul, maqnit faza keçidi, aşqar, termoelektrik hərəkət qüvvəsi.
PACS: 541.123.3

GİRİŞ

Uzun illərdir ki, $TlFe_{1-x}Ga_xS_2$ bərk məhlulunun (S, Se, Te) sistemləri maraqlı tədqiqat obyektləri kimi müxtəlif elmi mərkəzlərdə öyrənilir. Bu materiallara olan maraq isə ilk növbədə onların anizotrop yarımkeçirici olaraq, yüksək foto və rentgen həssaslığı ilə bərabər maqnit xassəsinə malik olmalarıdır [1, 2]. Göstərilən sistem birləşmələrinin digər maraqlı xüsusiyyətlərindən biri də onlarda temperaturdan asılı olaraq baş verən maqnit faza keçidinin (AFM) olmasıdır. Göstərilən sistem birləşmələrində digər maraqlı xüsusiyyətlərindən biri də ondan ibarətdir ki, bərk məhlullar əsasında onların fiziki parametrlərini dəyişmək olar.

Bunları nəzərə alaraq ədəbiyyatda [3, 4] müəlliflər uyğun olaraq $TlFeS_2$ və $TlGaS_2$ tərkibli üçqat birləşmə kristallarını almış, onların rentgen faza analizlərini aparmışlar. Müəyyən olunmuşdur ki, $TlFeS_2$ qəfəs parametrləri a=11.636Å, b=5.304Å, c=6.799Å, β=116.7° fəza qrupu *C2/m* olan monoklin quruluşa malikdir [3] və $TlGaS_2$ qəfəs parametri a=10.299Å, b=10.284Å, c=15.175Å, β = 99.603° fəza qrupu *C2/c* olan monoklin quruluşlu fazadır [4]. $TlFeS_2$ və $TlGaS_2$ polikristallarda və onların bərk məhlullarında $TlFe_{1-x}Ga_xS_2$ (x=0; 0.01; 0.025; 0.05; 0.075) otaq temperaturlarında Ritveld metodu ilə uyğun qəfəs parametrləri hesablanmışdır [5]. Müəyyən edilmişdir ki, $TlFeS_2$ kristalının qəfəs parametrləri a = 11.65Å, b=5.29Å, c=6.81Å, β = 116.87° və $TlGaS_2$ kristalı üçün a=10.29Å, b=10.27Å, c=15.16Å, β = 99.44° və bu [3, 4]-cü ədəbiyyata uyğundur. Göstərilmişdir ki, $TlFe_{1-x}Ga_xS_2$ (x = 0; 0.01; 0.025; 0.05; 0.075) bu tərkibli bərk məhlullarda Ga aşqarının artması a parametrinin azalmasına, b parametrinin və β bucağının artmasına, c parametrinin praktiki olaraq dəyişməz qalmasına səbəb olur. Müəyyən edilmişdir ki, $TlFe_{1-x}Ga_xS_2$ kristalının qəfəs sabiti onun tərkibinin dəyişməsi (Ga – X) ilə onun bu üçqat bərk məhlulu alınır.

[6]-cı ədəbiyyatda $TlGaS_2$, $TlFeS_2$ və $TlFe_{1-x}Ga_xS_2$ kristallarının maqnit qavrayıcılığı və maqnitlənməsi tərkibdən və temperaturdan asılılıqları verilmişdir. Bu temperatur asılılığından görünür ki, otaq temperaturunda $TlGaS_2$ diamaqnit, ancaq $TlFeS_2$ paramaqnit halındadırlar. $TlFeS_2$ kristalının maqnit qavrayıcılığının temperatur asılılığından göründüyü kimi, bu maddədə antiferromaqnit keçidi var və bu maqnit faza keçidinin fiziki xassələri haqqında [7, 8 və 9]-ədəbiyyatda da göstərilmişdir. Göstərilmişdir ki, qallium (Ga) kationun artması ilə $TlFe_{1-x}Ga_xS_2$ bərk məhlulun maqnitlənmə əmsalı azalır və Neel (T_N) temperaturu azalır.

Bu iş isə $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulunun 77 – 350K tempetur intervalında, nümunənin alınma metodundan asılı olaraq, monokristal P=1.5·10^3 kq/sm^2 təzyiqlə preslənmiş, əzilmiş və əzilərək ovulmuş monokristalların xüsusi müqavimətlərini (ρ), elektrikkeçiriciliyini (σ) və termo-e.h.q.-ni (S) tədqiq etməklə, antiferromaqnit (AFM) faza keçidinə 2.5% Ga kationun təsiri öyrənilir.

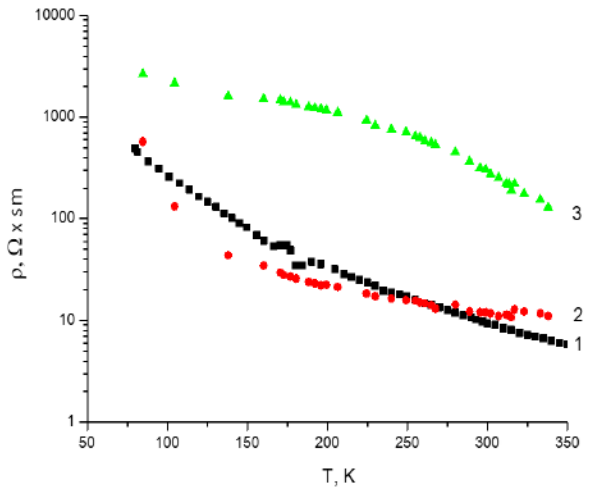
TƏDQİQAT METODU

Üçqat birləşmələrin $TlFeS_2$ və $TlGaS_2$ sintezi xüsusi təmiz kimyəvi elementlərdən, yəni Tl (Tl-00), Fe (Fe-3N), Ga (Ga-5N) və S (xkt 16-5) ibarət olaraq, stexiometrik nisbətdə götürülür. Bu maddələrin sintezi [5]-ci ədəbiyyatda göstərilən qaydada aparılmış və [3, 4]-ə uyğundur.

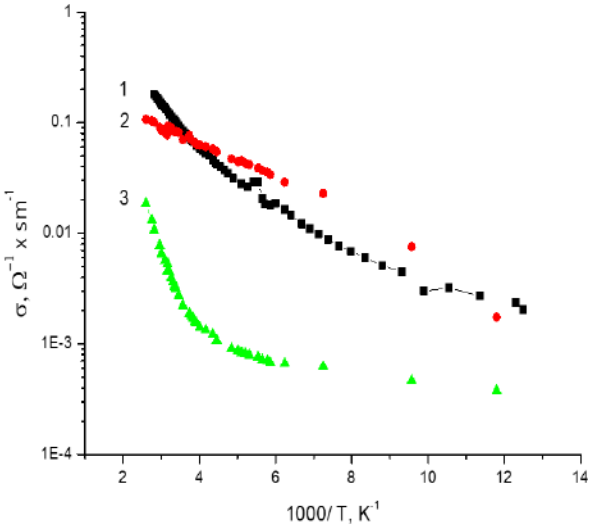
$TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulunun 77–350 K temperatur intervalında xüsusi müqaviməti (ρ), elektrikkeçiriciliyi (σ) və termo-e.h.q. (S) tədqiq edilmişdir. Xüsusi müqaviməti (ρ), elektrikkeçiriciliyi (σ) və termo-e.h.q. (S) tədqiq edilən nümunələrə kontaktlar misin elektrolitik çökdürülməsi yolu ilə vurulmuşdur. $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulunun xüsusi müqavimətinin (ρ), elektrikkeçiriciliyinin (σ) və termo-e.h.q.-nin (S) ölçülməsi 3% dəqiqliklə , dörd zondlu üsulla yerinə yetirilmişdi.

$TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulunun üzərində aparılan təcrübi tədqiqatların nəticələri uyğun olaraq aşağıda verilən 1, 2, 3 şəkillərdə əksini tapmışdı. Bu kristallardan elektrik ölçüləri üçün nümunələr paralelepiped formasında olaraq: 1 – monokristal 14.48 · 1.4 · 1.26 mm^3, 2 - preslənmiş 10.9·5.27·1.0 mm^3 və 3 - ovulduqdan sonra preslənmiş 8.7 · 5.09 · 1.14 mm^3.

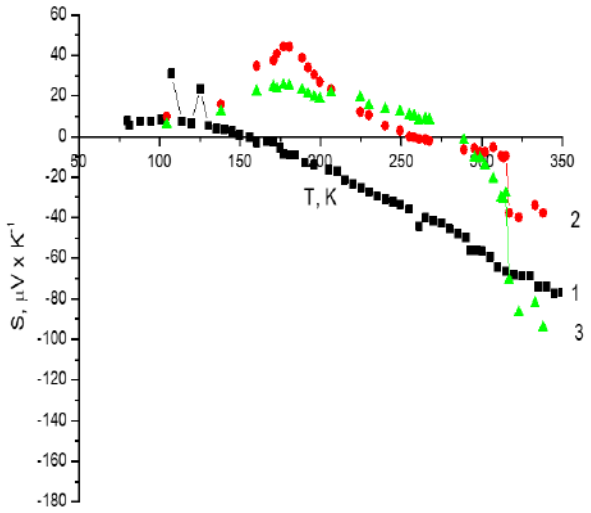
131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com



Şəkil 1. Xüsusi müqavimətin temperaturdan asılılığı:
1 – monokristal, 2 – preslənmiş monokristal və
3 - ovulub preslənmiş monokristal.



Şəkil 2. Elektrik keçiriciliyinin temperatur asılığı:
1 - monokristal, 2 - preslənmiş monokristal və
3 - ovulub preslənmiş monokristal.



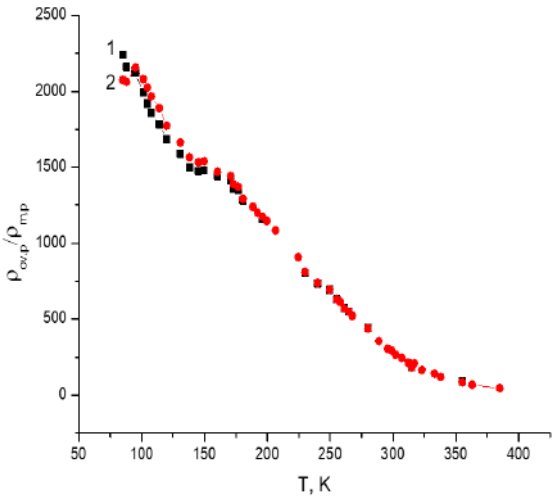
Şəkil 3. Termo-e.h.q. temperaturdan asılılığı:
1 - monokristal, 2 - preslənmiş monokristal və
3 - ovulub preslənmiş monokristal.

Şəkil 1-dən göründüyü kimi, Neel temperaturunda $\rho(T)$-də müqavimət kiçik sınmaya malik olur, bu da maqnit faza keçidinin yaratdığı anomaliyadır. Göstərilən şəkillərdə $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulda antiferromaqnit faza keçidinin yaratdığı anomaliyanı göstərir [6].

Verilən əyrilərin mahiyyətini açmaq üçün [7] –ci ədəbiyyatda göstərilən ifadədən istifadə etmək daha əlverişli sayılmışdır. Bu ifadə belədir:

$$\Delta E_a = \frac{2k_B}{0.43} \mid \{\Delta\, lg(\sigma)\,/\Delta(1000/T\}\mid$$

Verilən ifadədə ΔE_a, eV - aktivləşmə enerjisi; k_B=0.87 x 10^{-4} eV/K, k_B – Bolsman əmsalı; T, K – Kelvin şkalası ilə temperatur; σ, Om·sm – nümunənin elektrikkeçiriciliyidir. $lg(\sigma)$ asılılığından asanlıqla müxtəlif temperaturlar üçün aktivləşmə enerjisini də hesablamaq mümkündür. Belə ki, şəkil 2-dən göründüyü kimi $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ nümunənin faza keçidinə qədər, yəni paramaqnit halında monokristalda (1), preslənmiş (2) və ovudularaq preslənmiş (3) nümunələrin aktivasiya enerjiləri ΔE_{am} = 0.083 eV , ΔE_{ap} = 0.103 eV və $\Delta E_{aov.p}$= 0.337eV, antiferromaqnit (AFM) halında isə ΔE_{am} =0.137eV, ΔE_{ap} = 0.063 eV və $\Delta E_{aov.p}$ = 0.02 eV olmuşdur. Bu enerji fərqi AFM faza keçidinə ayrılan enerjini göstərir. Şəkil 3-dən göründüyü kimi $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulun termo-e.h.q.-nin temperatur asılılığından müəyyən olunmuşdur. Monokristalda – 1, preslənmiş – 2 və ovudularaq preslənmiş – 3 fərqli nəticələr alınır. Belə ki, maqnit faza keçidində $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulun termo-e.h.q.-nin Neel temperaturunda S_m= 0 (T_N = 150K) (əyri 1), S_p=44μV (T_N = 180.5K) (əyri 2) və $S_{ov.p}$ = 24.8 μV (əyri 3) (T_N=180.5K) qiymətlərini almışlar. Preslənmiş nümunələr T = 255K və T =284K temperaturda uyğun olaraq S_p= 0 və $S_{ov.p}$= 0 qiymətlərini almışlar. Bu, onu göstərir ki, antiferromaqnit faza keçidi monokristalda (1) T_N=150K-də preslənmişlər və nümunələrdə (2 və 3) T_N=180.5K-də paramaqnit halına keçmişlər. S_p = 0 və $S_{ov.p}$= 0 termo-e.h.q.-nin bu qiymətləri AFM quruluşunun yaratdığı p-tip elektronların səpilməsini göstərir.



Şəkil 4. Ovulub preslənənmiş $\rho_{ov.p}$ xüsusi müqavimətinin monokristalın ρ_m, preslənmiş monokristalın ρ_p xüsusi müqavimətlərinə nisbəti

$TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulunun ovulmuş, preslənmiş nümunəsinin müqavimətinin ($\rho_{ov.p}$) monokristalın (ρ_m) və preslənmiş (ρ_p) numunələrinə nisbəti şəkil 4-də göstərilmişdir. Bu şəkildə xüsusi müqavimətin temperatur asılılığında 150-180K intervalında anomaliya Neel temperaturundakı AFM maqnit faza keçidini biruzə verir. Bu həmdə monokristalın müqavimətinin mexaniki təsirindən asılı olmadığını göstərir.

ALINAN NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil 1-dən göründüyü kimi, Neel temperaturunda $\rho(T)$-də müqavimət kiçik sınmaya malik olur ki, bu da sıçrama prosesinin aktivləşmə enerjisinin dəyişməsi ilə izah olunur. Eksperiment nəticələrindən aydin olur ki, T < 180.5K qiymətlərində $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ nümunəsinin keçiriciliyi, temperaturdan asılı olmayaraq, kristalın antiferromaqnit nizamlılığının (T_N=180.5K) dağılması ilə əlaqədar ola bilər. $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulun (şəkil 2) $\sigma(1000/T)$ asılılığının aşağı hissəsində temperaturun azalması ilə monoton azalma müşahidə olunur. Bu maddənin paramaqnit halında aktivasiya enerjisi monokristalda – 1 ΔE_{am}=0.083 eV, preslənmiş – 2 ΔE_{ap}=0.103 eV və ovudularaq preslənmiş – 3 $\Delta E_{aov.p}$=0.337 eV, ancaq antiferromaqnit halında 1– ΔE_{am}=0.137eV, 2 – ΔE_{ap} = 0.063 eV və 3 – $\Delta E_{aov.p}$=0.02 eV olmuşdur. Bu enerji fərqi AFM faza keçidinə ayrılan enerjini göstərir. 80-180 K temperatur intervalında (maqnit nizamlılıq halı) bərk məhlulda keçiriciliyin bu halı, Fermi səviyyəsi yaxınlığında lokallaşmış yükdaşıyıcıların yaranan ensiz enerji zolağıdır [4, 5]. Bu halı Mott koordinatlarında $lg(\sigma)=f(T^{-1/4})$ yenidən qurulmuş keçiriciliyin temperatur asılılığı da sübut etmişdir və Fermi səviyyəsi yaxınlığında lokallaşmış halların sıxlığı N_F=2.9·$10^{19}$$eV^{-1}sm^{-3}$ olduğunu göstərmişdir [4]. $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulunun termo-e.h.q.-nin temperatur asılılığı $S(T)$ şəkil 3-də verilmişdir. T_N=150K-də $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ monokristalının termo-e.h.q.si - $S(T)$ asılılığında işarənin inversiyası ilə baş verir. Bu da d –elektronlarının yaratdığı spin düzülüşünün dağılması nəticəsində p-tip termo-e.h.q.-nin n-tip olmasına səbəb olmuşdur. Temperaturun sonrakı artması əvvəllər tamamilə dolmuş alt zonanın boşalmasına səbəb olur. $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulu üçün aparılan maqnit tədqiqatları göstərmişdir ki, monokristallar üçün T_N = 150K, preslənmiş nümunələr üçün isə T_N = 180.5K temperaturlarında nümunələrdə maqnit faza keçidinin əmələ gəlməsi baş verir. $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulun monokristallarının maqnit qavrayıcılılığının ölçülməsi, 2-400 K temperatur intervalında kvazı-birölçülü antiferromaqnitlər üçün xarakterik olan halın maqnit tədqiqatları ilə uzlaşmasını sübut etdi [6, 7].

NƏTİCƏ

Müəyyən edilmişdir ki, bərk məhlulun 2.5% Ga aşqarlı nümunəsinin alınma metodundan asılı olaraq, Neel temperaturu monokristalda T_N = 150K, preslənmiş nümunələrdə T_N=180.5K olaraq dəyişir. $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ nümunəsinin termo-e.h.q. monokristalda T_N = 150K, preslənmişlərdə isə uyğun olaraq 255K və 284K tip dəyişmə müşahidə edilir. Bu, maqnit faza keçidinin p-tipli deşiklərin yaratdığı ensiz enerji zolağının tam dağılmasını göstərir. Həmçinin qeyd etmək lazımdır ki, numunələrdə mexaniki təsir nəticəsində p tipdən n tipə dəyişmə keçidləri müşahidə olunur.

[1] *E.M. Керимова.* Кристаллофизика низкомерных халькогенидов. Баку: Изд-во, «Елм», 2012. 712с.

[2] *А.У.Шелег, В.Г.Гуртовой, В.А.Чумак, С.Н.Мустафаева, Э.М. Керимова.* Рентгенографические исследования кристаллов системы $TlFe_{1-x}Ga_xS_2$/Сборник докладов 6-ой Межд. Конф. «Актуальные проблемы физики твердого тела» (ФТТ-2013), Минск, Беларусь, 15-18 октября, 2, 2013, 132-134.

[3] *G.E.Delgado, A.J.Mora, F.V.Perez, J.Gonzalez.* Crystal structure of the ternary semiconductor compound thallium gallium sulfide, $TlGaS_2$, Physica B, 391, 2007, 385– 388.

[4] *С.Н.Мустафаева,Э.М.Керимова, А.И.Джаббаров.* Изв. НАН Азербайджана. Сер. Физика и астрономия, т. XXXIV, № 5, 2014, с. 56-60.

[5] *С.Н.Мустафаева, М.М.Асадов, С.Б. Кязимов и др.* Неорганические Материалы, т.48, 2012, с.1110–1113.

[6] *К.И. Янушкевич, В.Г. Гуртовой, А.У. Шелег и др.* Изв. НАН Беларуси. Сер. Физ-мат наук, Минск, № 3, 2013, с. 29-35.

[7] Практикум по полупроводникам и полупроводниковым приборам. Под редакцией *К.В. Шалимовой.* М.: Изд-во «Высшая школа», 1967. - 464 с.

A. I. Jabbarov

INFLUENCE OF THE METHOD OF PREPARATION OF $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ SAMPLES ON THE AFM PHASE TRANSITION

A solid solution of the composition $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ was obtained by direct synthesis from the initial elements. The thermo-emf and electrical conductivity of the obtained solid solution have been studied in the temperature range 77-350K. It was found that, depending on the method for preparing a 2.5% Ga solid solution sample, the Néel temperature changes from T_N = 150 K in a single crystal to T_N = 180.5 K in pressed samples. The thermo-emf of the sample is observed to pass from p-type to n-type in a single crystal at T_N = 150 K and in pressed samples at 255 K and 284 K, respectively.

A.İ. CABBAROV

А. И. Джаббаров

ВЛИЯНИЕ МЕТОДА ПРИГОТОВЛЕНИЯ ОБРАЗЦОВ ТВЕРДОГО РАСТВОРА $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ НА АФМ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Методом прямого синтеза из исходных элементов получен твердый раствор состава $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$. Изучены термо-эдс и электропроводность полученного твердого раствора в интервале температур 77-350K. Установлено, что в зависимости от способа получения образца твердого раствора 2.5% Ga температура Нееля изменяется от T_N = 150K в монокристалле до T_N = 180.5K в прессованных образцах. Наблюдается переход термо-эдс образца от *p*-типа к *n*-типу в монокристалле при T_N = 150K и в прессованных образцах 255K и 284K соответственно.

Qəbul olunma tarixi: 22.12.2021

PVDF+PKR12 KOMPOZİTİN İSTİLİK VƏ KİNETİK PARAMETRLƏRİNİN TƏYİN EDİLMƏSİ

B.M. İZZƏTOV, B.H. XUDAYAROV, F.F. YƏHYAYEV
Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,
Bakı, AZ-1143, H. Cavid küç., 131, Azərbaycan
bayramh@mail.ru

PVDF+PKR12 kompozitində istilik selinin dəyişməsi və xüsusi istilik tutumu (-100÷600)°C temperatur intervalında tədqiq edilmişdir. Bütün nümunələrdə təxminən (158-160)°C temperaturda endotermik pik, (430-495)°C temperatur aralığında isə ekzotermik piklər müşahidə edilmişdir. Termoqram əyrisinin xarakterik nöqtələrinə əsasən məlum düsturlar vasitəsilə nümunələrin xüsusi istilik tutumu, entalpiyanın və entropiyanın dəyişməsi, həmçinin kristallıq dərəcəsi hesablanmışdır.

Açar sözlər: differensial skan kalorimetriya, istilik tutumu, polimer, pyezofaza, entalpiya, entropiya, keramika, termoqram.
PACS: 77.55,+f, 7784._s. 77.84.Dy, 77.84.LF, 81,07.Pr. 82.35.Np

GİRİŞ

Pyezokeramika-polikristallik quruluşa malik olub pyezoelektrik və seqnetoelektrik xassələr daşıyan süni alınan materialdır. Pyezokeramik materiallar metalların oksidlərindən sintez olunur. Adından göründüyü kimi, pyezokeramik materiallar pyezoelektrik effekt adlanan xassəyə malikdirlər [1-2]. Monokristallik pyezoelektriklərlə müqayisədə pyezokeramika texnoloji baxımdan daha ucuz başa gəlir, həm də qabarıq şəkildə pyezoelektrik və dielektrik xassələrə malikdir. Pyezokeramikadan istənilən formada – lövhə, disk, silindr, boru, sfera və s. şəkilli – məmulatlar hazırlamaq olur, halbuki bunları monokristallar əsasında hazırlamaq ya olduqca çətin olur, ya da heç mümkün olmur. Təcil və təzyiq sensorların (vericilərin), həmçinin zərbə dalğalarının pyezoqeydedicilərinin, pyezorezonans filtrlərinin, ləngitmə xətlərinin hazırlanmasında pyezokeramikadan geniş istifadə olunur [3]. Pyezokeramika rütubətin, mexaniki yüklənmənin və atmosferin təsirinə qarşı çox davamlıdır. Fiziki xassələrinə görə pyezokeramika kimyəvi birləşmədən, yaxud kristalit dənəciklərin bərk məhlulundan ibarət polikristallik seqnetoelektrikdir. Kristalitlərin ölçüləri, adətən 2-dən 100 mkm-ə qədər olur. Hər bir kristalit özlüyündə seqnetoelektrik kristaldır. Pyezokeramika kristallik seqnetoelektriklərinə xas olan bütün xassələrə malik olur. Kimyəvi tərkibinə görə pyezokeramika, adətən özündə qurğuşun və bariumun ikivalentli ionlarını, həmçinin titan və sirkoniumun dördvalentli ionlarını birləşdirən mürəkkəb oksiddir [4]. İlkin materialların faiz nisbətini dəyişməklə və müxtəlif əlavələr qatmaqla müəyyən elektrofiziki və pyezoelektrik xassələri daşıyan pyezokeramik tərkib sintez etmək mümkündür. Bütün saydığımız üstünlüklərlə yanaşı, hər bir klassik keramikaya xas olan yüksək dərəcədə kövrəklik xassəsi pyezokeramikaya da aiddir. Bir çox hallarda onlardan hazırlanmış detallar, yaranmış deformasiyalara qarşı davamsız olur və iş prosesində sıradan çıxırlar. Bu baxımdan, elastik xassələrə malik və pyezokeramikaya məxsus xassələri özündə birləşdirən material əldə etmək məqsədi ilə pyezokeramik ovuntunu polimer matrisaya daxil edib kompozit material əldə etmişik [5-6].

Apardığımız eksperimental işdə qarşıya qoyduğumuz məqsəd bundan ibarətdir: termik analiz (DSK- differensial skan kalorimetr üsulu ilə) aparmaqla kompozit materialda struktur və aqreqat hallarının dəyişmələrini (I və II növ faza çevrilmələrini) aşkar etmək, termoqram əyrisində (differensiallaşmış istilik selinin temperaturdan asılılığı) bu çevrilmələrə uyğun anomaliyalarda C_p – istilik tutumunu və ΔH – entalpiya dəyişmələrini təyin etməkə materialın termodinamik funksiyalarını və kinetik parametrlərini (ΔS – entropiyanın dəyişməsi, kristallıq dərəcəsi və s.) təyin etmək.

NÜMUNƏNİN ALINMASI VƏ TERMİK ANALİZİN APARILMASI

Kompozit nümunə isti preslənmə yolu ilə əldə edilir. Bu məqsədlə, ovuntu halında olan polimer maddə ovuntu halında olan pyezokeramik maddə ilə 40 dəqiqə ərzində diqqətlə qarışdırılır. Alınan qarışıq ovuntu, nümunəyə forma verən qəlibə doldurulur və presə yerləşdirilir. Müvafiq temperaturu (200-210)°C seçməklə isti preslənmə yolu ilə 14,7 MPa təzyiq altında qarışıq ovuntu preslənir. Presdən çıxarılan isti nümunə soyuq suya salınaraq dərhal soyudulur və nümunənin alınması başa çatır [7].

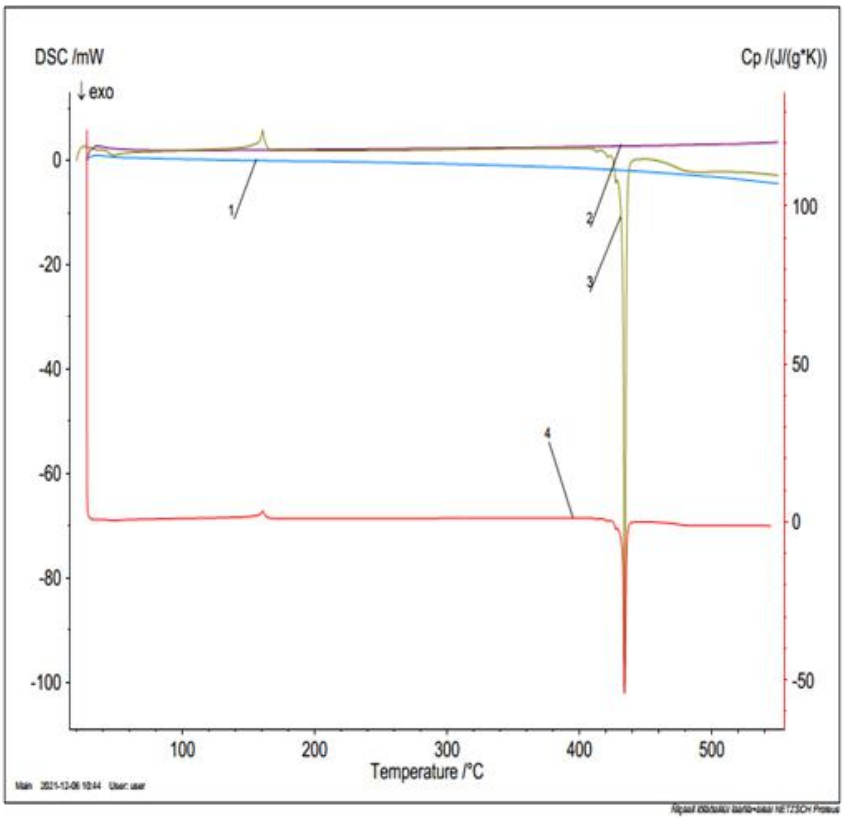
Nümunənin termik analizi NETZSCH DSC 204 F1 markalı (Almaniya) differensial skan kalorimetri cihazında təsirsiz qaz mühitində (arqon) aparılır. Mühafizə qazı olaraq, azotdan istifadə olunur. Kütləsi 40 mq olan kompozit nümunə alüminium yuvacığa yerləşdirilir. Eyni ilə bunun kimi digər yuvacığa etalon nümunə olaraq sapfir yerləşdirilir və tamamilə identik şəraitdə hər iki yuvacıq 10K/dəq sürəti ilə qızdırılır. Təsirsiz qaz axınının sürəti 20 ml/dəq seçilir və tədqiqatlar işin məqsədinə uyğun olaraq (-10÷600)°C temperatur intervalında aparılır [8].

EKSPERİMENTAL NƏTİCƏLƏRİN ANALİZİ

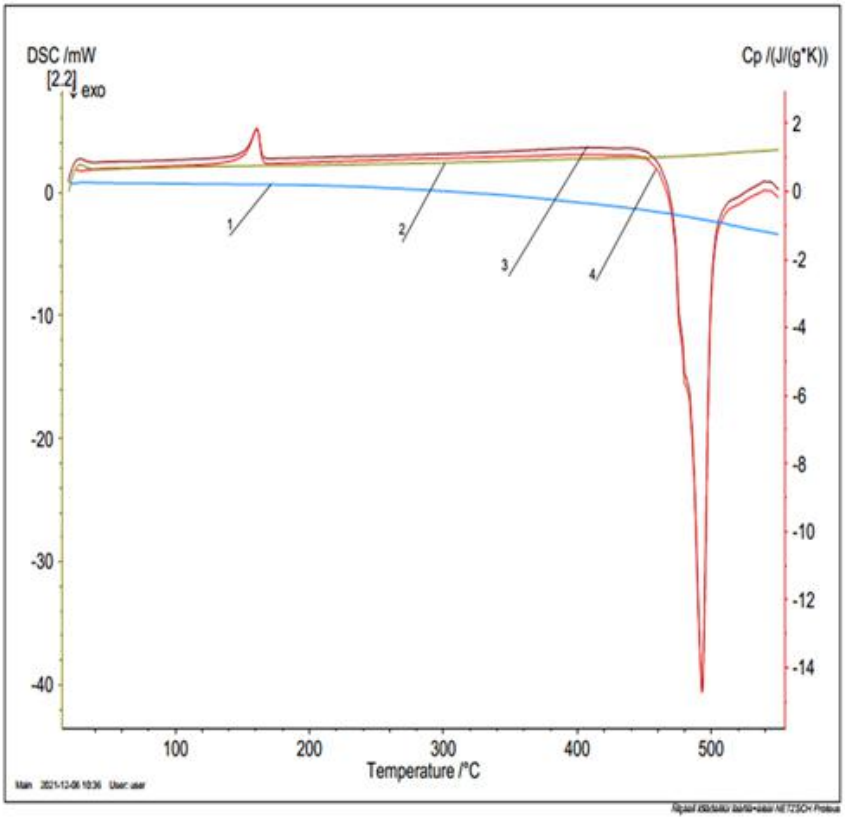
Eyni doldurucu keramika müxtəlif polimer matrisalara əlavə olunmaqla kompozit nümunələr alınmışdır. İlk olaraq müxtəlif həcmi paylarda götürülmüş PVDF+PKR12 (polivinildenftorid+pyezokeramika) kompozit nümunəsi ilə DSK (differensial skanedici ka-

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

lorimetriya) qurğusunda aparılan eksperimentlərin nəticələri üzərində dayanaq. Şəkil 1-də PVDF+PKR12 kompozitində komponentlərin (80-20)% həcmi paylarına uyğun nümunə üçün DSK termoqramı verilmişdir.



Şəkil 1. PVDF+PKR12 (80-20 %) kompozitinin DSK əyrisi: 1-boş alüminium yuvacıqlar üçün DSK termoqramı; 2-etalon mümunə (sapfir) üçün DSK termoqramı; 3- kompozit nümunənin DSK termoqramı; 4- kompozit nümunənin xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığı.

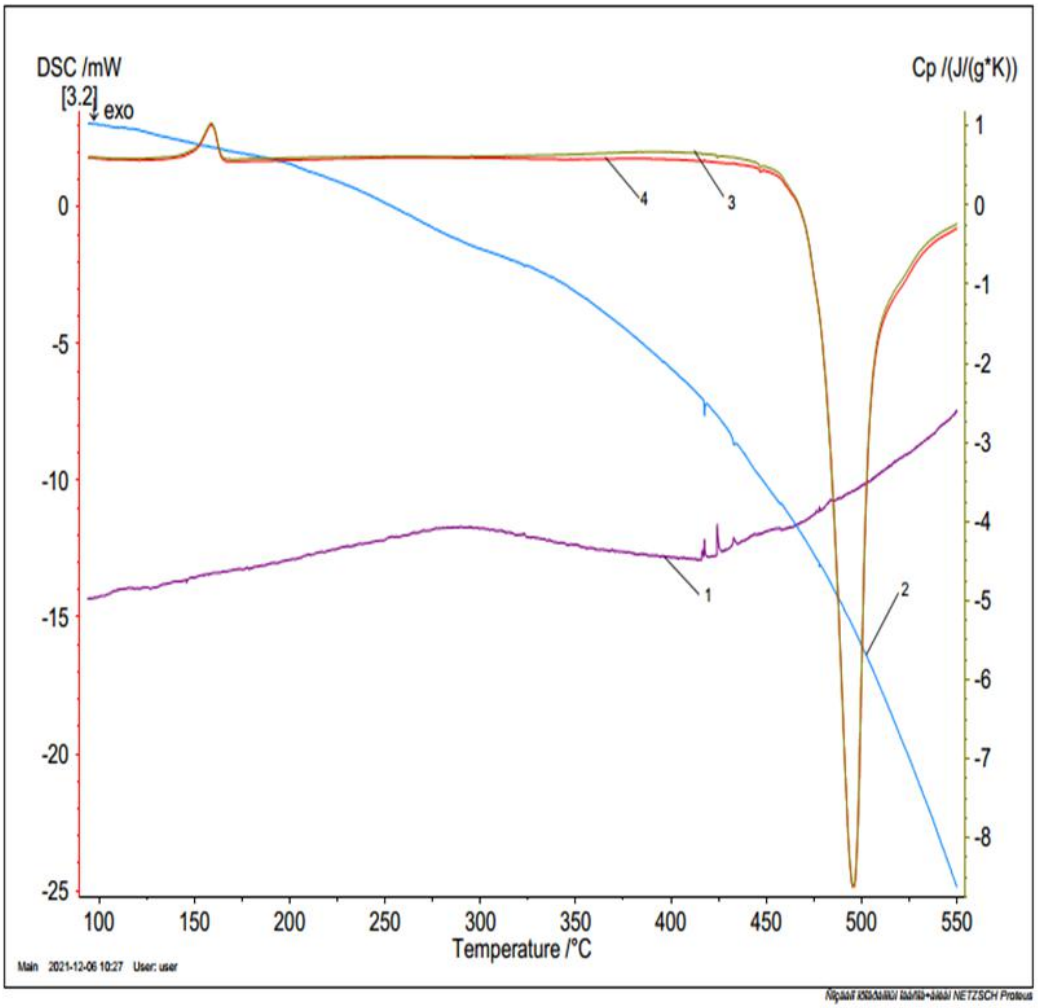


Şəkil 2. PVDF+PKR12 (70-30%) kompozitinin DSK əyrisi: 1-boş alüminium yuvacıqlar üçün DSK termoqramı; 2-etalon nümunə (sapfir) üçün DSK termoqramı; 3- kompozit nümunənin DSK termoqramı; 4- kompozit nümunənin xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığı.

Göstərilən kompozit üçün termoqram əyrisində iki pik (termik anaomaliya) qeydə alınmışdır. Endotermik effektlə baş verən birinci pikin maksimumuna uyğun temperatur 160,4°C olmuşdu. Həmin temperatur matris kimi istifadə olunan polimerin ərimə temperaturuna ((160-180)°C) yaxın olduğundan, burada baş verən termik çevrilmənin ərimə prosesi olduğunu deyə bilərik. Bu ərimənin konqruyent, yaxud inkonqruyent olduğunu öyrənmək üçün, temperaturun eyni dəyişmə sürəti ilə ərimiş nümunənin soyuması prosesi aparılmışdır. Bu halda, alınmış termoqram əyrisində ekzotermik kristallaşmaya uyğun pikin maksimumunun əriməyə uyğun pikin maksimumuna bərabər olması və bu piklərə uyğun həndəsi sahələrin (qiymətcə entalpiyanın dəyişməsi) eyni olması müşahidə olunmuşdur. Bu nəticələr ərimənin konqruyent olmasını sübut edir. Hər iki prosesdə entalpiyanın dəyişməsi (ədədi qiymətcə pikin sahəsinə bərabər olan kəmiyyət) $\Delta H = 21{,}26\frac{C}{q}$ olmuşdur. Termoqram əyrisində müşahidə olunan ikinci pik endotermik olaraq 434°C temperaturunda alınmışdır. Bu temperaturda baş verən termik çevrilmə polimerin təsiri ilə maye halda olan kompozitdə baş verən struktur dəyişiklikləri ilə bağlıdır. Bu çevrilmə zamanı nümunənin hər qram kütləsindən 160,7°C enerji ayrılmış, yəni entalpiyanın dəyişməsi $\Delta H = -160{,}7\ \frac{C}{q}$ olmuşdur.

Şəkil 2-də komponentlərinin həcmi paylarının nisbəti (70-30)% olan PVDF+PKR12 kompozit nümunənin termoqram əyrisi göstərilmişdir. Birinci eksperimentdə olduğu kimi, bu eksperimentdə də iki əsas termik çevrilmə baş vermiş və nəticədə iki pik qeydə alınmışdır. Əriməyə uyğun olan birinci pikin maksimumu 159,2°C - dir. Bu pikə uyğun entalpiyanın dəyişməsi $\Delta H = 10{,}64\frac{C}{q}$ olmuşdur. Qrafikdən görünür ki, polimer matrisanın təsiri ilə formalaşan ikinci pikin maksimumu 485,7°C, ayrılan enenrji isə (entalpiyanın dəyişməsi) $\Delta H = -370{,}7\frac{C}{q}$ olmuşdur.

Sonrakı eksperimentdə kompoziti təşkil edən komponentlərin həcmi payları (50-50)% götürülmüş və alınmış nəticələr şəkil 3-də göstərilmiş termoqram əyrisində əks olunmuşdur. Göründüyü kimi, bu halda da iki əsas termik çevrilmə baş vermişdi. Əriməyə uyğun birinci pikin maksimum temperaturu 158,9°C, udulan enerji isə 3,305°C olmuşdur. İkinci pikin formalaşma temperaturu 495,8°C, bu çevrilmədə ayrılan enerji isə $\Delta H = -136{,}6\ \frac{C}{q}$ olmuşdur.



Şəkil 3. PVDF+PKR12 (50-50%) kompozitinin DSK əyrisi: 1- etalon mümunə (sapfir) üçün DSK termoqramı; 2- boş alüminium yuvacıqlar üçün DSK termoqramı; 3- kompozit nümunənin DSK termoqramı; 4- kompozit nümunənin xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığı.

İşdə göstərilən kompozit nümunəsinin müxtəlif həcmi paylarına uyğun DSK əyrilərindən (şəkil 1-3) və aşağıdakı ifadədən istifadə olunaraq nümunənin xüsusi istilik tutumu (c_p) hesablanmışdır:

$$c_p = \frac{m_{standart}}{m_{sample}} \cdot \frac{DSC_{sample} - DSC_{Bas}}{DSC_{standart} - DSC_{Bas}} \cdot c_{p,standart} \qquad (1)$$

Burada c_p və $c_{p,standart}$ – uyğun olaraq nümunənin və etalonun T temperaturundakı xüsusi istilik tutumu, $m_{standart}$ və m_{sample} – uyğun olaraq etalonun və nümunənin kütləsi, $DSC_{standart}$ və DSC_{sample} uyğun olaraq etalonun və nümunənin T temperaturuna uyğun DSC siqnalının qiymətidir.

Həmçinin DSK spektrindən istifadə edərək tədqiq olunan kompozitlərin termodinamik və kinetik parametrləri aşağıdakı düsturların köməyilə hesablanmışdır [9]:

Entalpiya:

$$\Delta H = S_{sahə} = \int_0^T c_p \, dT \qquad (2)$$

Entropiya:

$$\Delta S = \frac{\Delta H}{T_{keçid}} = \int_0^T \frac{c_p}{T} dT \qquad (3)$$

Kristallik dərəcəsi:

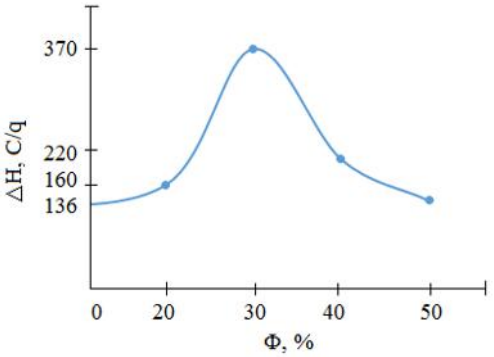
$$K = \frac{\Delta H_c}{\Delta H_m(1-x)} \cdot 100\% \qquad (4)$$

Göstərilən kompozit üçün alınan nəticələr cədvəl 1-də verilmişdir.

Cədvəl 1.

Nümunələr	Birinci maksimum				İkinci maksimum				Kristallıq dərəcəsi K, %
	Pikin temp. °C	Entalpiyanın dəyişməsi ΔH,C/q	Entropiyanın dəyişməsi ΔS,C/K	Xüsusi istilik tutumu C_p,C/q·K	Pikin temp., °C	Entalpiyanın dəyişməsi ΔH,C/q	Entropiyanın dəyişməsi. ΔS,C/K	Xüsusi istilik tutumu C_p,C/qK	
PVDF+PKR12 (80-20)%	160,4	21,26	0,133	3,623	434	-160,7	-0,369	-54,058	22,14
PVDF+PKR12 (70-30) %	159,2	10,64	0,066	2,302	469	-370,7	-0,789	-17,079	4,8
PVDF+PKR12 (50-50) %	158,9	3,305	0,021	1,037	495,8	-136,3	-0,275	-8,615	4,04

Cədvəl 1-də göstərilən nəticələrə əsasən deyə bilərik ki, kompozitdə keramikanın həcmi payı artdıqca ikinci termik çevrilmədə ayrılan enerjilərin dəyişməsində anomaliya müşahidə edilmişdi. Müxtəlif həcmi paylara uyğun ikinci termik çevrilmədə ayrılan enerjilərin keramikanın həcmi payından asılılıq qrafiki şəkil 4-də verilmişdi.



Şəkil 4. Entalpiyanın dəyişməsinin pyezofazanın həcmi payından asılılığı.

NƏTİCƏ

Müxtəlif həcmi paylara uyğun olan termoqram əyrilərindən aldığımız eksperimental nəticələri aşağıdakı şəkildə ümumiləşdirə bilərik. Hər üç qrafikdə ərimə prosesinə uyğun olan temperaturlar təxminən eyni olub götürülən polimerin ərimə oblastına yaxın olmuşdur. Ərimə prosesinə uyğun olan termik çevrilmə konqruyent olmuşdu; belə ki, həm ərimə həm də kristallaşma prosesi eyni temperaturda baş vermiş və hər iki prosesdə entalpiyanın dəyişməsi bir-birinə bərabər olmuşdur. Bununla yanaşı, kompozitdə keramikanın həcmi payı artdıqca ərimə prosesi üçün tələb olunan udulma enerjisi azalmışdı və bu nəticə kompozitdə polimerin həcmi payının azalması ilə bağlıdır.

Termoqramalarda ikinci pikin formalaşma temperaturu isə sabit qalmamış, keramikanın həcmi payı artdıqca bu temperaturun yüksəlməsi faktı müşahidə edilmişdi. Lakin bu çevrilmə zamanı ayrılan enerji monoton xarakter daşımamışdı; nümunədə keramikanın miqdarı artdıqca ayrılan enerji əvvəlcə artmış, həcmi payın 30% miqdarından sonra bu kəmiyyətin qiymətinin azalması müşahidə edilmişdi. Alınan nəticələrə əsasən deyə bilərik ki, DSK əyrisində müşahidə olunan maksimumlar kompozitin polimer fazasında və fazalararası sərhəddə gedən bir sıra proseslərin hesabına strukturun dəyişməsi, həmçinin fazalararası qarşılıqlı təsirlə bağlıdır. Yəni, fazalararası qarşılıqlı təsir artdıqca kristallıq dərəcəsi azalır, həmçinin makromolekullar özlərinin sərbəstliyini müəyyən qədər itirirlər.

[1] *Xinhua Zhu.* Piezoelectric ceramics materials: processing, properties, characterization, and applications. Piezoelectric Materials: Structure, Properties. 2009 Nova Science Publishers, Inc. pp.1-36.

[2] *Hemangi Kabra, H.A. Deore.* Pranita Patil. Review on Advanced Piezoelectric Materials

(BaTiO3, PZT). JETIR April 2019, volume 6, Issue 4. pp. 950-957.

[3] *Franziska Eichhorn, Simone Kellermann, Ulf Betke and Tobias Fey.* Phase Evolution, Filler-Matrix Interactions, and Piezoelectric Properties in Lead Zirconate Titanate (PZT)-Filled Polymer-Derived Ceramics (PDCs). Materials 2020, 13, 1520; doi:10.3390 / ma13071520 . pp. 1-14.

[4] *T.R. Shrout and S.J. Zang.* Journal of Electroceramics. 2007, 19(1) 113-26,

[5] *Mateusz Bor, Tomasz Borowczyk, Wojciech Karpiuk, Mikołaj Krakowiak, Rafał Smolec.* Assessment of the possibility of applying ceramic materials in common rail injection systems. Advances in Science and Technology Research Journal Volume 12, Issue 1, March 2018, pages 312–321.

[6] *Isiaka Oluwole Oladele, Taiwo Fisayo Omotosho and Adeol Adesoji Adediran.* Polymer-Based Composites: An Indispensable Material for Present and Future Applications. International Journal of Polymer Science, volume 2020, Article ID 8834518, 12 p.

[7] *P. Noorunnisa Khanam and Mariam Al Ali AlMaadeed*. Processing and characterization of polyethylene-based composites. Adv. Manuf.: Polym. Compos. Sci., 2015, 1, pp.63-79.

[8] *В.М.Егоров, Е.П. Смирнова, В.В. Леманов*. Физика и Техника Полупроводников, 2007, т. 49, вып8, с. 1456-1459.

[9] *ShikuiJia, Demei Yu, Yan Zhu, Zhong Wang, Ligui Chen and Lei Fu.* Morphology, Crystallization and Thermal Behaviors of PLA-Based Composites: Wonderful Effects of Hybrid GO/PEG via Dynamic Impregnating. Polymers 2017, 9, 528; doi:10.3390/polym9100528. pp.1-18

B.M. Izzatov, B.H. Khudayarov, F.F. Yahyayev

DETERMINATION OF THERMAL KINETIC PARAMETERS OF THE PVDF + PKR12 COMPOSITE

The change in the heat flux and specific heat capacity of the PVDF + PKR12 composite at the temperature range (-100÷600)0C have been studied. Endothermic peaks were observed in all samples at (158-160)°C, and exothermic peaks were observed at (430-495)°C. From the characteristic points of the thermogram curve, the specific heat of the samples, the change in enthalpy and entropy, and the degree of crystallinity were calculated from the known formulas.

Б.М. Иззатов, Б.Г. Худаяров, Ф.Ф. Яхьяев

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОКИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ КОМПОЗИТА ПВДФ + ПКР12

Изучено изменение теплового потока и удельной теплоемкости в композите ПВДФ+ПКР12 в интервале температур (-100÷600)°C. Эндотермические пики наблюдались во всех образцах при приблизительно (158-160)°C, экзотермические пики при (430-495)°C. По характерным точкам кривой термограммы рассчитывали удельную теплоемкость образцов, изменение энтальпии и энтропии, а также степень кристалличности по известным формулам.

Qəbul olunma tarixi: 06.01.2022

TiO_2 NANOHİSSƏCİKLƏRİ İLƏ MODİFİKASİYA OLUNMUŞ PVX ƏSASLI POLİMER NANOKOMPOZİTLƏRİN QURULUŞ DƏYİŞİKLİKLƏRİ

A.M. RƏHİMLİ
Baki Dövlət Universiteti
Az 1148, Baki, Z. Xəlilov küç.23, Azərbaycan
e-mail:rahimli.almara@gmail.com

Təqdim olunan məqalə metal oksid nanohissəcikləri ilə modifikasiya olunmuş termoplastik polimer əsaslı nanokompozitlərin alınmasına və quruluşunun tədqiqinə həsr edilmişdir. TiO_2 nanohissəcikləri ilə modifikasiya olunmuş PVX əsaslı polimer nanokompozitlərin quruluş dəyişiklikləri AQM tədqiqat üsulundan istifadə olunmaqla öyrənilmişdir. AQM ölçmələr nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, hissəciklərin faiz miqdarının yuxarı qiymətləri ilə müqayisədə kiçik qiymətlərində polimer matrisin üst molekulyar quruluşu daha nizamlıdır. Bu isə nanohissəciklərinin kiçik həcmi miqdarında birləşərək klasterlər əmələ gətirməsi ehtimalının daha aşağı olması ilə izah edilə bilər.

Açar sözlər: nanokompozit, nanohissəciklər, AQM
PACS: 42.70.Jk, 78.55.−m, 81.07.Nb

Elm və texnikanın sürətlə inkişafı materialşünaslıq elmi qarşısında əlverişli fiziki-kimyəvi xassələrə malik olan yeni növ polimerlərin sintezi tələbini qoyur. Kompleks fiziki-kimyəvi xassələrə malik yeni növ polimer materialların sintezi kifayət qədər mürəkkəb, vaxt aparan, bahalı proses hesab edilir və heç də həmişə müvəffəqiyyətli olmur. Bu problemin həllərindən biri mövcud polimerlərə yeni kompleks xassələr vermək üçün onların digər maddələrlə fiziki modifikasiyasıdır [1]. Ona görə də, təəccüblü deyil ki, son illərdə materialşünaslığın qarşısında duran ən aktual məsələlərdən biri yeni növ polimer kompozit materialların alınması və xassələrinin tətqiqidir.

Polyar termoplastik polimerlərin poliolefinlərlə müqayisədə yüksək elektret, pyezoelektrik, piroelektrik və digər aktiv xassələrə malik olduğu təcrübi olaraq müəyyən edilmişdir [1]. Polyar polimerlərdən olan polivinil xlorid (PVX) quruluşunda polimer zəncirinin polyarlığı və xlor atomlarının elektromənfiliyi hesabına daha dərin "tələlər" və polyar qruplar mövcud olur [2]. Ona görə də, matris kimi bu tip polyar polimerlərin istifadəsi kifayət qədər perspektivli hesab edilir. Həmçinin, bu materiallar onlar əsasında alınan nanokompozitlərin kompleks elektrofiziki, möhkəmlik və digər fiziki-kimyəvi xassələrinin formalaşmasına təsir edə bilir. Bununla əlaqədar olaraq ədəbiyyatda müxtəlif nanoölçülü doldurucularla modifikasiya edilmiş PVX əsaslı nanokompozitlərin sintezinə və xassələrinin tədqiqinə dair işlər geniş marağa səbəb olur [3,4].

Qeyri-üzvi doldurucuların titan-oksid (TiO_2) nanohissəcikləri qeyri-toksikliyi, ucuz başa gəlməsi və bir sıra üstün xassələrinə görə materialşünaslıqda geniş tətbiq imkanları tapmışdır. *n*-tip yarımkeçirici kimi TiO_2 üstün fotokatalitik aktivliyinə, fotostabillik və elektron xassələrinə görə fotovoltaik, fotokataliz, fotoelektronika və sensorlar kimi perspektivli sahələrdə istifadə oluna bilər [5-9]. Bununla yanaşı, TiO_2 sümük implantları və optik örtüklərin hazırlanmasında effektiv material hesab edilir. Üzvi maddələrin parçalanması prosesində nümayiş etdirdiyi aktivlik isə bu materialın hava və suyun təmizlənməsi üçün hazırlanan filtrlərdə istifadəsinə imkan yaradır.

TiO_2 nanohissəciklərinin polivinilxlorid matrisində paylanması nəticəsində xüsusi istismar xassələrinə və yüksək aktivliyə malik çoxfunksiyalı polimer kompozit materiallar sintez oluna bilər.

Verilmiş işdə PVX və TiO_2 nanohissəcikləri əsasında alınmış PVX/TiO_2 əsaslı nanokompozitlərin doldurucunun matrisdəki miqdarından asılı olaraq quruluşu və xassələri araşdırılmışdır.

PVX/TiO_2 əsaslı polimer nanokompozitlərin sintezi aşağıdakı kimi aparılmışdır: PVX tozları otaq temperaturunda, tetrahidrofuran (THF) üzvi həlledicisində həll edilmişdir. Daha sonra polimer məhluluna TiO_2 nanohissəcikləri əlavə edilmiş və maqnit qarışdırıcıda 1 saat ərzində bircins məhlul alınana qədər intensiv şəkildə qarışdırılmışdır. Alınmış polimer və nanohissəcik qarışığı Petri qabına süzülmüş və həlledicinin buxarlandırılması üçün 24 saat otaq temperaturunda saxlanılaraq nanokompozit külçələr əldə edilmişdir. Alınan külçələr PVX-nın ərimə temperaturunda və 10 MPa təzyiq altında isti presləmədən sonra soyuq suda soyudulmuşdur. Alınmış nümunələrin diametri 4sm, qalınlığı isə 100-120 mkm intervalında dəyişmişdir.

PVX/TiO_2 əsaslı nanokompozit nümunələrin səthinin relyefi, quruluş xassələrinin təsviri, hissəciklərin polimer matrisdə necə paylanması və onlar arasındakı qarşılıqlı təsirin xarakteri haqqında məlumat əldə etmək məqsədilə AQM tədqiqat üsulundan istifadə olunmuşdur.

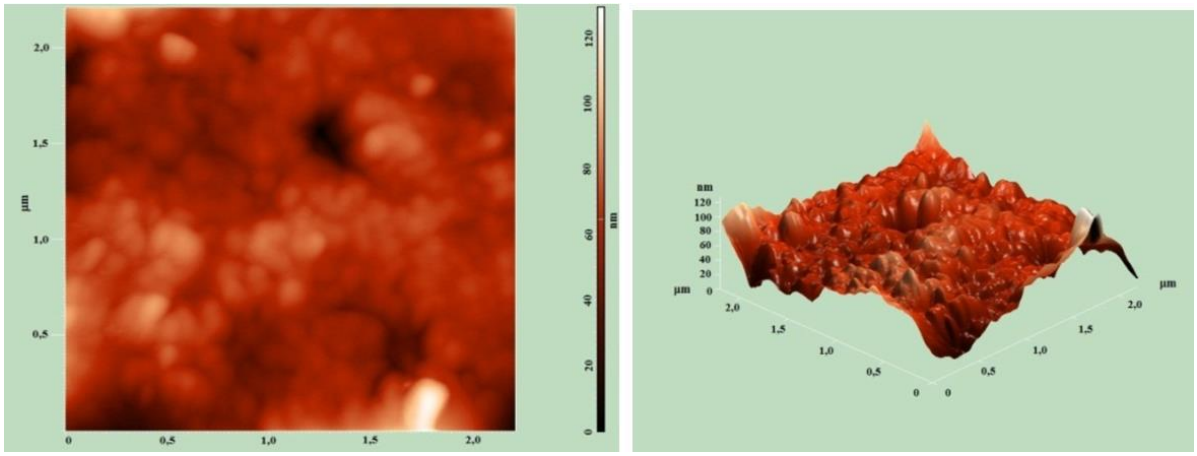
Tədqiqatlar PVX, PVX/3%TiO_2 və PVX/5%TiO_2 nümunələrində İNTEGRA PRİMA kompaniyasının (Rusiya, Zelenoqrad) cihazı vasitəsilə aparılmışdır. Ölçmələr zamanı əyrilik radiusu 10 nm-dən az olan silisium kantileverdən istifadə olunmuş, skanetmənin ölçmə oblastı 1-30 mkm arası dəyişmişdir.

Şəkil 1-də PVX/TiO_2 əsaslı nanokompozitlərin müxtəlif konsentrasiyalarına uyğun 2D və 3D AQM təsvirləri verilmişdir.

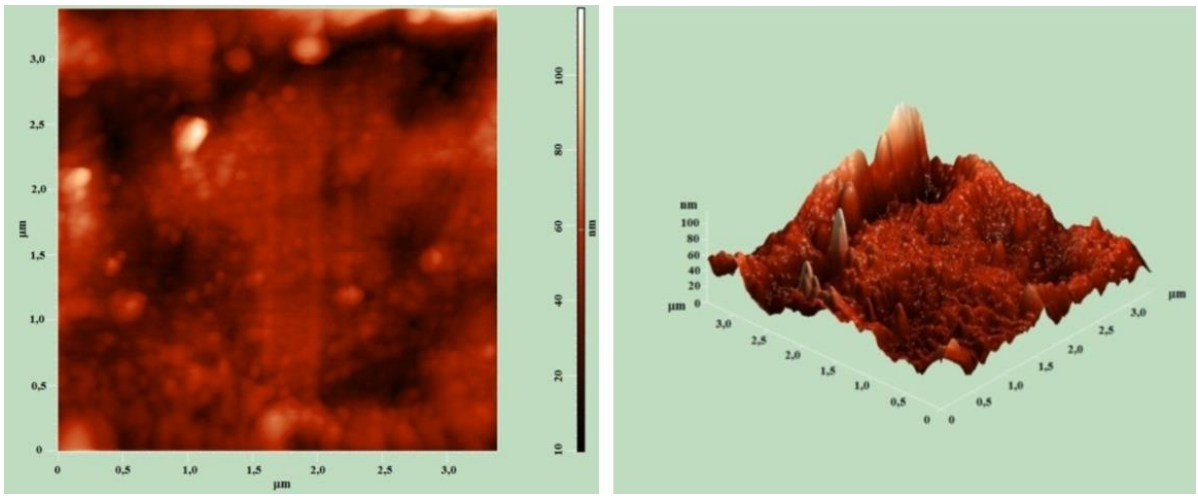
Şəkil 1 və 2-dən göründüyü kimi polimer matrisdə nanohissəciklərin miqdarının artması polimerin üst molekulyar quruluşunun dəyişməsinə səbəb olur. Belə ki, polimer matrisdə hissəciklərin həcmi miqdarının artması ilə daha nizamlı quruluşların əmələ gəlməsi müşa-

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

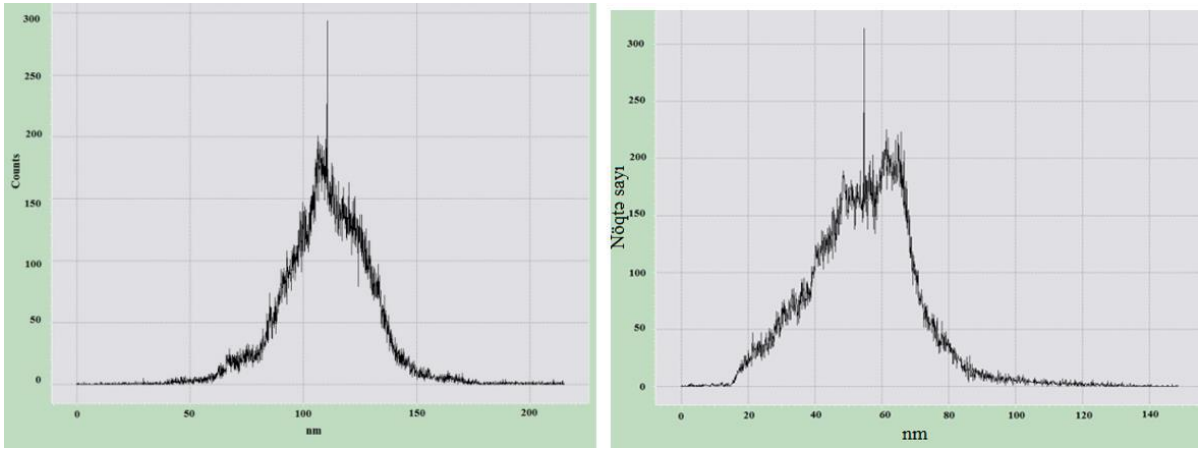
hidə olunur. Müəyyən edilmişdir ki, TiO_2 nanohissəciklərinin konsentrasiyası artdıqca səthin struktur elementlərinin və hissəciklərin ölçüləri artır. Nanohissəciklərin polimer matrisdə miqdarının artması onların birləşərək böyük ölçülü aqlomeratlar yaratmasına səbəb olmaqla yanaşı, səthin quruluş elementlərində də böyümə baş verir. Şəkil 3-də PVX/TiO_2 nanokompozitlərin səthinin kələ-kötürlüyünü əks etdirən histoqramlar verilmişdir.



Şəkil 1. PVX/3%TiO_2 əsaslı nanokompozitlərin doldurucunun faiz miqdarından asılı olaraq AQM təsvirləri: a) D və b) 3D



Şəkil 2. PVX/5%TiO_2 əsaslı nanokompozitlərin doldurucunun faiz miqdarından asılı olaraq AQM təsvirləri: a) 2D və b) 3D



Şəkil 3. PVX/TiO_2 əsaslı nanokompozitlərin doldurucunun faiz miqdarından asılı olaraq histoqramları: a) PVX/3% TiO_2, b) PVX/5% TiO_2

Kələ-kötürlük dərəcəsi nümunənin həqiqi səthinin ideal səthdən neçə dəfə fərqləndiyini xarakterizə edən kəmiyyətdir. Şəkillərdən məlum olur ki, səthin orta kvadratik kələ-kötürlülüyü PVX/3% TiO_2 üçün 40-85nm, PVX/5% TiO_2 üçün 60-110 nm təşkil edir. Buradan belə bir nəticəyə gəlmək olar ki, hissəciklərin kütlə miqdarının yuxarı qiymətləri ilə müqayisədə kiçik qiymətlərində polimer matrisin üst molekulyar quruluşu daha nizamlıdır. Belə ki, TiO_2 nanohissəciklərinin kiçik həcmi miqdarında onların birləşərək klasterlər əmələ gətirməsi ehtimalı azdır.

Təqdim olunan məqalədə TiO_2 nanohissəcikləri ilə modifikasiya olunmuş polimer nanokompozitlərlər alınmış və quruluşları tədqiq edilmişdir. PVX/TiO_2 əsaslı polimer nanokompozitlərin quruluşunun AQM üsulu ilə tədqiqi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, hissəciklərin faiz miqdarının yuxarı qiymətləri ilə müqayisədə kiçik qiymətlərində polimer matrisin üst molekulyar quruluşu daha nizamlıdır. Bu isə nanohissəciklərinin kiçik həcmi miqdarında onların birləşərək aqlomerasiya etmə ehtimalının daha aşağı olması ilə izah edilə bilər.

[1] *A. Olad, S. Behboudi and A.A. Entezami, Chin.* J. Polym. Sci., 2013, 31, 481, 17.

[2] *S.G. Mehmandoust, P. Sokhandani, M.A. Abdi, A.A. Babaluo, R. Alizadeh.* J. of Thermoplastic Composite Materials, 2016, 29, 11, 1498, 19.

[3] *M.H. Shwehdi, M.A. Morsy, A. Abugurain.* 2003, Thermal ageing tests on XLPE and PVC cable insulation materials of Saudi Arabia. In: IEEE conference on electrical insulation and dielectric phenomena, Albuquerque, NM, USA

[4] *C.P. Sugumaran.* 2013, Diagnosis on mechanical and electrical properties of cable insulation PVC with nanofiller. In: IEEE 1st international conference on condition assessment techniques in electrical systems (CATCON), Kolkata, India

[5] *A.Mills & S.Le Hunte.* 1997. J. Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, 108(1), 1-35. https://doi.org/10.1016/s1010-6030(97)00118-4

[6] *A.L. Linsebigler, G. Lu & J.T. Yates.* 1995. Chemical Reviews, 95(3), 735-758. https://doi.org/10.1021/cr00035a013

[7] *L. Zhang, M.Wan and Y. Wei.* Synth. Met., 2005, 151,

[8] *M.Anpo*. 1989. Research on Chemical Intermediates, 11(1), 67-106. https://doi.org/10.1007/bf03051818

[9] *D.O. Scanlon, C.W. Dunnill, J. Buckeridge, S.A.Shevlin, A.J. Logsdail, S.M. Woodley, A.A.Sokol*. 2013. Nature Materials,12(9), 798-801.

A.M. RAHIMLI

STRUCTURAL CHANGES OF PVC-BASED POLYMER NANOCOMPOSITES MODIFIED WITH TiO_2 NANO PARTICLES

In given study, the structure of thermoplastic polymer-based nanocomposites were modified with TiO_2 and the changes in the structure of these nanocomposites depending on the volume content of nanoparticles were investigated. Structural changes in PVC-based polymer nanocomposites modified with TiO_2 nanoparticles were investigated using the Atomic Force Microscope (AFM). As a result of AFM measurements, it was found that the supramolecular structure of the polymer matrix is more regular at lower volume content volumes of TiO_2 nanoparticles than the higher voloume content. Thus, it is estimated that for the nanocomposites with low volume content of nanoparticles, they are less likely to agglomerate.

А.М. РАГИМЛИ

СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В ПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТАХ НА ОСНОВЕ ПВХ МОДИФИЦИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦАМИ TiO_2

Данная публикация посвящена получению и исследованию структуры нанокомпозитов, созданных на основе термопластичных полимеров, модифицированных металлоксидными наночастицами. Структурные изменения в полимерных нанокомпозитах на основе ПВХ, модифицированных наночастицами TiO_2, были исследованы методом атомно-силовой микроскопии. В результате исследований было установлено, что в сравнении с высокой процентной концентрацией наноразмерных частиц полимера, при низких значениях концентрации поверхностная молекулярная структура полимерной матрицы является более упорядоченной. Следовательно, можно предположить, что при малых содержаниях наночастиц в объеме образование кластеров менее вероятно.

Qəbul olunma tarixi: 14.01.2022

ELEKTRON CİHAZLARIN ETİBARLIĞININ NƏZƏRİ TƏDQİQİ

E.Ə. KƏRİMOV, S.N. MUSAYEVA
Azərbaycan Dövlət Texniki Universiteti,
Azərbaycan, Bakı şəh., H. Cavid pros. 25, AZ-1073
E-mail: E_Kerimov.fizik@mail.ru

Müasir kosmik aparatların radioelektron və elektron avadanlıqları milyonlarla mürəkkəb qurğulara malik olduğundan belə aparatların etibarlığının tədqiq olunması mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Etibarlığa – obyektin verilmiş funksiyaları verilmiş rejimlərə və texniki xidmətə uyğun gələn verilmiş hüdudlarda yerinə yetirməsi xassəsi kimi baxılmalıdır. Etibarlığın ən əsas kəmiyyət kriteriyalarından biri kimi imtinaların intensivliyi tədqiq olunur.

Açar sözlər: etibarlıq, imtina, imtinaların intensivliyi, cihazın köhnəlməsi, istismar müddəti, istismar parametri.
UOT: 666.9-129
PACS: 73.40.Ns, 73.40.Sx, 72.10.-d

İmtina dedikdə məmulatın işgörmə qabiliyyətinin pozulması olduğundan, elektron cihazın işgörmə qabiliyyətinin müəyyən t zamanı müddətində saxlaması xassəsi imtinasız rejimdir. Elektron cihazın bu xassəsi t zaman müddətində $p(t)$ imtinasız işləmə ehtimalı ilə xarakterizə olunur. $p(t)$ imtinasız işləmə ehtimalı aşağıdakı kimi hesablana bilər [1]:

$$p(t) = \frac{n(t)}{N},$$

burada, $n(t)$ – istənilən müşahidə anında düzgün işləyən cihazların sayı; N – tədqiq olunan cihazların başlanğıc ümumi sayı; $n(t)/N$ – isə istənilən t zaman müddətində ayrılıqda götürülmüş bir cihazın imtinasız işləmə ehtimalını təyin edir.

İmtinaların $\lambda(t)$ intensivliyi cihazların sıradan çıxması intensivliyini xarakterizə edir və aşağıdakı kimi təyin olunur:

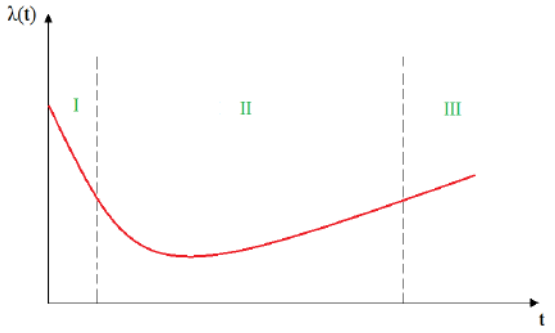
$$\lambda(t) = \frac{\Delta n}{(N-d)\Delta t},$$

burada, n – cihazların kiçik Δt zaman müddətində imtinalarının sayı; N – tədqiq olunan cihazların ümumi sayı; d – isə Δt intervalının başlamasına kimi imtina edən cihazların sayıdır.

İmtinasız işləmə ehtimalı ilə imtinaların intensivliyi arasında belə bir əlaqə vardır [2,3]:

$$p(t) = exp\left[-\int_0^t \lambda(t)dt\right].$$

Elektron cihazlar üçün imtinaların $\lambda(t)$ intensivliyi üç xarakterik zaman intervalına malikdir (şəkil 1). Başlanğıc zaman intervalı (I oblast) ilkin imtinalara (cihazların işə başlama periodu) uyğun gəlir – bu imtinalara səbəb çox güman ki, tez bir zamanda üzə çıxan gizli istehsal defektləridir. İkinci zaman sahəsi (II oblast) $\lambda(t)$-nin qiymətinin zamana görə çox az dəyişən və ilkin imtinalar periodu ilə müqayisədə kifayət qədər az olan normal istismar periodu uyğun gəlir. Şəkil 1-dən göründüyü kimi üçüncü zaman sahəsində (III oblast) imtinaların intensivliyi cihazların köhnəlməsi səbəbindən yenidən artır. Bu sahədə cihazların parametrlərinin dəyişilməsi səbəbindən imtinalar üstünlük təşkil edir.



Şəkil 1. İmtinaların intensivliyinin zamandan asılılığı.

Bir imtinaya qədər t_{or} orta müddət imtinaların $\lambda(t)$ intensivliyi ilə aşağıdakı kimi asılıdır:

$$t_{or} = \frac{1}{\lambda(t)}.$$

$\lambda(t) = 5\cdot10^{-6}$ saat^{-1} və $t = 5000$ saat olduqda $\lambda(t)\cdot t = 2{,}5\cdot10^{-2}$ və deməli, $p(t) = p(5000) = 0{,}975$; $t_{or} = 2\cdot10^5$ saat yəni, baxılan misalda imtinaya qədər orta zaman müddəti 20000 saat təşkil edəcəkdir.

Etibarlığın göstəriciləri cihazların çox mühüm istismar parametri olan elektron cihazların onların istismar zamanı zəmanətli işgörmə vəziyyətinin müddətini qərarlaşdıran uzunömürlüyü təyin edir [4]. Elektron cihazların parametrlərinin dəyişməsi xarakterinə uyğun olaraq imtinalar iki böyük qrupa ayrılır:

1) cihazın parametrlərinin impulslu (sıçrayışlı) dəyişməsi ilə xarakterizə olunan katastrofik (qəfildən) imtinalar;

2) parametrlərin hamar şəkildə dəyişilməsi nəticəsində yaranan şərti imtinalar.

Birinci növ imtinalar əksər hallarda cihazların işgörmə qabiliyyətinin tamamilə itirilməsinə gətirir. İkinci halda isə cihaz işgörmə qabiliyyətini tam, yaxud qis-

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

mən saxlaya bilər, lakin onun parametrləri zaman keçdikcə başlanğıc və ya kompleks qiymətlərdən nəzərəçarpacaq dərəcədə fərqlənəcəkdir.

Katastrofik imtinalar bir qayda olaraq, konstruksiyanın və ya texnologiyanın çatışmazlıqları və həmçinin istismar şəraitləri ilə şərtlənir.

Katastrofik imtinalara gətirən konstruktiv çatışmazlıqlar cihazların elementlərində yer alan materialların istilik genişlənmə əmsallarının müxtəlifliyi ilə aşkara çıxır ki, nəticədə müxtəlif növ kontaktların mexaniki pozulmasına, yarımkeçirici kristalların çatlamasına gətirir. Bu hadisə daha çox güclü cihazlarda yer alır. Belə növ defektlərə yol verməmək üçün konstruksiyanın ayrı-ayrı elementləri arasında termokompensə aralıqları tətbiq olunur.

Yüksək tezlikli cihazlarda elektrodların ölçüsü əksər hallarda 10mkm təşkil edir. Söylənilənlər xüsusən yarımkeçirici cihazlara aid edilir. Belə cihazların çıxışları uzunluğuna görə tamamilə bircins yaradılması mümkün olmayan nazik (8 mkm) keçiricilərdən hazırlanır. Kontaktların sıradan çıxması həm də daxili uzun çıxışların istifadə olunması zamanı nəzərəçarpacaq dərəcədə temperatur fərqlərinin yaranması və kontaktların lehimləmə proseslərinin texnoloji pozulması ilə baş verə bilir. Çıxışların qırılması və yanmasından əlavə elektron cihazlarda keçid və ya oksid təbəqələrin deşilməsi, qısa qapanmalar mümkündür. Deşilmələr bütün növ elektron cihazlarda yer alır. Onlar müxtəlif elektrodlar arasında qısa qapanmalara gətirir. Deşilmələrin səbəbi texnologiyaların pozulması və qeyri-mükəmməlliyi, cihazların işləmə rejimlərinin gözlənilməməsi ilə əlaqədar olan qeyri-düzgün istismarla şərtlənir. Planar tranzistorlarda texnologiyaların qeyri-mükəmməlliyinə misal, oksid təbəqəsində deşilmələrin yaranmasının səbəbi olan mikroskopik dəliklərin mövcudluğudur. Fotorezistorun səthində tozcuqların olması aşındırma prosesindən sonra onların yerində dəliklərin yaranmasına səbəb olur [5].

Qeyri-düzgün istismar zamanı katastrofik imtinaların əsas səbəbləri sxemdə (qurğuda) cihazların işinin təkcə məxsusi etibarlığı ilə deyil, həm də istismar şəraitlərindən asılı olaraq nəzərdən keçirmək vacib şərtdir. Yarımkeçirici cihazların bütün imtinalarının 70%-dən çoxu qeyri-düzgün istismar ilə şərtlənir. Qeyri-düzgün istismar olunmanın ən çox rast gəlinən misalı cihazların maksimal yol verilən rejimlərdən yuxarı və ya bu rejimə yaxın rejimlərdə istifadə olunmasıdır.

Yarımkeçirici cihazların etibarlığını təyin edən ən mühüm parametrlərindən biri keçidin cihazda səpilən güclə, ətraf mühitin temperaturu və keçidlə ətraf mühitin istilik mübadiləsi şəraiti ilə təyin olunan maksimal yol verilən temperaturudur.

Cihaz tərəfindən səpilən gücün artması cihazın elementlərinin qızmasına gətirir. Temperaturun artması aşqarlı yarımkeçiricidə məxsusi elektrikkeçiriciliyinin payının böyüməsinə səbəb olur. Nəticədə hər hansı bir temperaturda elektron-deşik keçidi ümumiyyətlə mövcud olmayacaqdır. Maksimal yol verilən temperatur qismində cihazın əsas xassələrinin saxlandığı daha aşağı temperatur qəbul olunur. Keçidin temperaturu material (germanium, silisium, qallium arsenid və s.) və yarımkeçiricinin aşqarlanma dərəcəsi ilə təyin olunur. Yüksək aşqarlıq dərəcəsinə malik yarımkeçiricilər (məsələn, tunel diodları) keçidin daha böyük $T_{max.k}$ maksimal yol verilən temperaturuna, zəif aşqarlı materiallar (məsələn, yüksək voltlu diod) əsasında cihazlar isə ən kiçik $T_{min.k}$ temperatura malik olur. Praktikada etibarlığın artırılması üçün ətraf mühitin temperaturu 30...40°C məhdudlanır, işçi güc isə p_{max} qiymətinin yarısından aşağı qərarlaşdırılır.

Cihazların elektrodları arasında maksimal yol verilən gərginlik keçidin deşilmə gərginliyindən nəzərəçarpacaq dərəcədə aşağı səviyyədə qərarlaşdırılır:

- kollektor keçiddə yük daşıyıcıların çoxalmasının cərəyanın ötürülməsi əmsalına təsirinin olmaması tələbi səbəbindən;

- yarımkeçirici materialın texnoloji defektləri (qeyri-bircinslik, kənar qoşulmalar və s.) və bir sıra digər səbəblərdən.

Cərəyanların maksimal yol verilən qiymətləri materialın qeyri-bircinsliyi nəzərə alınmaqla keçidin qızması şəraitlərindən təyin olunur. Katastrofik imtinalar ümumi imtinaların sayının 15...20%-ni təşkil edir.

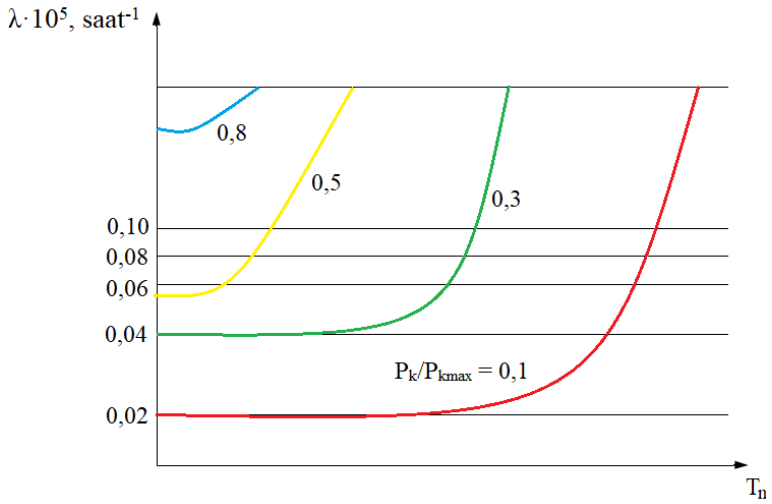
Əksər imtinalar cihazların parametrlərinin hamar dəyişilmələrinin çox yüksək yol verilən kənara çıxmaları ilə şərtlənir. Şərti imtinalar əksər hallarda yarımkeçirici cihazlarda səthdə və həcmdə baş verən fiziki və kimyəvi proseslərlə yaranır. Parametrlərin yol verilməyən dəyişilməsinə gətirən həcmi proseslər yarımkeçirici cihazlarda zəif rol oynayır. Yarımkeçirici cihazların parametrlərinin hamar dəyişilməsi əsasən səthdə baş verən hadisələrlə əlaqəlidir. Səth hallarının dəyişilməsi əks cərəyanların, ötürmə əmsallarının və deşilmə gərginliklərinin nəzərəçarpacaq dərəcədə dəyişilməsinə gətirir.

Yarımkeçiricilərin elektrofiziki xassələrinin qeyri-stabilliyini təyin edən ən mühüm faktorlardan biri rütubətin mövcudluğudur. Yarımkeçiricinin səthinə rütubətin düşməsinin qarşısını almaq üçün cihazların korpusu kifayət qədər germetikləşdirilir və bundan əlavə korpusun daxilinə rütubətudan (sorbent) – silikagel və ya alümogel daxil edilir. Səthin xassələrinin qeyri-stabilliyinin digər səbəbi qələvi metalların (natrium, kalsium, kalium) ionlarının oksid təbəqədə hərəkəti ilə bağlıdır. Belə ionların səthi sıxlığı 10^{14} ion/sm^2 qiymətini ala bilir. Bu ionlar silisium iki oksidin təbəqəsində keçidin xassələrinə və cihazın parametrlərinə xüsusən də artırılmış temperaturlarda təsir edən mütəhərrik həcmi yüklər yaradır.

Beləliklə, iş şəraitinin təsiri özünü həm katastrofik, həm də şərti imtinaların intensivliyində göstərir. Tranzistorlar üçün belə təsiri normallaşmış T_n temperaturun və səpilən P_k gücünün λ kəmiyyətinə təsirini şəkil 2-də verilmiş asılılıqlar əsasında göstərmək olar ($P_{k.max}$ kollektorda maksimalm yol verilən gücdür). Normallaşdırılmış temperatur aşağıdakı kimi təyin olnur:

$$T_n = \frac{T_{işçi} - T_{düşmə}}{T_{max} - T_{düşmə}},$$

burada, $T_{işçi}$ – işçi temperatur; T_{max} – maksimal yol verilən temperatur; $T_{düşmə}$ – elektrik rejiminin düşməsinin başlanması temperaturudur.



Şəkil 2. λ kəmiyyətinin T_n-dən asılılığı.

Beləliklə, cihazların uzun müddətli və imtinasız (etibarlı) işləmələri zamanı istismar rejimlərini maksimal yol verilən rejimlərdən aşağı götürmək məqsədəuyğun sayılır. Cihazların etibarlığını təyin etmək üçün mexaniki, iqlim sınaqları və uzun ömürlüyə görə sınaqlar aparılır.

NƏTİCƏ

Son olaraq elektron cihazların imtinalarının intensivliyinin konkret qiymətlərini vermək olar. İmtinaya qədər zaman periodu (şəkil 1, *λ(t)* asılılığının I oblastı) müxtəlif elektron cihazlar üçün 1-100 saata qədər diapazonda dəyişir. İmtinaların intensivliyinin köhnəlmə perioduna uyğun gələn nəzərəçarpacaq artım (şəkil 1, *λ(t)* asılılığının III oblastı) yarımkeçirici cihazlar üçün müşahidə olunmur və bu şərt də belə cihazların uzun ömürlüyünü təyin edir. İmtinaların nominal rejimdə normal istismar perioduna uyğun gələn *λ(t)* intensivliyi (şəkil 1, *λ(t)* asılılığının II oblastı) diod və tranzistorlar üçün 10^{-7}...10^{-3} diapazonunda yerləşir.

[1] *Г.Г. Шишкин*. Приборы квантовой электроники. - М.: Сайнс-Пресс, 2004.
[2] *А.А. Щука* /под ред. А.С. Сигова. Электроника, 2005.
[3] *В.П.Драгунов, И.Т.Неизвестный, В.А.Гридчин*. Основы наноэлектроники. - м" 2006.
[4] *И.П. Степаненко*. Основы микроэлектроники. - М.; СПб.: Лаб. баз. знаний «Невский Диалект», физматлит, 2001.
[5] *А.Н. Пихтин*. Оптическая и квантовая электроника. - М.: Высшая школа, 2001.

E.A. Kerimov, S.N. Musaeva

THEORETICAL INVESTIGATION OF THE RELIABILITY OF ELECTRONIC DEVICES

Radio-electronic and electronic equipment of modern spacecraft includes up to tens of millions of complex devices, so the problem of improving reliability is extremely important. Reliability is a property of an object to perform specified functions, preserving in time the values of the set indicators within the specified limits, corresponding to the specified modes and conditions of use and maintenance. Failure rate is investigated as one of the main quantitative reliability criteria.

Э.А. Керимов, С.Н. Мусаева

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАДЕЖНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ

Радиоэлектронное и электронное оборудование современных космических аппаратов включает в себя до десятка миллионов сложных устройств, поэтому проблема повышения надежности имеет крайне важное значение. Надежность – это свойство объекта выполнять заданные функции, сохраняя во времени значения установленных показателей в заданных пределах, соответствующих заданным режимам и условиям использования, технического обслуживания. В качестве одного из основных количественных критериев надежности исследуется интенсивность отказов.

Qəbul olunma tarixi: 19.01.2022

SÜRƏTLİ AĞIR İON, NEYTRON, ELEKTRON VƏ QAMMA ŞÜALANMANIN TƏSİRİ NƏTİCƏSİNDƏ BORLU BİNAR BİRLƏŞMƏLƏRDƏ DEFEKT ƏMƏLƏGƏLMƏ MEXANİZMİ VƏ TERMOFİZİKİ EFFEKTLƏR

O.A. SƏMƏDOV, M.N. MİRZƏYEV
Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası, Radiasiya Problemləri İnstitutu
Azərbaycan, Bakı, AZ-1143, B. Vahabzadə küç., 9.

Təqdim olunan işdə T=300-1200 K temperatur intervalında borlu binar birləşmələrdə müxtəlif növ şüalanmaların təsirləri altında əmələ gələn defektlərin rekombinasiya mexanzmi və temperaturdan asılı olaraq istilik seli funksiyasının kinetikası müəyyən edilmişdir. Yüksək temperaturlarda B_4C və B_6Si birləşmələrinin səthində oksid təbəqəsinin formalaşması və sürətli ağır ion selinin təsiri altında borlu birləşmələrdə səth morfologiyasında yaranan degradasiya tədqiq olunmuşdur.

Açar sözlər: sürətli ağır ion, neytron və elektron seli, qamma şüalanma, defekt əmələgəlmə, DSC.
PACS: 544.223

1. GİRİŞ

Radiasiya effektlərinin və defektlərinin müxtəlif analitik metodlarla araşdırılması, fərqli növ hissəciklərlə daşınan kinetik enerjinin kristal struktura ötürülməsi, enerjinin strukturunda paylanma kinetikasının öyrənilməsi radiasiya materialşünaslığının təməl prinsiplərindən hesab olunmaqdadır. Müasir dövrün nüvə texnologiyalarında, detektorların hazırlanmasında, optik qurğularda borun binar və keramik birləşmələrlə əmələ gətirdiyi yüksək entropiyaya malik nümunələri geniş tətbiq olunmaqdadır [1-2]. Təbiətdə və müasir sintez metodları ilə bor elementinin oksid, metal və qeyri-metal kimi çoxlu sayda birləşmələrini (B_2O-bor monoksid; B_2O_3-bor trioksid; B_6O-bor subksid; B_xC-bor karbid; B_xSi-bor silikat; BF-bor monoflorid; BN-bor nitrid; B_2S_3-bor sulfid; BBr_3-bor triboromid; BCl_3-bor trixlorid; BF_3-bor triflorid; ZrB_2-sirkonium diborid; BCN-nano borusu; BPO_4-bor fosfat) sadalamaq mümkündür [3]. Borlu ikili, üçlü və çoxsaylı laylı birləşmələri, həmçinin çoxtərkibli keramik qarışıqları B_4C-VC; B_4C-TiC; B_4C-Cr_3C_2; B_4C-WC-Co; B_4C-Al_2O_3; BN-C; BN-CuNi; BN-Fe_2B; BN-W; B_6Si-SiC; B_6Si-ZrB_2 qeyd etmək mümkündür [4]. Müxtəlif tədqiqatlar nəticəsində impuls rejimində çalışan NMRS (Nüvə Maqnit Rezonans Spektroskopiya) və "maqnit-bucaq" spin texnikasından istifadə etməklə bir sıra borlu kristallarda borun izotop qarışıqlarının konsentrasiyasının və borat minerallarında ^{10}B və ^{11}B izotopunun spektrlərinin təyin olunması növbəti tədqiqatlar üçün yeni üfüqlər açmışdır. Bor elementi kristal, yaxud amorf quruluşlarda adətən iki izotopun (^{10}B və ^{11}B) cəmi şəklində mövcuddur [5]. Kristofer və başqaları tərəfindən sintez olunmuş super möhkəm WB_4 birləşməsində bor izotoplarının (^{10}B və ^{11}B) paylanma qanunauyğunluğunu öyrənmək məqsədilə nüvə maqnit rezonans spektroskopiyası (NMRS) metodundan istifadə edilmişdir. WB_4 kristalında ^{11}B spektrinin tam maqnit həssaslığı (680 kHz intervalda), maqnit qütblərinin dördbucaqlı tezlikləri, ikinci dərəcəli dördbucaqlı xətt formaları və ^{10}B izotopunun spektrləri (142kHz intervalında) aşkar olunmuşdur [5]. BO_3 və BO_4 oksid birləşmələrində izotop nisbətinin dəqiq vahidlərini ayırmaq üçün, kristal və şüşələşmiş bor birləşmələrində ^{11}B və ^{10}B izotopunun spektrləri NMRS metodu ilə geniş xəttli fasiləsiz dalğa üsulu metodundan istifadə etməklə öyrənilmişdir [5]. Tətbiq sahəsinə görə "sirli materiallar" adlanan borlu birləşmələr ionlaşdırıcı şüaların qeyd edilməsində yüksək effektli detektor xassələrinə malikdir. Nüvə reaktorlarında geniş tətbiqi və hərbi sənayedə müxtəlif qoruyucu avadanlıqların hazırlanmasına qədər geniş bir tətbiq sahəsi mövcuddur. Son onillikdə yüksək analitik dəqiqliyə malik termofiziki qurğuların əsas tərkib hissələrini təşkil edən elementlər bor əsaslı birləşmələrin polimer qarışıqlarla əmələ gətirdiyi kompozitlər əsasında hazırlanmaqdadır. B_4C birləşməsi nüvə reaktorlarında neytron uducuların hazırlanmasında, optik qurğularda, müxtəlif enerjili neytronlar üçün detektorların hazırlanmasında geniş istifadə olunur [6]. Tədqiqat işində geniş araşdırılmış borlu nümunələrin dayanıqlı kimyəvi, fiziki və mexaniki xüsusiyyətləri onun müasir nüvə texnologiyalarında tətbiqinə geniş imkanlar yaradır. Termofiziki xassələrin kinetikasına görə borlu nümunələr yüksək temperaturlarda dayanıqlı materiallardan (əримə temperaturu 2350°C, buxarlanma temperaturu 3500°C) hesab edilir [7]. Unikal kristallik quruluşa malik olan nüvə reaktorlarında "yanacaq materiallarının kinetikasını idarə edən çubuqlar" kimi geniş istifadə olunur. (*h*-BN) və (*h*-B_6Si) tədqiqat obyektləri detektor xüsusiyyətlərinə görə neytron və qamma şüalarının qeyd olunmasında yüksək izotermik oksidləşmə temperaturuna malik olması bu birləşmələrə böyük maraq doğurmuşdur. Bor nitrid birləşməsinin SiC, ZrB, AlN keramik birləşmələrlə əmələ gətirdiyi kompozit birləşmələrin termofiziki qiymətlərinin (istilik tutumu, istilik keçiriciliyi, termodiffuziya əmsalı) yüksək olması onun tətbiq sahəsini daha da genişləndirir [8-9]. Məsaməli quruluş strukturunu formalaşdıran bor nitridin bor karbidlə əmələ gətirdiyi kompozit materialların oksidləşmə müqaviməti bor karbiddən on dəfə çoxdur. Qamma kvantlarla şüalanmış heksaqonal bor nitrid strukturunda kubik BN faza izlərinin yaranması baş verir. Kristal quruluşun hibridləşmə formasını dəyişməsi yüksək temperaturlarda mürəkkəb termodinamik mexanizmin olmasını göstərir [10]. Tədqiqat işində borlu birləşmələrdə, şüalanma faktorundan asılı olaraq, nümunələrin kristal quruluşunda formalaşan vakansiyaları, sərbəst bor və silisium atomlarının yerdəyişməsinin aktivləşmə enerjisi və mürəkkəb termodinamik qanunauyğunluqları öyrənilmişdir.

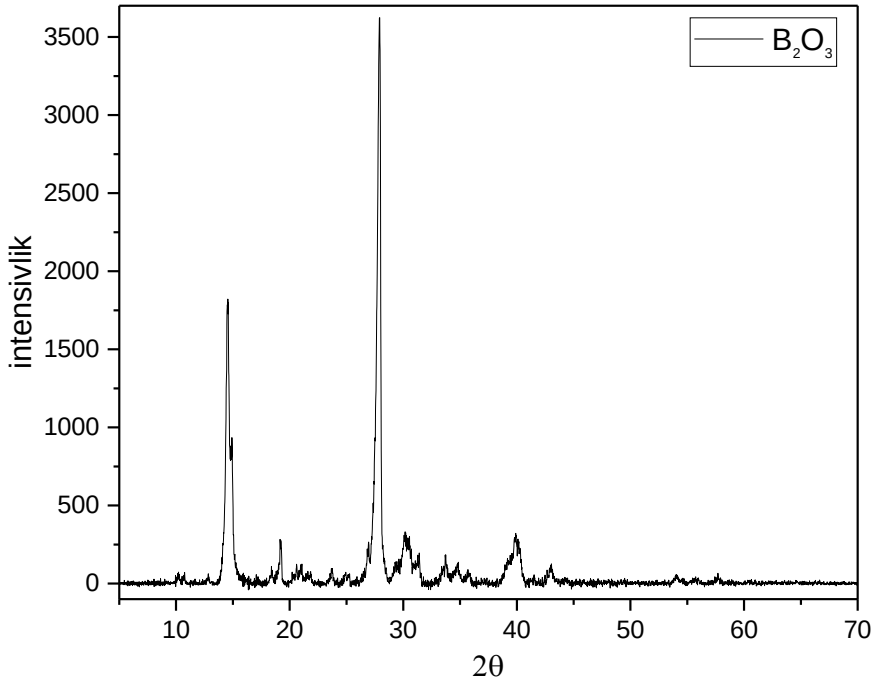
131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com

2. TƏCRÜBƏLƏR

Ekperimental təcrübələrdə təmizlik dərəcəsi 99.9%, xüsusi səth sahəsi 28 m^2/q, hissəciklərin ölçüsü 1-3 μm, toz halında sıxlığı 1.8 q/sm^3 olan romboedrik fəza quruluşlu B_4C, 99.8%, xüsusi səth sahəsi 76-120m^2/q, hissəciklərin ölçüsü 3-8 μm, toz halında sıxlığı 2.29 q/sm^3 olan heksaqonal fəza quruluşlu BN, 99.5%, xüsusi səth sahəsi 68 m^2/q, hissəciklərin ölçüsü 40 μm, toz halında sıxlığı 2.43 q/sm^3 olan heksaqonal fəza quruluşlu B_6Si və 99.99%, xüsusi səth sahəsi 32m^2/q, hissəciklərin ölçüsü 80 nm, toz halında sıxlığı 2.6 q/sm^3 olan tetraqonal fəza quruluşlu B_2O_3 nano birləşməsindən istifadə edilmişdir. Tədqiqat nümunələri, enerjisi E<1 MeV olan sürətli neytronlarla nümunələrin otaq temperaturunda 4.0×10^{12} n/(sm²×san), 8.0×10^{12}n/(sm²×san), 1.37×10^{13} n/(sm²×san), 4.0×10^{14} n/(sm²×san) və 1.0×10^{15} n/(sm²×san) intensivliklərdə [10-13], 2.5 MeV enerjili xətti elektron sürətləndiricidə 4.16×1016 $1/sm^2$, 1.20×1017 $1/sm^2$ və 1.03×1018 $1/sm^2$ intensivliklərdə [14-16] və 167MeV/u enerjili ^{132}Xe ionları ilə 5.0×10^{12} ion/sm^2, 5.0×10^{13} ion/sm^2 və 3.83×10^{14} ion/sm^2 intensivlikdə [17-19] otaq temperaturunda şüalandırılmışdır. Həmçinin, tədqiqat nümunələrinin 1.17 MeV və 1.33 MeV enerji xəttinə malik ^{60}Co mənbəyi ilə 9.7 kQr, 48.5 kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr udulma dozalarında şüalanması yerinə yetirilmişdir [20-29]. Termofiziki xassələr "Perkin Elmer" STA 6000 [17-15], DSC3 STAR^e Systems METTLER TOLEDO [10-12] və NETSCHE DSC 204 F1 Phoenix [10-16] cihazında öyrənilmişdir. "Perkin Elmer" STA 6000 cihazında işçi oblast 25-1000°C, termik işləmə sürəti 5°C/min, PolyScience analizatoru və "digital temperature controller" soyuducu sistemindən ibarətdir. "Pyris Manger" proqram təminatından istifadə olunaraq kinetik parametrlərin təyini, dəyişməsi və temperaturdan asılı olaraq artması və azalması hesablanmışdır. Yanma məhsullarının sistemdən xaric edilməsi və kondensasiya prosesinin qarşısının alınması məqsədi ilə təsirsiz arqon (Ar) qazından istifadə edilmiş və sistemə verilmə sürəti 20 ml/dəq götürülmüşdür.

3. MÜZAKİRƏLƏR

B_2O_3 nano kristalının difraksiya spektri şəkil 1-də verilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, difraksiya spektri Cmc2 fəza qrupuna, a=0.4613nm, b=0.7803nm və c=0.4129nm qəfəs parametrlərinə malik β-B_2O_3 modifikasiyaya uyğundur. Spektrdə B(OH) xarakterizə edən fazaların olması aktiv nano səth tərəfindən atmosferdən su molekullarının absorbsiya olunduğunu göstərir.



Şəkil 1. B_2O_3 nano kristalının difraksiya spektri.

Şəkil 2-də 450≤T≤580 K temperatur intervalında B_2O_3 nano kristalının səthində, neytron selinin intensivliyindən asılı olaraq, müxtəlif növ qarşılqlı təsirdə olan fərqli OH qrupların mürəkkəb mexanizmlə baş verən parçalanma reaksiyalarının DSC spektrləri verilmişdir.

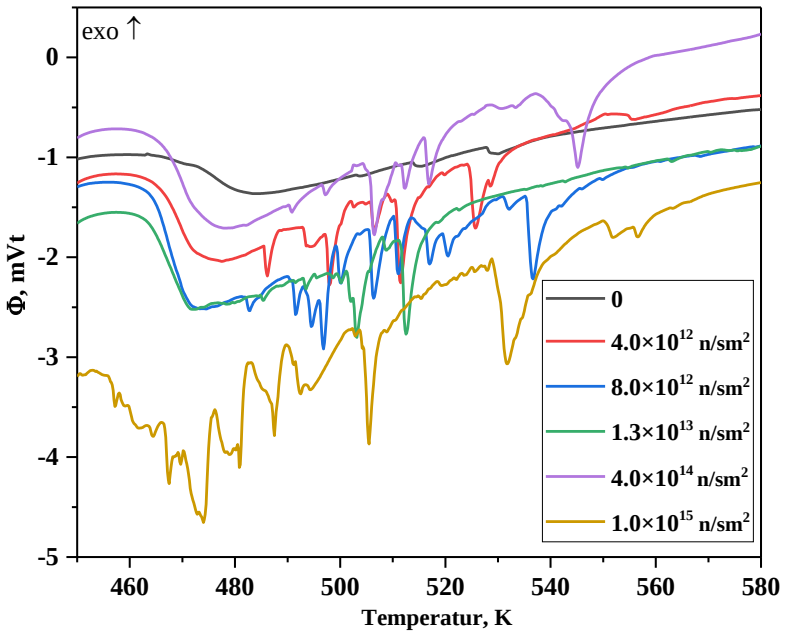
Qrafikdən aydın görünür ki, yüksək udulma dozalarında parçalanma mərkəzlərinin sayı artır və 450≤T≤580 K temperatur intervalında yüksək kimyəvi aktivliyə malik nano bor oksid birləşməsində B_2O_3→H_3BO_3 mexanizmi üzrə ardıcıl çevrilmə reaksiyaları baş verir [20-23].

$$2H_3BO_3 \rightarrow 2HBO_2 + 2H_2O\uparrow \quad (1)$$

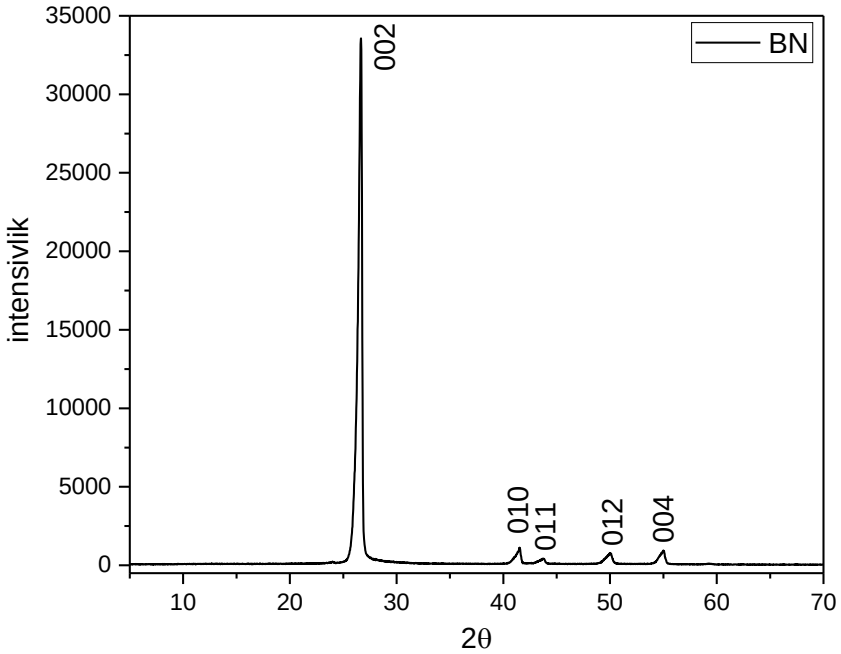
$$2HBO_2 \rightarrow B_2O_3 + H_2O\uparrow \quad (2)$$

Neytron intensivliyinin artması ilə yeni endo-mərkəzlər formalaşır. Neytron şüalanma hesabına formalaşmış hər bir yeni endo-mərkəz temperaturun təsiri altında hidrat və hidrooksid qrupunun parçalanma fazasını eksperimental olaraq xarakterizə edir. Şüalanmamış nümunədə mərkəzi piki 503, 515, və 530 K temperatura uyğun gələn endo-effektlər şüalanmadan sonra daha da

artır. Şüalanma dozasından asılı olaraq endo-effektlərin temperaturun kiçik 457 K və böyük 556 K qiymətlərinə doğru dəyişməsi yuxarıda söylənilən fikirləri təsdiq edir. Şüalanma məhsulu kimi yaranmış H^+ atomları müəyyən miqdarda həcmdə neytron selinin təsiri ilə formalaşmış aktiv mərkəzlər tərəfindən tutulur. Digər tərəfdən, radikal şəklində H^+ atomları birləşərək molekulyar hidrogen formasına keçir və parçalanma məhsulu kimi ayrılır. Altıbucaqlı bor nitrid (*h*-BN) mikro kristalının difraksiya spektri şəkil 3-də göstərilmişdir.



Şəkil 2. 450≤*T*≤580 K temperatur intervalında şüalanmamış və müxtəlif intensivlikli neytron seli ilə şüalandırılmış B_2O_3 nümunəsində istilik selinin effektləri.



Şəkil 3. BN nano kristalının difraksiya spektri.

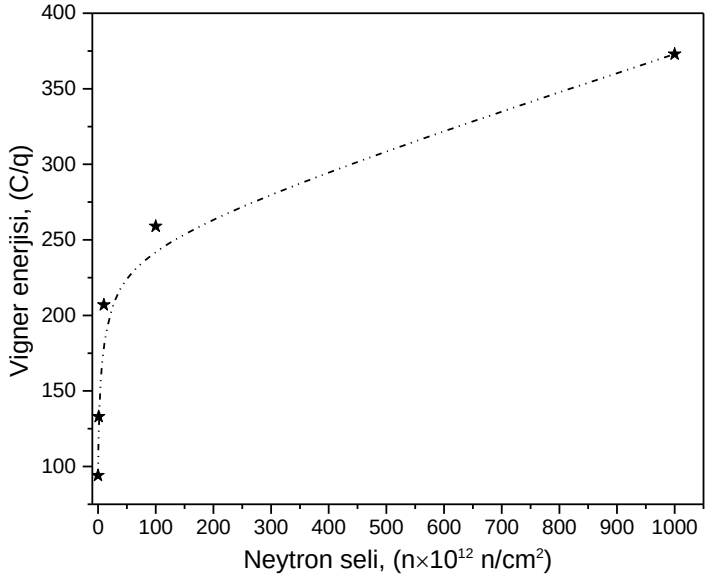
Analiz nəticələri göstərir ki, bor nitrid hissəciklərinin quruluş və səth modifikasiyasında dəyişiklik mövcud deyil. Bor nitrid üçün mövcud müstəvi difraksiyasına aid edilir, bu piklər borun altıbucaqlı fazasının (002), (100), (101), (102), (004) və (110) müstəvilərinə aiddir [24-28]. BN kristal ölçülərinin (Şerrer düsturundan istifadə etməklə) müvafiq olaraq 2.5092nm və 6.6762nm, fəza qrupunun P-6, a=2.5092 Å; c=6.6762Å; α=90˚; γ=120˚ olduğu müəyyən edilmişdir.

Bor nitrid nümunəsi üçün istilik axınının sürəti 400≤*T*≤1300 K temperatur intervalında sabitdir [29]. Bununla birlikdə, sərbəst buraxılan Vigner enerjisinin kinetikası bir bölgəni əhatə edir və 770≤*T*≤1220 K temperatur intervalında "Vigner enerji" təyin olunur. Cədvəl 1-də heksagonal bor nitrid hesablanmış Vigner enerjisi qiyməti bir sıra tədqiqat nəticələri ilə bir araya gətirilmişdir.

Cədvəl 1.

Altıbucaqlı bor nitrid nümunəsində müxtəlif ədəbiyyat nəticələrindən alınan Vigner enerjisinin qiyməti.

Nümunə	Məkəzi pik, K	Baza qiyməti	Vigner enerjisi, C/q	Vigner enerjisi, kC/mol	Vigner enerjisi, eV/atom	Ədəbiyyat
h-BN	623	300-1173 K	93.89	233.22	56	[30]
	598	525-584 K	95.8	245.89	58.9	[30]
	1002.9	770-1220 K	94.49	239.76	57.89	Tədqiqat işi

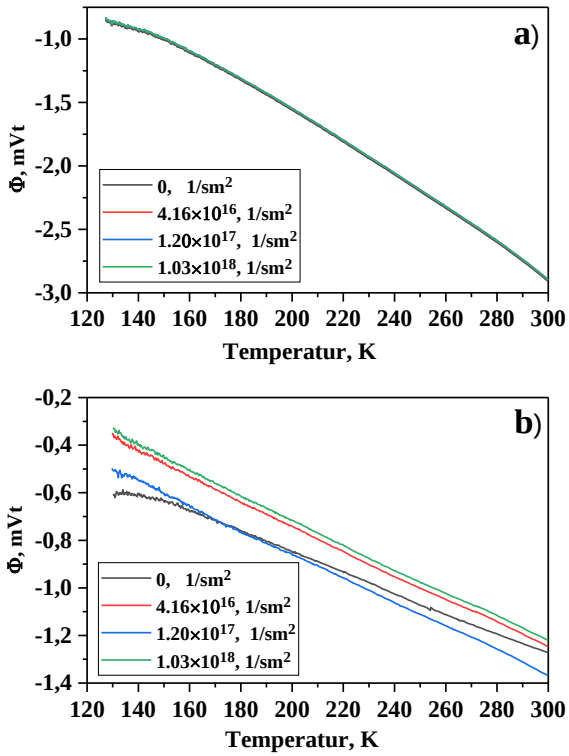


Şəkil 4. h-BN nümunəsi üçün neytron axını əsasında saxlanılan enerji qrafikinin dəyişməsi.

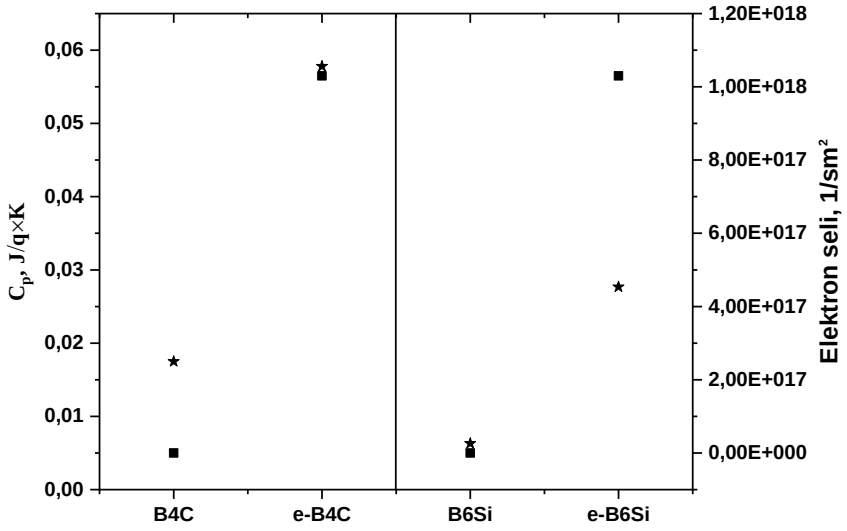
DSC analizlərinin nəticələri (oksidləşmə reaksiyasından əlavə) göstərir ki, bor nitridin kristal stukturda sintez şəraitindən və yaxud digər təsirlərdən həcmdə və yaxud Ar və vakuum səthində xarakterik defektlər formalaşır. Defektlərin formalaşma mexanizmindən və onların miqrasiyasından asılı olaraq Vigner effektləri fərqli temperatur intervalında baş verir. Vigner effektinin fərqli mexanizmlərlə dəyişməsi eksperimental şəraitdən, istilik sürətlərində N_2, O_2, Ar və vakuum mühitində yerinə yetirilən təcrübi şərtlərdən asılıdır. Vakuum mühitində yerinə yetirilən bütün eksperimental tədqiqatlarda Vigner enerjisinin qiyməti minimum olur [31-34]. İstilik selinin qiyməti maksimum 5 mVt qədər artır. Müəyyən olunmuşdur ki, $770 \leq T \leq 1220$ K temperatur intervalında mərkəzi piki 1002 K olan şüalanmamış nümunədə Vigner enerjisi maksimum qiymətinə malik olur və uyğunluq təşkil edir [30]. Şəkil 4-də müxtəlif neytron şüalanmalarda BN birləşməsində toplanan enerjinin asılılığı verilmişdir. Göründüyü kimi, eksperimental olaraq şüalanmanın dozasının artması ilə kristal quruluşda toplanan enerji artır. Neytron selinin bor və azot nüvələrindən elastik səpilməsi və radiasion tutulması nəticəsində kristal quruluşda müxtəlif növ defekt mərkəzləri formalaşır. Neytron selinin B^{10} radioizotopu ilə qarşılıqlı təsir prosesində çoxlu sayda enerji xətləri *h*-BN quruluşunda böyük miqdarda defekt mərkəzləri formalaşdırır.

Neytron selinin ^{14}N nüvəsi ilə qarşılıqlı təsiri zamanı 40 keV ^{14}C və 580 keV enerjili ^{1}H proton izotoplarının alınması da, öz növbəsində yeni növ defektlər yaradır. Həmçinin, neytron intensivliyinin artması ilə kristal quruluşa verilən enerjinin miqdarı artır. Böyük miqdarda defekt mərkəzlər böyük miqdarda enerjinin toplanmasını yaradır. Şüalanmamış nümunələrdə ana defektlərin hesabına yaranan toplanan enerjinin miqdarı 94.49 J/q olduğu halda, 8.0×10^{12} n/sm²-dən 4.0×10^{14} n/sm²-ə qədər olan neytron intensivliyində toplanan enerjinin qiyməti 133.106 J/q-dən 259.364J/q qədər zəif artır. Lakin, maksimum neytron 1.0×10^{15}n/sm² şüalanması göstərir ki, toplanan enerjinin qiyməti daha sürətlə artaraq 373.609 J/q çatır. Bu bir daha eksperimental olaraq göstərir ki, yüksək şüalanma dozası yüksək Vigner enerjisinə ekvivalentdir [35-36].

B_4C və B_6Si nümunələri 2.5 MeV enerjili elektronlarla 4.16×10^{16}1/sm², 1.20×10^{17}1/sm² və 1.03×10^{18}1/sm² intensivliklərdə şüalandırılmışdır. Şüalanmadan sonra ilk tədqiq olunan bor karbid nümunəsində $100 \geq T \geq 146$ K temperatur intervalında istilik selinin ötürülməsi daha kiçik sürətli olduğu halda, $146 \geq T \geq 300$ K daha aktiv fazada dəyişir, yəni ikifazalı istilik ötürülmə mexanizmi baş verir. Şəkil 5-dən göründüyü kimi, bor silikat üçün istilik selinin kinetikası bölgələrə bölünmür. Bor silikat birləşməsi üçün istiliyin ötürülməsi və selin dəyişməsi eyni mexanizm ilə baş verir. Xətti qanunauyğunluqla dəyişən kinetikada faza keçidi müşahidə olunmursa, baş verən bütün termo-fiziki proseslər xüsusi istilik tutumu üzərində qurulur və bir- biri ilə əlaqəlidir. DSC metodu ilə təyin olunan xüsusi istilik tutumunun qiyməti istilik selinin ortalama qiyməti əsasında hesablanır [37-38].



Şəkil 5. 4.16×10^{16} 1/sm^2, 1.20×10^{17} 1/sm^2 və 1.03×10^{18} 1/sm^2 intensivlikli elektronlarla şüalandırılmış a) bor karbid b) bor silikat nümunələrinin $100\leq T\geq300$ K temperatur intervalında istilik seli funksiyası.



Şəkil 6. $100\leq T\leq300$ K temperatur intervalında xüsusi istilik tutumunun kinetikası.

Bor karbid numunəsi üçün xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığından alınan ($T_1\geq146$K$\geq T_2$ temperatur aralığında) qrafiklərin fitting olunduqdan sonra tənliklərini aşağıdakı kimi ifadə etmək olar.

$$C_{p_1}(T_{T\leq146}) = f_1(T_{T\leq146}) = 0.00212 + 1.185\cdot10^{-4}\cdot T_{T\leq146} \quad (3)$$

$$C_{p_2}(T_{T\geq146}) = f_2(T_{T\geq146}) = -0.01887 + 2.5259\cdot10^{-4}\cdot T_{T\geq146} \quad (4)$$

Alınan eksperimental nəticələr kiçik temperaturlarda istilik selinin bor karbid nümunəsində ötürülməsinin ikili mexanizmlə baş verdiyini göstərir. Kiçik temperaturlarda fonon-fonon qarşılıqlı təsiri ilə ötürülən istilik seli ikili mexanizmdə özünü ehtiva edir. İstilik selinin temperatur asılılığında baş verən termik kinetika, istilik tutumunun temperatur asılılığında da özünü göstərir. İstilik tutumununu temperatur asılılığından aydın görünür ki, bor karbid nümunələrinin elektron selinin təsiri altında 100 K temperaturda xüsusi istilik tutumu 0.0170-0.0176 J/K×g intervalında dəyişir. Şüalanma növündən və şüalanma selindən asılı olmayaraq, bor silikat nümunələri üçün xüsusi istilik tutumunun mexanizmi bor karbid nümunəsindən fərqlənir [39]. Bor silikat nümunəsində istilik selinin ötürülmə mexanizmi xəttidir. Həmçinin, bor silikat numunəsi üçün

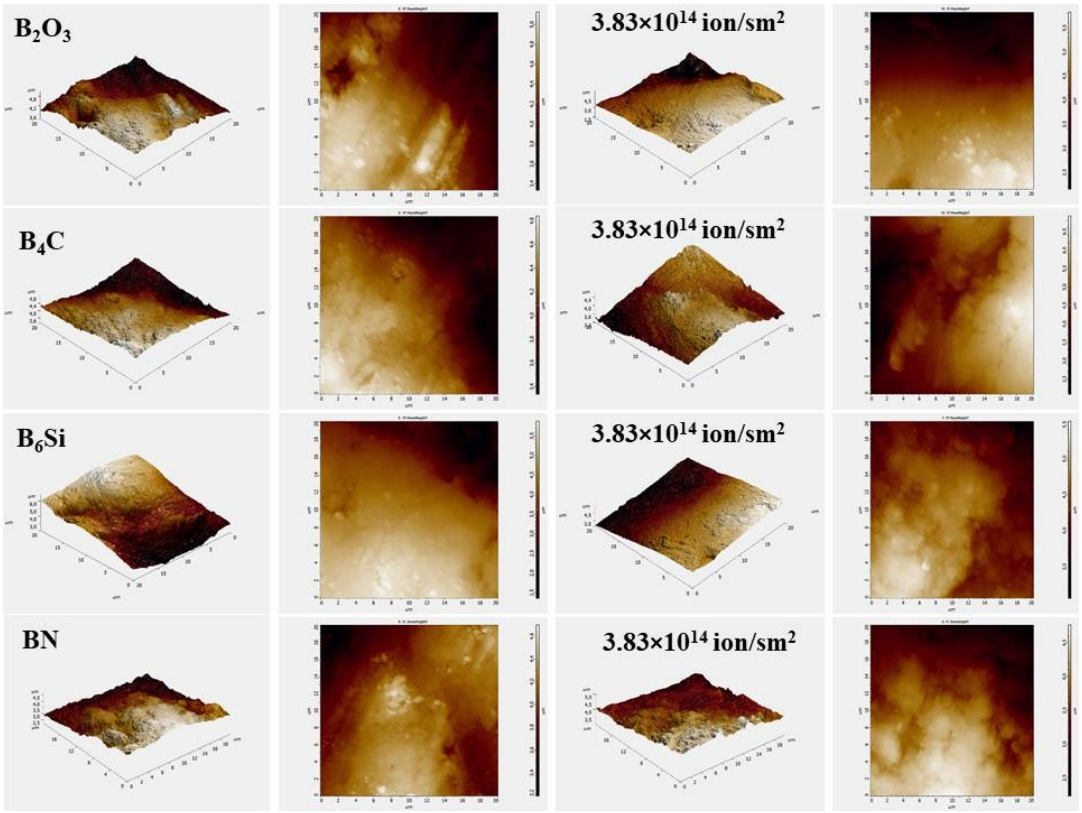
xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığından alınan qrafikin fitting qiyməti aşağıdakı kimi ifadə etmək olar.

$$C_p(T) = -0.01645 + 2.4188 \cdot 10^{-4} \cdot T \qquad (5)$$

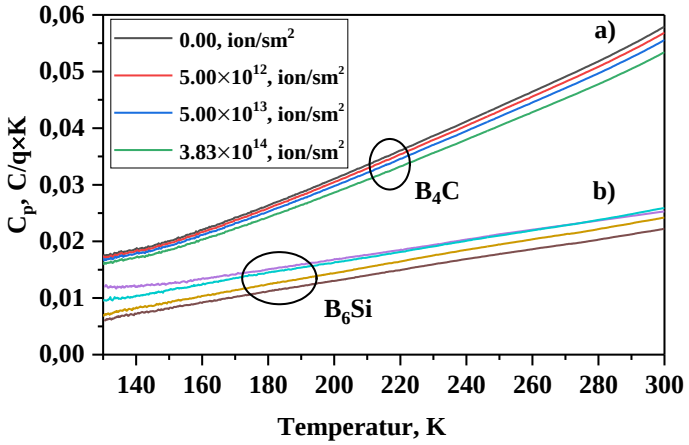
Kiçik temperaturlarda fonon-fonon qarşılıqlı təsirinin ötürülməsi yalnız bir mexanizmlidir. Bor silikat nümunəsində elektron və ion selinin təsiri altında, 100K temperaturda xüsusi istilik tutumu 0.005627-0.0129 J/K×g intervalında dəyişir. Lakin, bu bor karbid nümunəsi ilə müqayisədə olduqca kiçik qiymətdir [40]. İstilik tutumunun alınmış qiyməti kristal quruluş və sıxlıq faktoru ilə bağlıdır. Sıxlığın artması ilə keramik nümunələrdə kiçik temperaturlarda fonon-fonon qarşılıqlı təsiri daha böyükdür və bu daha çox xətti funksiya ilə ifadə olunur. Müxtəlif sıxlıqlara malik bor karbid və bor silikat nümunələrinin xüsusi istilik tutumunun azacıq dəyişməsi eksperimental müşahidə olunur. Hər bir şüalanma üçün xüsusi istilik tutumunun kinetikası şəkil 6-da verilmişdir.

Xüsusi istilik tutumunun dəyişmə kinetikası göstərir ki (şəkil 6), B_4C birləşməsi $100 \leq T \leq 300$ K temperatur intervalında yüksək enerjili elektronlarla şüalandırıldıqda 3.48, B_6Si nümunəsi üçün 4.40 dəfə artır. Eksperimental təcrübələr göstərir ki, bor silikat nümunələrində xüsusi istilik tutumunun qiyməti daha sürətlə artır.

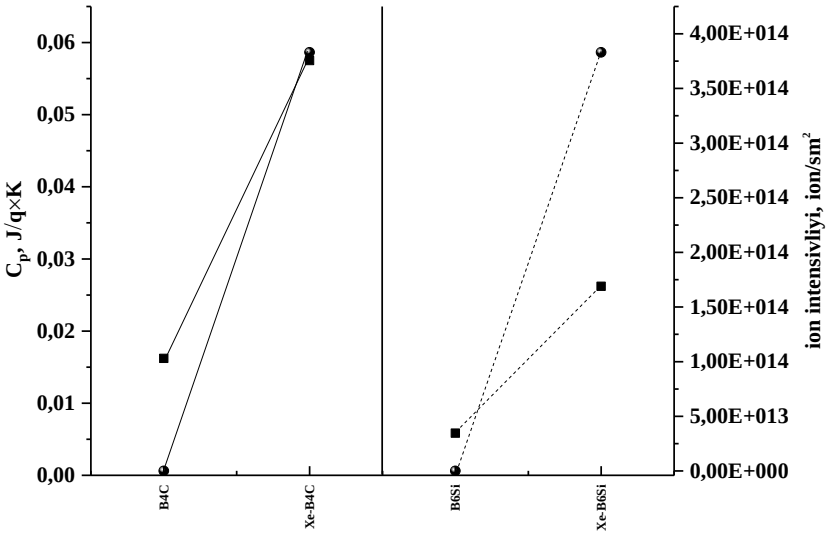
Şəkil 7-də B_2O_3, B_4C, B_6Si və BN birləşməsinin ilkin və yüksək enerjili ^{132}Xe ionları ilə şüalanmadan sonra 2D və 3D səth morfologiyası təsvirləri verilmişdir. Şüalanmayan nümunələrdə səthdə əmələ gələn mikrostrukturun maksimal ölçüsü 4.8±0,5μm bərabərdir. İlkin strukturun 2D morfologiyasından göründüyü kimi, şişlərin paylanma dinamikası zəifdir. 167MeV ^{132}Xe ionları ilə şüalanmadan sonra mikrostrukturda hissəciklərin paylanması, şişlərin sahəsi və ölçüsü artır. Şüalanma zamanı iri şişlər kiçik və orta şişlər tərəfindən "adsorbsiya edilmişdir". Çox təbəqəli nümunələr üçün bu proses "şişlərin qarşılıqlı keçid effektləri" adlanır [31-32]. Nəticədə, müxtəlif ölçülü radiasiya şişkinliyi daha böyük təsirlənmiş şişlərin formalaşmasına təsir edir. Nümunələrin səthində şişkinliyin artması səthdə baş verən istilik prosesləri nəticəsində baş verir. Conson yaxınlaşmasına görə, silindrik formalaşan ölçü Conson parametrinə bərabərdir. Tədqiqatlar göstərir ki, şüalanmamış nümunələrin səthində şişlərin böyümə sürəti şüalanmış nümunələrdəkindən 2.2 dəfə çoxdur. 167 MeV ^{132}Xe ionlarla şüalandırılmış nümunələrdə şişlərin böyümə sürəti müəyyən olunmuşdur. İon şüalanma zamanı səthdə şişlərin yaranması mikrostrukturun dislokasiyası və yaxud "çoxqatlı birləşmələrdə dislokasiyanın əmələ gəlməsi" ilə bağlıdır. Dislokasiya mikrostrukturda iki (impulslu şüalanma və davamlı şüalanma) mexanizmlə formalaşır. Ədəbiyyatda α-Fe üzərində 50 keV Ar ionlarla yerinə yetirilən tədqiqatlar göstərir ki, enerji və intensivlikdən asılı olaraq dislokasiya sıxlığı impuls rejimində formalaşır. Həmçinin, dislokasiya təsirləri nümunənin səthində plastik deformasiyanın yaranmasını formalaşdırır. Parçalanma məhsullarından olan ^2He ionun enerjisi 1 MeV ətrafında dəyişir. Yüksək entropiyaya malik nümunələrin ~100nm dərinliyində qaz ionları molekulyar hala keçərək şişlər mexanizmini yaradır. Şişlərin təsiri altında qəfəs parametrlərinin genişlənmə prosesi baş verir.



Şəkil 7. 3.83×10^{14} ion/sm^2 intensivlikdə 167 MeV ^{132}Xe ionları ilə şüalanmış B_2O_3, B_4C, B_6Si və BN nümunələrinin səth morfologiyası.



Şəkil 8. 120≤*T*≤300 K temperatur intervalında 5.0×10^{12} ion/sm^2, 5.0×10^{13} ion/sm^2 və 3.83×10^{14} ion/sm^2 intensivliklərdə şüalandırılmış B_4C və B_6Si birləşmələrinin xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığı.

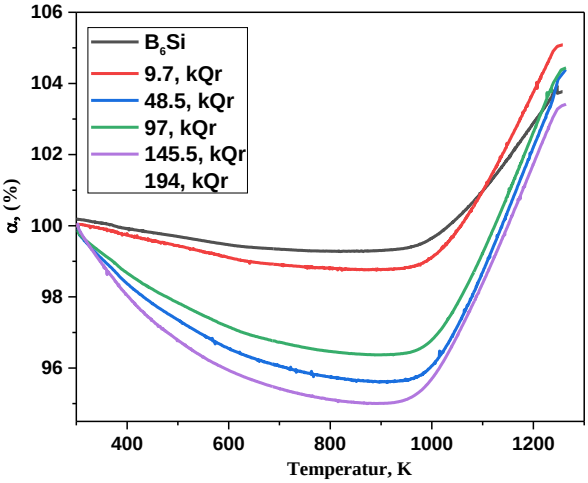


Şəkil 9. Müxtəlif intensivlikli ağır ionlarla şüalanmış B_4C və B_6Si nümunələrinin xüsusi istilik tutumunun 120≤*T*≤300 K temperatur intervalında kinetikası.

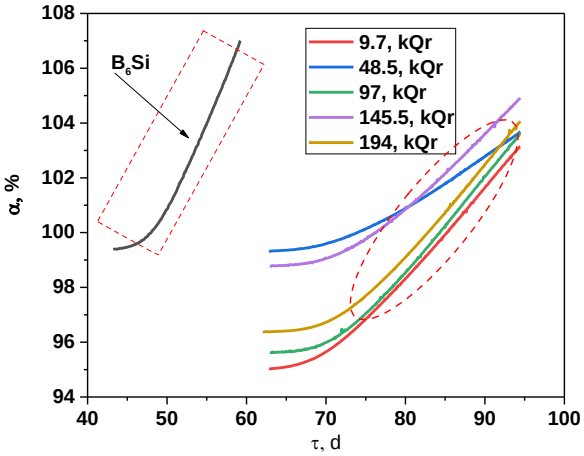
Şəkil 8-də B_4C və B_6Si nümunələri üçün 120≤*T*≤300 K temperatur intervalında müxtəlif şüalanmalarda 5.0×10^{12} ion/sm^2, 5.0×10^{13} ion/sm^2 və 3.83×10^{14} ion/sm^2 xüsusi istilik tutumunun temperatur asılılığı göstərilmişdir.

İstilik selinin temperaturdan asılılıq kinetikası istilik tutumunun temperaturdan asılılığında təzahür olunur. İstilik tutumunun temperatur asılılığından aydın olur ki, B_4C nümunələri müxtəlif intensivlikli ionların təsirinə məruz qaldıqda, 120 K temperaturda 0.0170-0.0176 C/q×K-ə bərabərdir. Yüksək enerjili ağır ionlarla şüalanmış B_4C nümunələrində xüsusi istilik tutumunun qiyməti 0.016 C/q×K-ə dəyişir. Ağır ionlarla qarşılıqlı təsir nümunələrin səth morfologiyasında amorfizasiyaya və istilik tutumunun kinetikasında dəyişikliyə səbəb olur. B_6Si nümunələrinin istilikkeçiricilik mexanizmi B_4C nümunəsindən bir qədər fərqlənir. B_6Si nümunəsində istiliyin paylanma mexanizmi xəttidir. Xüsusi istilik tutumunun kinetikası B_4C və B_6Si nümunələri üçün şəkil 9-da verilmişdir. Xüsusi istilik tutumunun dəyişməsi göstərir ki, B_4C birləşməsi 120≤*T*≤300 K temperatur intervalında sürətli ağır ionlara məruz qaldıqda 3.59, B_6Si nümunəsi isə 4.42 dəfə artır [41]. Təcrübələr B_6Si nümunələrində xüsusi istilik tutumunun qiymətinin daha sürətlə artdığını göstərir. Eksperimental təcrübələrdə ağır ionlarla şüalanmadan sonra, B_6Si nümunəsində xüsusi istilik tutumu daha aktiv fazada dəyişir.

Şəkil 10-da müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B_6Si birləşməsinin oksidləşmə dərəcəsinin temperatur asılılığı verilmişdir. B_6Si birləşməsində oksidləşmə şüalanmamış və 9.7, 48.5, 97, 145.5, və 194kQr udulma dozalarında şüalanmış nümunələr üçün *T*≥650°C-dən başlayır. Lakin, *T*≤650°C oblastında şüalanmanın udulma dozasından asılı olaraq, nümunələrin kütləsində fərqli miqdarlarda parçalanmalar müşahidə olunur ki, bu da atmosfer şəraitində nümunələr tərəfindən absorbsiya olunmuş su buxarlarının parçalanması ilə bağlıdır.



Şəkil 10. 650≤*T*≤1000°C temperatur intervalında müxtəlif qamma şüalanma dozası ilə şüalandırılmış B_6Si nümunəsi üçün oksidləşmə kinetikası.



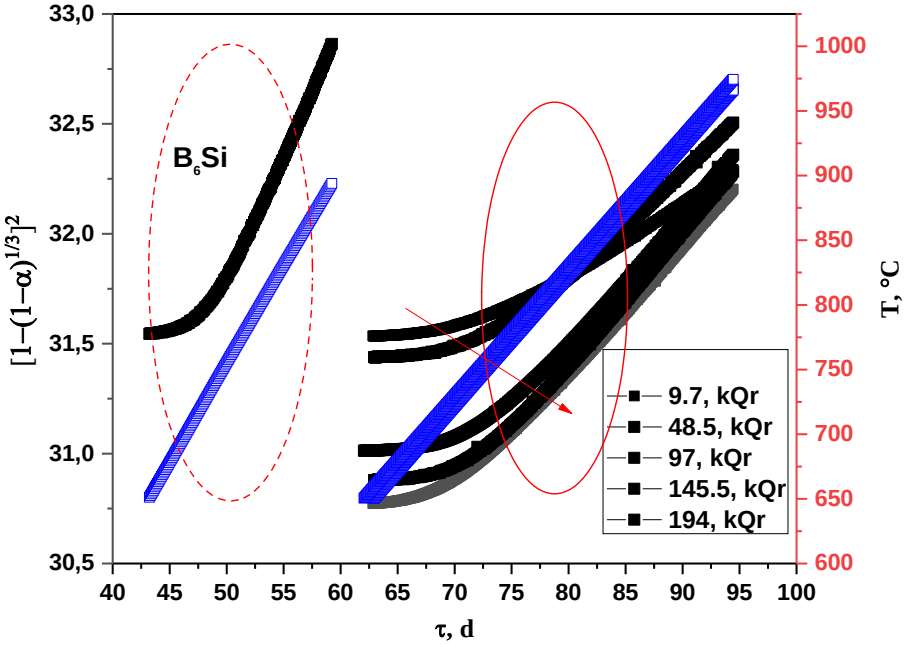
Şəkil 11. B_6Si nümunəsinin müxtəlif qamma şüalanma dozasında 650≤*T*≤1000°C temperatur intervalında oksidləşmə dərəcəsinin zamandan asılılığı.

Yüksək udulma dozalarında oksidləşmə dərəcəsinin udulma dozasından asılılığı əsasən iki hissədən ibarətdir: Qeyri isotermal oblast 650≤*T*≤740°C temperatur intervalından və isotermal *T*≥740°C başlayır. Oksidləşmənin kritik temperaturu B_6Si nümunəsi üçün 9.7, 48.5, 97, 145.5 və 194 kQr udulma dozalarında *T*≈970°C temperaturuna uyğundur. Qeyri izotermal oblastda kiçik miqdarda oksidləşmə faizi göstərir ki, oksidləşmənin bu mexanizmi daha çox passiv oksidləşmədir. B_6Si hissəciklərinin səthində maye B_2O_3 təbəqəsinin formalaşması isotermal oblastda daha aktiv şəkildə baş verir [33]. Şüalanmamış nümunədə oksidləşmə 3.5% təşkil edirsə, 194 kGr şüalandırılmış nümunələrdə 8.2%-ə bərabərdir. Bu onu göstərir ki, prosesdə iki mexanizmli oksidləşmə prosesi baş verir. Kritik temperaturdan sonra B_6Si hissəciklərində aktiv fazada oksidləşmə prosesi tamamlanır. Oksidləşmə prosesinin kinetikası və aktivləşmə enerjisinin təyini üçün oksidləşmənin zamandan asılılığı müxtəlif udulma dozalarında müəyyən olunmalıdır. B_6Si birləşməsi üçün zamandan asılı olaraq müxtəlif udulma dozalarında temperaturun artması ilə oksidləşmə dərəcəsinin asılılığı şəkil 11-də verilmişdir.

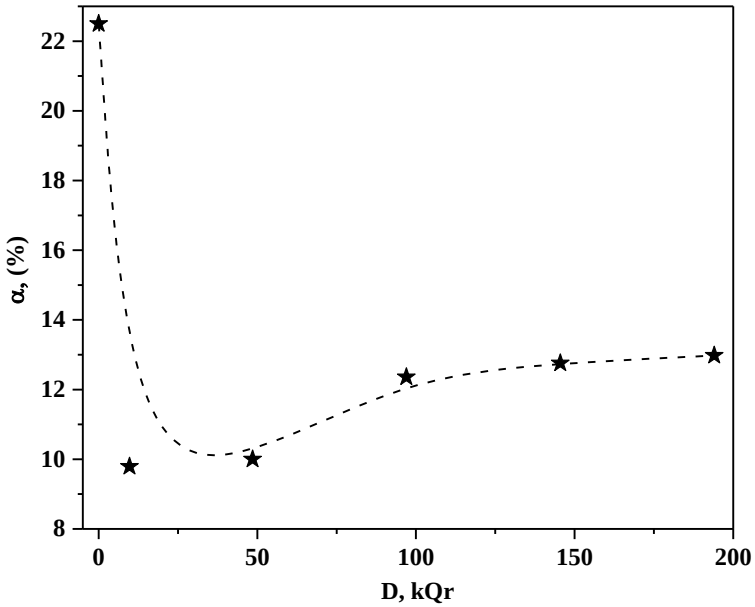
Şəkil 11-də şüalanmamış nümunədə oksidləşmə zamandan asılı olaraq sürətli fazada baş verir, müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B_6Si birləşməsində yüksək udulma dozalarında cəmlənmış oksidləşmə faktoru özünü daha aydın göstərir. *T*≤650°C-də, udulma dozalarından asılı olmayaraq, oksidləşmə dərəcəsinin qiyməti bir-birinə bərabərdir. B_2O_3 ərimə temperaturunda (*T*=450°C) kiçik qiymətlərdə oksidləşmə müşahidə olunmur. 450≤*T*≤650°C temperatur intervalı nümunədə termik stabil oblastdır və istilik selinin sürəti nümunədə hər hansı dinamik dəyişiklik yaratmır. Şüalanmadan sonra B_6Si birləşməsinin *T*≤650°C kiçik temperaturda oksidləşməsi daha çox "non-isothermal oxidation" xarakterlidir. *T*≥740°C-dən sonra udulma dozasından asılı olmayaraq bütün oblast üzrə xətti oksidləşmə müşahidə olunur və bu qiymət kritik həddə çatana qədər artır. Oksidləşmə dərəcəsinin temperaturdan, şüalanmanın udulma dozasından və zamandan asılılıqları göstərdi ki, əsas oksid təbəqəsi səth xarakterlidir. Səth xarakterli oksidləşmə proseslərində oksidləşmə dərinliyi və oksidləşmənin diffuziya sürəti kritik həddin səviyyəsini müəyyən edir. Səthdə yaranan oksidləşmə dərinliyi şüalanmanın udulma dozası və temperaturdan önəmli dərəcədə asılı olduğu kimi, nümunənin molyar kütləsindən, kimyəvi çevrilmədən sonra yaranan birləşmələrin molyar kütləsindən, hissəciyin xüsusi səth sahəsi və hissəciyin ölçüsündən də asılıdır. Oksidləşmə reaksiyasında B_6Si-dən B_2O_3 və SiO_2 kimyəvi keçidləri nəzərə alsaq, səhtdə yaranan oksid dərinliyi və hər bir udulma dozası üçün yaranan

oksid dərinliyi müəyyən olunmuşdur. Oksidləşmə prosesində xəttilik və stabil oblast müşahidə olunduğu kimi, həmin prosesin kinetikası da səthdə baş verən kimyəvi reaksiyanın mexanizmi ilə izah olunur. Bir çox hallarda səhtdə baş verən oksidləşmə B_6Si birləşməsi üçün $650 \le T \le 1000$°C temperatur intervalında Jander tənliyindən istifadə olunmaqla qurulmuşdur. Şəkil 12-də müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B_6Si birləşməsi üçün zamandan və temperaturdan asılı olaraq Jander əyriləri qurulmuşdur.

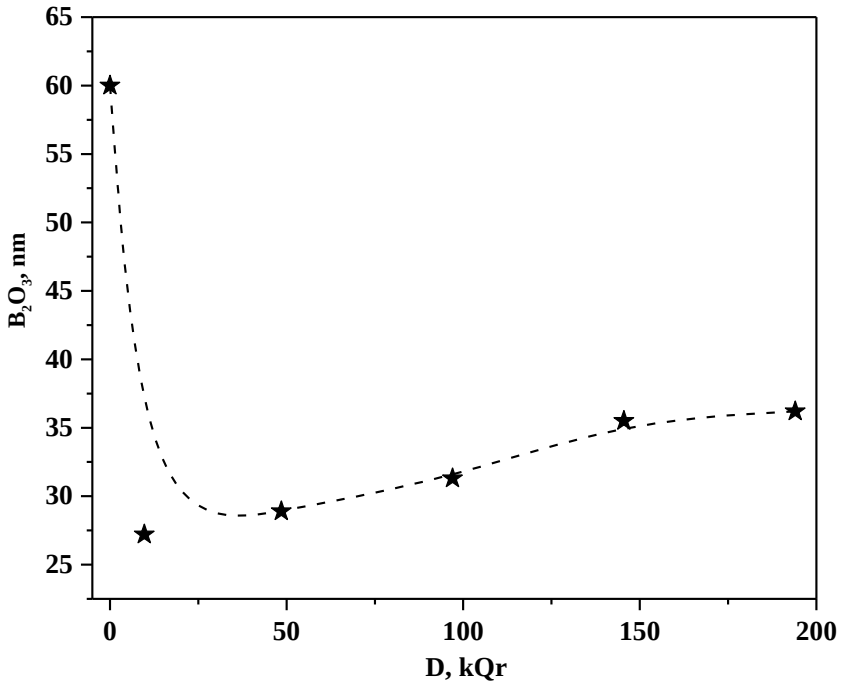
Müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış B_6Si birləşməsi üçün $650 \le T \le 1000$°C temperatur intervalında Jander əyriləri iki hissəyə bölünür. T=740°C-ə qədər diffuziya zəif olur (passiv oksidləşmə), T>740°C-dən sonra isə oksidləşmə aktiv fazaya keçir. Yüksək udulma dozalarında və temperaturlarda oksidləşmə diffuziyasının daha böyük qiymət alması müəyyən olunmuşdur. Oksidləşmə reaksiyasında kütlənin artması ilə paralel B_2O_3 və BO_2 buxarlanma reaksiyası baş verir. Lakin buxarlanma reaksiyasının sürəti oksidləşmə reaksiyasının sürətindən zəif olduğu üçün gamma şüalanmanın yüksək udulma dozalarında əyrilər daha böyük ədədi qiymətə malik olur. Şəkil 13-də B_4C birləşməsinin $950 \le T \le 1200$K temperatur intervalında və müxtəlif qamma udulma dozalarında, eksperiment zamanından asılı olaraq, oksidləşmə spektrləri verilmişdir. Şüalanmamış bor karbid nümunəsinin kütlə spektrinin oksidləşməsi eksperiment müddətindən asılıdır. Müxtəlif udulma dozalarında şüalandırılmış bor karbid nümunələrinin oksidləşmə prosesi zəif xarakterlidir.



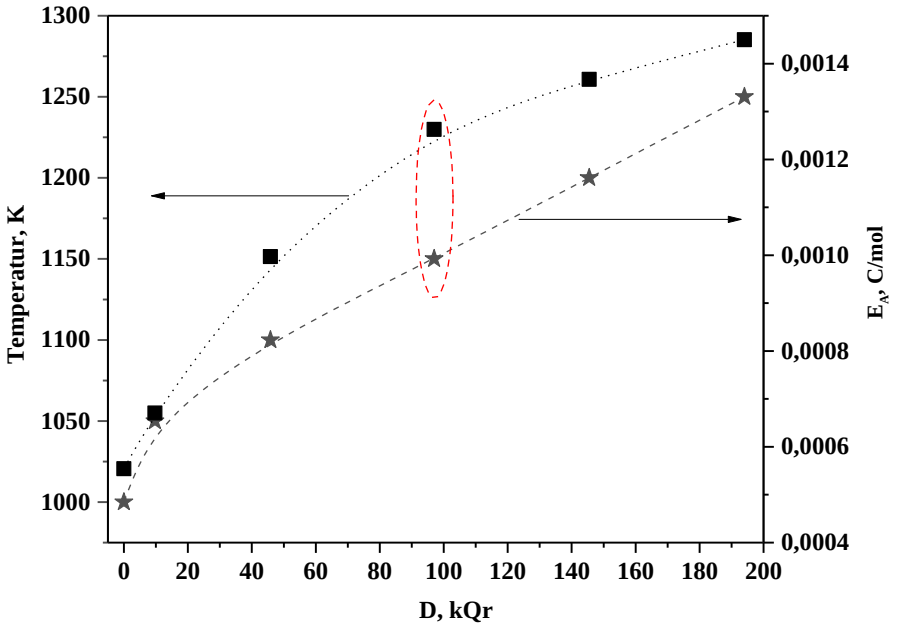
Şəkil 12. $650 \le T \le 1000$°C temperatur intervalında müxtəlif qamma şüalanma dozalarında Jander əyriləri.



Şəkil 13. $950 \le T \le 1250$ K temperatur intervalında müxtəlif qamma şüalanma dozalarında bor karbid birləşməsinin oksidləşmə kinetikası.



Şəkil 14. 950≤*T*≤1250 K temperatur intervalında müxtəlif qamma şüalanma dozalarında B_4C oksidləşmə dərinliyi.



Şəkil 15. Müxtəlif qamma udulma dozalarında B_4C nümunələrinin aktivləşmə enerjisi.

Yüksək udulma dozalarında oksidləşmə kinetikasının azalması məlum aktiv mərkəzlərin oksigen atomları ilə tam tutulmasıdır. Şüalanmadan sonra bor karbid birləşməsində oksidləşməsi daha çox "qeyri-izotermal oksidləşmə" xarakterlidir [34] və bütün udulma dozasından asılı olmayaraq oksidləşmə reaksiyası tamamlanır. Oksidləşmə kinetikasının temperaturdan, şüalanmanın udulma dozasından və zamandan asılılıqlarından alnan qiymətlər göstərir ki, əsas oksid təbəqəsi səth xarakterlidir. B_2O_3 oksid təbəqəsinin dərinliyi şüalanmanın udulma dozasından asılı olaraq ikili mexanizm üzrə baş verir. Şüalanmamış B_4C nümunəsində B_2O_3 oksid təbəqəsinin dərinliyi 60 nm ətrafında dəyişir (şəkil 14). Numunələrdə qamma şüalanmanın udulma dozasının artması ilə oksid təbəqəsinin dərinliyi azalır.

Şəkil 15-də aktivləşmə enerjisinin şüalanmanın udulma dozasından asılılığı bir daha yuxarıda qeyd olunan eksperimental nəticələri təsdiq edir. Müxtəlif udulma dozalarında yerinə yetirilmiş eksperimentlər üçün oksidləşmə dərəcəsi ilə aktivləşmə enerjisi arasında uyğunluq yaradılmışdır.

Şəkil 15-də temperatur və aktivləşmə enerjisinin qiyməti şüalanmanın udulma dozasından asılı olaraq artır. Oksid təbəqəsinin dərinliyi yüksək udulma do-

zalarında aktiv mərkəzlər tərəfindən oksigen atomlarının tutulmasından və oksidləşmə reaksiyasından asılıdır. Mürəkkəb mexanizimlə baş verən oksidləşmə reaksiyasında oksid təbəqəsinin aktivləşmə enerjisininin qiyməti bütün udulma dozalarında bir birinə yaxındır.

4. NƏTİCƏ

Yüksək təmizlik dərəcəsinə malik B_4C, BN, B_6Si və B_2O_3 birləşmələri enerjisi E<1 MeV olan sürətli neytronlarla otaq temperaturunda 4.0×10^{12}n/(sm²×san), 8.0×10^{12}n/(sm²×san), 1.37×10^{13}n/(sm²×san), 4.0×10^{14}n/(sm²×san) və 1.0×10^{15}n/(sm²×san) intensivliklərdə, 2.5MeV enerjili xətti elektron sürətləndiricidə 4.16×1016 1/sm^2, 1.20×1017 1/sm^2 və 1.03×1018 1/sm^2 intensivliklərdə və 167 MeV/u enerjili ^{132}Xe ionları ilə 5.0×10^{12} ion/sm^2, 5.0×10^{13} ion/sm^2 və 3.83×10^{14} ion/sm^2 intensivlikdə şüalandırılmışdır. Həmçinin, 1.17 MeV və 1.33 MeV enerji xəttinə malik ^{60}Co mənbəyi ilə 9.7 kQr, 48.5kQr, 97 kQr, 145.5 kQr və 194 kQr udulma dozalarında şüalandırılması yerinə yetirilmişdir. Termofiziki tədqiqatlardan müəyyən olunmuşdur ki, şüalanmış nümunələrin strukturunda defektlər formalaşır. Temperaturdan asılı olaraq B_4C və B_6Si nümunələrinin səthində B_2O_3 və SiO_2 oksid təbəqəsinin qalınlığı 60 nm və istilik tutumunun kinetikası müəyyən olunmuşdur.

[1] *R.A. Andrievski*. Russian Chemical Reviews, 2012, v.81, pp.549-559.

[2] *Y. Ben-Galim, U.Wengrowicz, A.Raveh, I.Orion.* Gamma scintillator system using boron carbide for neutron detection/ Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2014, v.756, pp.62-67.

[3] *S. Chakraborty, D. Debnath, A.R. Mallick, P.K.Das.* International Journal of Applied Ceramic Technology, 2015, v.12, pp.568-576.

[4] *S. Chakraborty, D. Debnath, A.R. Mallick, R.K.Gupta, A. Ranjan, PK. Das, D. Ghosh.* International Journal of Refractory Metals and Hard Materials, 2015, v.52, pp. 176-182.

[5] *L.T. Christopher et all.* Journal of Physical Chemistry C, 2015, v.119, pp.13807-13813.

[6] *P. Chaudhari, A. Singh, A. Topkar, R. Dusane*. Fabrication and characterization of silicon based thermal neutron detector with hot wire chemical vapor deposited boron carbide converter. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2015, v.779, pp.33-38.

[7] *H.K. Clark, J.L. Hoard*. Journal of American Chemical Society, 1943, v.65, pp.2115-2119.

[8] *H.A.A. Abdelbagi, V.A.Skuratov, S.V.Motloung, E.G. Njoroge, M. Mlambo, T.T. Hlatshwayo, J.B.Malherbe*. Effect of swift heavy ions irradiation on the migration behavior of strontium implanted into polycrystalline SiC. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2019, v.451, pp.113-121.

[9] *Mannab Tashmetov, Bekhzodjon Abdurakhimov, Matlab N. Mirzayev and To Xuan Thang*. The effect of electron beam to nanocrystallites size, strain and structural parameters of the silicon carbide nanopowder, International Journal of Modern Physics B, 2019, vol. 33, No. 20, 1950223.

[10] *M.N. Mirzayev*. Radiation Physics and Chemistry, 2021, v.180, pp.109244

[11] *M.N. Mirzayev*. Simultaneous measurements of heat flow rate and thermal properties of nano boron trioxide under neutron irradiation at the low and high temperature. Vacuum, 2020, v.173, pp.109162.

[12] *M.N. Mirzayev*. International Journal of Modern Physics B, 2020, v.34, pp.2050160.

[13] *M.N. Mirzayev, B.A. Abdurakhimov, E. Demir, A.A. Donkov, E. Popov, M. Yu. Tashmetov, I.G. Genov, T.T. Thabethe, K. Siemek, K. Krezhov, F. Mamedov, D.M. Mirzayeva, M.V. Bulavin, V.A. Turchenko, T.X. Thang, T.Z. Abdurakhmonov, P. Horodek.* Physica B: Condensed Matter, 611, 2021, 412842.

[14] *M.N. Mirzayev, E. Popov, E. Demir, B. Abdurakhimov, D.M. Mirzayeva, V.N. Tiep, G.I. Georgiev, A.K. Mutali, M.B. Mamatova.* Thermophysical behavior of nano boron trioxide under high intense electron beam irradiation. Advanced Physical Research, 2019, v.1, pp.63-69.

[15] *M.N. Mirzayev*. Study thermodynamic assessment of the B-C and B-Si binary systems with swift heavy ions and high intense electron beam irradiation at the low temperature. Modern Physics Letters B, 2020, v.34, pp.2050395.

[16] *M.N. Mirzayev, B.A. Abdurakhimov, S.H.Jabarov, M.Yu. Tashmetov, E. Demir, N.V. Tiep, N.A. Ismayilova,Y.I. Aliyev, E.Popov, D.M. Mirzayeva, S.I. Karaaslan, G.I.Georgiev.* International Journal of Modern Physics B, 2020, v.34, pp.2050008.

[17] *M.N. Mirzayev, E. Popov, E.Demir, B.A. Abdurakhimov, D.M. Mirzayeva, V.A. Skuratov, A.K.Mutali, V.N. Tiep, S. Biira, M.Yu.Tashmetov, K.Olejniczak, O. Kristavchuk.* Journal of Alloys and Compounds, 2020, v.834, pp.155119.

[18] *M.N.Mirzayev,Kh.Mammadov, R.N.Mehdiyeva, R.G. Garibov, B.A. Skuratov, N.V. Tiep, E.B.Askerov, E. Demir, A.B. Tugrul, S.H.Jabarov*. Journal of Radiation Researches, 2018, No2, 5, pp.173-178.

[19] *Ertuğrul Demir, Matlab N. Mirzayev, A. Beril Tugrul, Yury M. Gledenov, Vitali A. Turchenko, Ozan Yılmaz, Bülent Büyük and M. Lütfi Öveçoğlu.* Investigations on surface morphologies, microstructure and thermal properties of tungsten-based composites, Modern Physics Letters B 33(19):1950216, 2019.

[20] *M.N.Mirzayev, S.H.Jabarov, E.B.Asgerov, R.N.Mehdiyeva, T.T.Thabethe, S.Biira, N.V.Tiep*. Crystal structure changes and weight kinetics of silicon-hexaboride under gamma irradiation dose, Results in Physics. vol. 10, 2018, pp 541-545.

[21] *M.N.Mirzayev, Kh.F.Mammadov, R.G.Garibov, E.B.Askerov*. Thermophysical properties of boron carbide irradiated by ionizing radiation, High Temperature, 2018, vol. 56, Issue 3, pp 374–377.

[22] *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*. Structure and thermal properties of $BaFe_{11.1}In_{0.9}O_{19}$ hexaferrite, Physica B: Condensed Matter, 580, 2020, 411772.

[23] *M.N.Mirzayev, R.N.Mehdiyeva, R.G.Garibov, N.A.Ismayilova, S.H.* Jabarov. Influence of gamma irradiation on the surface morphology, XRD and thermophysical properties of silicide hexoboride, Modern Physics Letters B, vol. 32, No. 14, 1850151, 2018.

[24] *M.N. Mirzayev, R.N. Mehdiyeva, Kh.F.Mammadov, S.H.Jabarov, E.B.Asgerov*. Physics of Particles and Nuclei Letters (Physics of Solid State and Condensed Matter), 2018, vol. 15, №. 6, pp. 673–677.

[25] *R.F. Hashimov, F.A. Mikailzade, S.V.Trukhanov, N.M. Lyadov, I.R. Vakhitov, A.V. Trukhanov, M.N. Mirzayev.* Structure and thermal analysis of Ba0.5La0.5MnO3 polycrystalline powder, International Journal of Modern Physics B, vol. 33, 2019, 1950244.

[26] *M.N.Mirzayev, S.H.Jabarov, E.B.Asgerov, R.N.Mehdiyeva, T.T.Thabethe, S.Biira, N.V.Tiep.* X-ray diffraction and thermodynamics kinetics of SiB_6 under gamma irradiation dose, Silicon, 2019, 11 (5), 2499-2504.

[27] *Matlab N. Mirzayev*. Oxidation kinetics of boron carbide ceramic under high gamma irradiation dose in the high temperature, Ceramics International, 2020, 46 (3), 2816-2822.

[28] *M.N.Mirzayev, Kh.F.Mammadov, V.A.Skuratov, E. Demir, S.H. Jabarov, N.A. Ismayilova, S. Biira, B. Abdurakhimov, E. Popov*. Journal of Alloys and Compounds, volume 801, 2019, p. 151-157.

[29] *E.P. Popov, A.N. Chernikov, A.I. Beskrovnyi, J. Waliszewski, M.N. Mirzayev*. Journal of Physics: Conference Series 1492 (1), 012054, 2020.

[30] *Matlab Mirzayev, Ertugrul Demir, Khagani Mammadov, Ravan Mehdiyeva, Sakin Jabarov, A. Beril Tugrul, Saphina Biira, Nguyen Tiep, Thabsile Thabethe.* Thermodynamics kinetics of boron carbideunder gamma irradiation dose, International Journal of Modern Physics B, 2019, vol. 33, No. 9, 1950073.

[31] *M.N. Mirzayev, R.N. Mehdiyeva, S.Z. Melikova, S.H. Jabarov, T.T. Thabethe, S. Biira, M.A.Kurbanov, N.V. Tiep*. Formation of Color Centers and Concentration of Defects in Boron Carbide Irradiated at Low Gamma Radiation Doses, Journal of the Korean Physical Society, 2019, vol. 74, No. 4, pp. 363-367.

[32] *F. Cataldo, S. Iglesias-Groth*. Neutron damage of hexagonal boron nitride. Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 2017, v.313, pp.261-271.

[33] *E. Demir, M.N. Mirzayev, A.B. Tugrul, B.A.Abdurakhimov.* An experimental study on microstructure of tungsten alloys. Surface Review and Letters, 2020, v.27, pp.1950169.

[34] *E. Demir, Y.M. Gledenov, A.B. Tuğrul, M.N.Mirzayev, V.A. Turchenko, O. Yilmaz, B. Büyük, E. Sansarbayar, M.L. Öveçoğlu.* Investigations on microstructure and thermal properties of tungsten-based composites. Modern Physics Letters B, 2019, v.33(19), pp.1950216.

[35] *T. Mori, T. Nishimura.* Thermoelectric properties of homologous p- and n-type boron-rich borides. Journal of Solid State Chemistry, 2006, v.179, pp.2908-2915.

[36] *A. Jay, D.O. Hardouin, J. Sjakste, N. Vast.* Theoretical phase diagram of boron carbide from ambient to high pressure and temperature. Journal of Applied Physics, 2019, v.125, pp.185902.

[37] E. Demir, M.N. Mirzayev, E.P. Popov, P. Horodek, I.G. Genov, K. Siemek, D.M. Mirzayeva, V.A. Turchenko, M. Bulavin, A.I. Beskrovnyi, A.H. Valizade, H.V. Akhundzada, S.I. Karaaslan, Effects of high-energetic $^3He^+$ ion irradiation on tungsten-based composites, Vacuum, 184, 2021, 109934.

[38] Y.I. Aliyev, P.R. Khalilzade, Y.G. Asadov, T.M. Ilyasli, F.M. Mammadov, N.A. Ismayilova, M.N. Mirzayev, S.H. Jabarov, N.T. Dang, Behavior of thermal properties of $AgCu_{1-x}Fe_xS$ compounds under non-isothermal conditions, International Journal of Modern Physics B, 33 (28), 1950339, 2020.

[39] V.A. Abdurahmanova, N.M. Abdullaev, Sh.S. Ismayilov, M.N. Mirzayev, The thermal properties of SnSe and $Sm_{1-x}Ce_xSnSe_2$ (x= 0.02–0.5) compounds, International Journal of Modern Physics B, 34 (18), 2020, 2050167.

[40] *Y.I. Aliyev, Y.G. Asadov, T.M. Ilyasli, F.M. Mammadov, T.G. Naghiyev, Z.A. Ismayilova, M.N. Mirzayev, S.H. Jabarov.* Structural aspects of thermal properties of AgCuS compound, Modern Physics Letters B, 34 (05), 2020, 2050066.

[41] *S.R. Azimova, N.M. Abdullayev, Y.I. Aliyev, M.N. Mirzayev, V.A. Skuratov, A.K. Mutali, S.H.Jabarov.* Study on the Thermodynamic Behavior of Sb-Te Binary Systems with Swift Heavy-Ions Irradiation at the High Temperatures, Journal of the Korean Physical Society, 77 (3), 240-246, 2020.

O.A. Samedov, M.N. Mirzayev

DEFECT FORMATION MECHANISM AND THERMOPHYSICAL EFFECT IN THE BINARY BORON COMPOUNDS UNDER SWIFT HEAVY ION, NEUTRON, ELECTRON AND GAMMA IRRADIATION

In the presented work, the mechanism of recombination of defects under the influence of different types of irradiations in the binary boron compounds in the temperature range T = 300-1200K and the kinetics of the heat flux function depending on the temperature were determined. The formation of an oxide layer on the surface of B_4C and B_6Si compounds at high temperatures and the degradation of surface morphology in boron compounds under the influence of swift heavy ion flux were studied.

О.А. Самедов, М.Н. Мирзаев

МЕХАНИЗМ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В БИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ БОРА ПРИ БЫСТРОМ ТЯЖЕЛОМ ИОННОМ, НЕЙТРОННОМ, ЭЛЕКТРОННОМ И ГАММА-ОБЛУЧЕНИИ

В представленной работе определены механизм рекомбинации дефектов под действием различных видов облучения в бинарных соединениях бора в интервале температур T = 300-1200K и кинетика функции теплового потока в зависимости от температуры. Исследовано образование оксидного слоя на поверхности соединений B_4C и B_6Si при высоких температурах и деградация морфологии поверхности в соединениях бора под действием потока быстрых тяжелых ионов.

Qəbul olunma tarixi: 25.01.2022

0.27 eV ENERJİLİ POLYARLAŞMIŞ NEYTRONLARIN TƏSİRİ İLƏ ^{235}U NÜVƏSİNİN BÖLÜNMƏSİ ZAMANI ANİ QAMMA KVANTLARIN VƏ NEYTRONLARIN BUCAQ KORRELYASİYASININ ÖLÇÜLMƏSİ

Q.S. ƏHMƏDOV

AMEA Radiasiya Problemləri İnstitutu, Bakı, Azərbaycan, B Vahabzadə küç., 9.
Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutu, Dubna, Rusiya
NRYTN- Milli Nüvə Tədqiqatları Mərkəzi, Bakı, Azərbaycan
E-mail: ahmadovg@nf.jinr.ru

Ağır nüvələrin bölünməsi zamanı müşahidə edilən T-tək asimmetriyalar on illərdir ki, tədqiq edilməkdədir. Bu asimmetriyalar ilk olaraq üçqat bölünmə proseslərində, Rusiya və Avropa institutlarının alimlərinin iştirakı ilə ILL reaktorunda (Grenoble) aparılan bir sıra təcrübələrdə aşkar edilmiş və bir sıra nüvələr üçün ölçülmüşdür. Daha sonra, firlanma effekti (ROT-rotation) ^{235}U və ^{233}U nüvələrinin bölünməsi zamanı ani qamma şüaların və neytronların buraxılmasında müşahidə edilsə də, effektin qiyməti α-zərrəciklərin emissiyası ilə baş verən üçqat bölünmə zamanı alınan qiymətdən kiçik olmuşdur. İndiyə qədər T-tək asimmetriyaların ölçülməsi ütün aparılan bütün təcrübələr J=3 və J=4 spin hallarının qarışıq olduğu enerjilərdə polyarlaşmış neytronlarla aparıldığına görə, bu enerjilərdə spin hallarının asimmetriyaya təsiri yaxşı məlum deyil. Nəzəri modəllərə əsasən asimmetriyanın qiymətinin dəyişmə qanunauyğunluğu təcrübi olaraq tədqiq edilməmişdir. Bunu nəzərə alaraq Almaniyanın Qarxinq şəhərində yerləşən FRM-2 reaktorunun POLI təcrübi qurğusunda ^{235}U nüvəsinin 0.27 eV rezonans enerjisində qamma və neytron asimmetriyalar ölçülmüşdür. Digər enerjilərdən fərqli olaraq bu enerjidə ^{235}U nüvəsinin spininin J=3 halı üstünlük təşkil etdiyindən asimmetriyanın dəyişmə qanunauyğunluğu müşahidə edilmişdir.

GİRİŞ

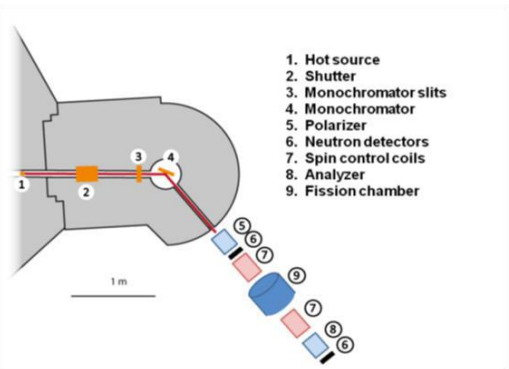
Bölünmə prosesinin dinamikasını öyrənmək üçün müxtəlif ağır nüvələrin müxtəlif enerjili neytronla bölünməsi zamanı baş verən T-tək (TRI-time reversal invariance və ROT effektlər) asimmetriyalarının öyrənilməsi vacibdir [1]. Bu effektlər ilkin olaraq üçqat bölünmə proseslərində [2-4] bir sıra nüvələr üçün, daha sonralar isə qamma şüaların və neytronların buraxılması ilə baş verən ikiqat bölünmə proseslərində müşahidə olunmuşdur [4-10].

Alfa zərrəciklərdən fərqlı olaraq, qamma şüalar və neytronlar yüksüz olduğundan effektləri daha yaxşı öyrənməyə imkan verir. Bu vaxta qədər aparılan təcrübələrdə ^{235}U nüvəsinin spin halları (J=3, J=4) qarışıq olduğundan, bölünmə kanallarını təyin etmək olmurdu. Nəzəri hesablamalara görə həm TRI, həm də ROT effekt kvant ədədləri olan ümumi firlanma momentindən (J) və onun proyeksiyasından (K) asılıdır. Yəni, hər bir J halına müxtəlif K halları uyğun gəlir ki, bu da bölünmənin hansı haldan (kanaldan) baş verdiyini təyin etməyə imkan vermir. Bunu araşdırmaq üçün, bölünməyə səbəb olan neytronların enerjisindən və J hallarının dəyişmə tendensiyasından asılı olaraq T-tək asimmetriyaları tədqiq etmək lazımdır. Bunu nəzərə alaraq, Qarxinqdəki FRM-2 reaktorunun POLI təcrübi qurğusunda ^{235}U nüvəsinin J=3 halının qismən üstünlük təşkil etdiyi 0.27 eV rezonans enerjisində, qamma və neytron asimmetriyaları ölçülmüşdür.

TƏCRÜBƏ VƏ NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

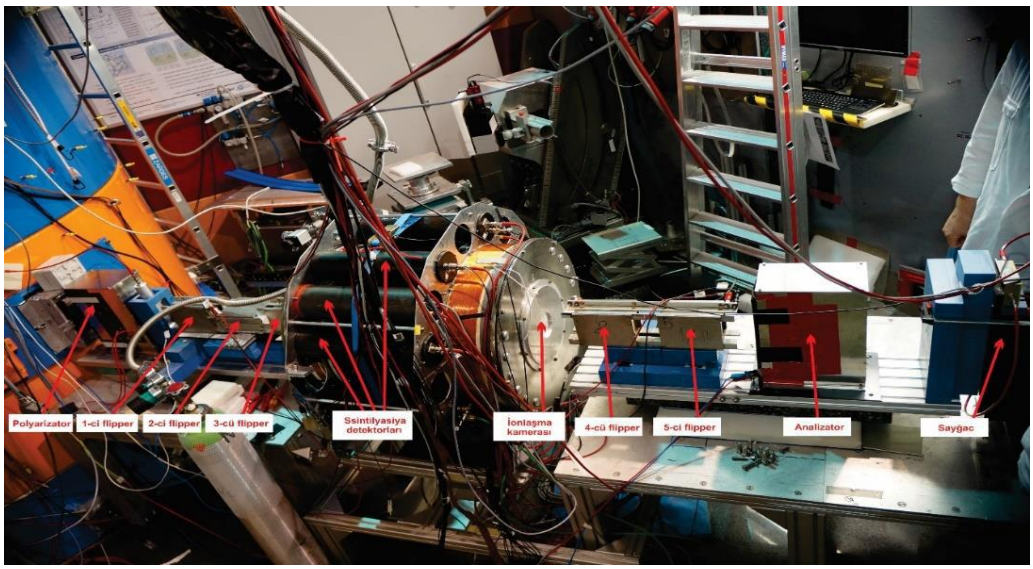
Təcrübədə enerjisi 0.27 eV olan isti neytronlardan və ^{235}U mənbəsindən istifadə edilmişdir. Təcrübə reaktorun POLİ kanalında yerinə yetirilmişdir. POLİ kanalında yerləşdirilmiş təcrübi qurğunun sxemi şəkil 1-də verilmişdir. Mozaik mis (Cu) kristalından ibarət olan monoxromator orta enerjisi 0.27 eV (λ=0.55 Å) olan neytronları buraxmağa imkan verir.

Bu enerji ^{235}U-in aşağı rezonans halına uyğun gəlir. Neytronların polyarlaşdırılması üçün xüsusi hazırlanmış ^{3}He qazı ilə doldurulmuş kolbadan istifadə edilmişdir. Analoji kolba polyarizasiyanı ölçmək üçün istifadə edilən analizatorda da yerləşdirilmişdir. Eksperimentdə istifadə edilən kolbanın ölçüləri ø60x130mm, kolbadakı təzyiq isə 2.5 bar olmuşdur. Kolba, üzərinə düşən neytronların 70%-ni polyarlaşdırmağa imkan verir. Polyarlaşmanın müddəti eksponensial olaraq 40 saat ərzində azalır.

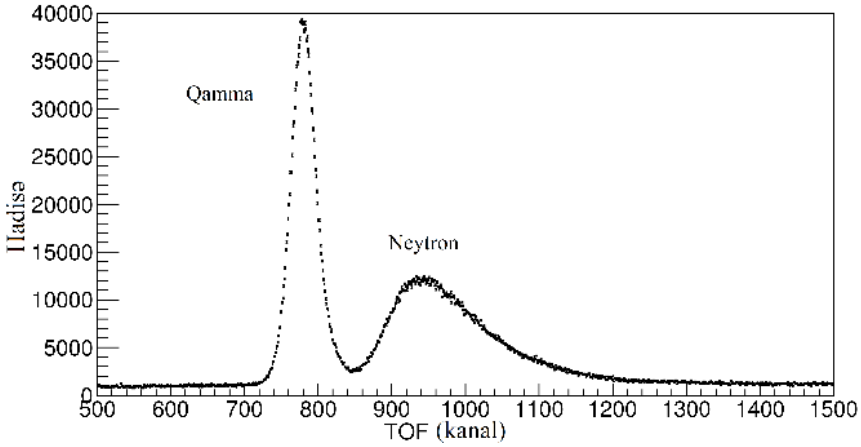


Şəkil 1. FRM-2 reaktorunun POLİ [11-12] kanalında yerləşdirilmiş təcrübi qurğunun sxemi.

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



Şəkil 2. Təcrübi qurğunun real təsviri.



Şəkil 3. Plastik ssintilyatorlarla qeyd edilən uçuş müddətinə görə paylanma spektri.

Analizator və polyarizator neytron selinin vertikal polyarizasiyasını təmin edir. Polyarizasiyanın istiqamətini dəyişmək üçün xüsusi hazırlanmış spin idarəetmə sistemindən istifadə edilmişdir. İdarəetmə sistemi hər 1.3 saniyədə ^{235}U mənbəsinin vəziyyətinə 180° bucaq altında spini firlatmağa imkan verir. Şəkil 2-də təcrübi qurğunun real təsviri verilmişdir. İonlaşma kamerası CF_4 qazı ilə 10 mBar təzyiqə kimi doldurulmuşdur. Təcrübə zamanı ölçüləri 40×100 mm^2 olan alüminium altlıq üzərinə 82 mq ^{235}U (99.99%) çökdürülmüş hədəfdən istifadə edilmişdir. Bölünmə məhsullarını qeyd etmək üçün aşağı təzyiqli nazik çoxsimli mütənasib sayğacdan istifadə edilmişdir. Sayğac mənbənin hər iki tərəfində yerləşdirilmişdir. Başlanğıc "start" detektor kimi istifadə olunan sayğac mənbədən 3 sm, dayandırıcı "stop" detektor kimi istifadə olunan sayğac isə 11 sm məsafədə yerləşdirilmişdir. Mənbədən 30 sm məsafədə yerləşdirilmiş 8 ədəd silindrik plastik ssintilyatorlar, bölünmə zamanı bölünmə məhsulları ilə eyni anda ±22.5, ±67.5, ±112.5 vəd ±157.5 dərəcə bucaq altında buraxılan qamma şüaları və neytronları qeyd etməyə imkan verir. Qamma detektorlar və sayğaclar mənbənin üzərinə düşən neytron selinə ortoqonal yerləşdirilmişdir. Neytronları qamma şüalardan ayırmaq üçün müxtəlif metodlardan [13] istifadə edilsə də, təcrübədə uçuş müddətinə görə ayırma metodundan istifadə olunmuşdur (şəkil 3).

Qeyd edilən hadisələr arasındakı simmetriyanı hesablamaq üçün aşağıdakı düsturdan istifadə edilmişdir:

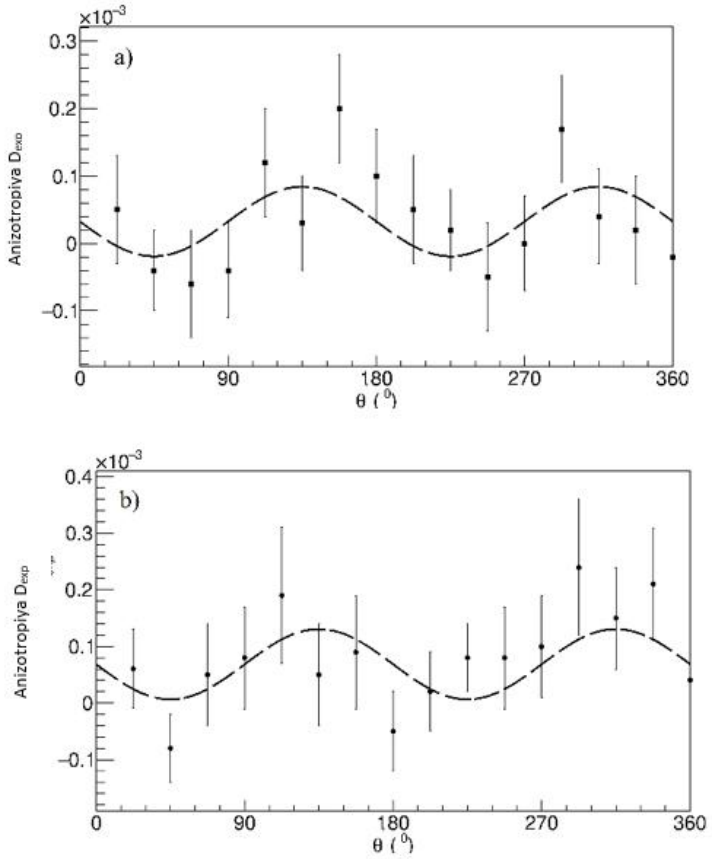
$$R=(N^+ - N^-)/(N^+ + N^-) \qquad (1)$$

Burada N^+ və N^- -neytronların polyarizasiyasina uyğun gələn hadisələrin sayıdır.

Təcrübə 7 gün ərzində aparılmışdır. Hadisələrin sayını artırmaq üçün yalnız dayandırıcı "stop" detektordan istifadə edilmişdir. ROT effektin ölçülməsində ağır və yüngül bölünmə məhsullarının kütləyə görə ayrılması əhəmiyyətli deyil. Başlanğıc detektorun istifadə edilməsi yalnız bölünmə məhsullarına görə bucaq paylanmasını artırır ki, bu da ROT asimmetriyanın azalmasına gətirib çıxarır.

Şəkil 4-də təcrübi məlumatlara əsasən (1) düsturu ilə hesablanmış anizotropiya nisbəti (R) verilmişdir. Qamma şüalar (a) və neytronlar (b) bölünmə məhsullarının biri ilə sinxron qeyd edilmişdir. Şəkildə verilmiş hər bir nöqtə bir detektorun bölünmə məhsulu ilə sinxron qeyd etdiyi hadisəyə uyğundur. Bucaq asılılığı

asimmetriyanı xarakterizə edən $F=R\cdot sin(2\theta)$ funksiyası ilə aproksimasiya olunmuşdur. R anizotropiya parametri aproksimasiya nəticəsində qamma şüalar üçün $R_\gamma=(-5.2\pm2.5)\times10^{-5}$, neytronlar üçün isə $R_n=(-6.2\pm2.9)\times10^{-5}$ tapılmışdır. Alınan nəticələr soyuq neytronlarla alınan nəticələrlə müqayisə edilmişdir. Soyuq neytronlarla aparılan təcrübə zamanı qamma şüalar üçün $R_\gamma= (-16.6\pm1.6) \times10^{-5}$ (45°), neytronlar üçün isə $R_n= (-21.2\pm2.5) \times10^{-5}$ (22.5°) alınmışdır.



Şəkil 4. Qamma şüalar (*a*) və neytronlar (*b*) üçün anizotropiya nisbəti (*R*)

İsti neytronlarla aparılan təcrübədən belə nəticəyə gəlmək olar ki, başqa enerjilərdə alınan təcrübi nəticələrlə müqayisədə 0.27 eV enerjili neytronlarla ^{235}U nüvəsinin bölünməsi zamanı ROT assimmetriyanın qiyməti kifayət qədər kiçikdir. Bunun da səbəbi 0.27eV rezonans enerjisində J=3 və J=4 hallarının en kesiklərinin bir-birinə yaxın olmasıdır.

NƏTİCƏLƏR

0.27 eV enerjili polyarlaşmış neytronların təsiri ilə ^{235}U nüvəsinin bölünməsi zamanı ani qamma şüaların və neytronların bucaq paylanması, başqa sözlə anizotropiyası ölçülmüşdür. Bu enerjidə qamma şüalar üçün $R_\gamma= (-5.2\pm2.5) \times10^{-5}$ və neytronlar üçün $R_n= (-6.2\pm2.9)\times10^{-5}$ alınmış nəticələr, soyuq neytronlarla alınan nəticələrlə ($R_\gamma = (-16.6\pm1.6)\times10^{-5}$ (45°), $R_n = (-21.2\pm2.5) \times10^{-5}$ (22.5°)) müqayisə edilmişdir. Müqayisədən də göründüyü kimi 0.27 eV enerjili neytronlarla ^{235}U nüvəsinin bölünməsi zamanı baş verən anizotropiya nisbətinin qiyməti (ROT- assimmetriya) kifayət qədər kiçikdir. Nəzəri modellərə əsasən 0.27 eV rezonans enerjisində J=3 və J=4 hallarının en kesiyi bir-birinə yaxın olduğundan, anizotropiya nisbətinin (ROT asimmetriyanın) qiyməti kiçik olmalıdır. Çünki J=3 və J=4 halına uyğun gələn bölünmə kanallarından bölünmənin baş vermə ehtimalı bir-birinə çox yaxındır.

Aparılan işlər Azərbaycan Respublikasının Prezidenti Yanında Elmin İnkişafı Fondunun №EİF—BGM-5-AZTURK-1/2018-2/01/1-M-01 nömrəli, SOCAR elm fondunun və Çex Respublikasının Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutundakı səlahiyyətli nümayəndəsinin qrant layihələri çərçivəsində yerinə yetirilmişdir.

[1] *S.A. Barabanov*. Symmetry and spin-angular correlations in the reactions and decays. Simmetrii i spin-uglovye korrelyatsii v reaktsiyakh i raspadakh (Russian), FizMatLit, 2010.

[2] *F. Goennenwein, M. Mutterer, A. Gagarski, I.Guseva, G. Petrov, V. Sokolov, T.Zavarukhina, Yu. Gusev, J.von Kalben, V. Nesvizhevski, T. Soldner*. Phys. Lett. B, 2007, 652, 13.

[3] *P. Jesinger et al.*. Interference effect in the angular distribution of outgoing particles in ternary fission induced by cold polarized neutrons, Phys. Atom. Nucl. 62, 1999, 1608.

[4] *P. Jesinger et al.*. Observation of a triple correlation in ternary fission: is time reversal invariance violated?, Nucl. Instrum. Meth. A, 2000, 440, 618.
[5] *G.V. Danilyan, J. Klenke, V.A. Krakhotin, V.L. Kuznetsov, V.V. Novitsky, V.S. Pavlov, P.B.Shatalov*. Phys. At. Nucl., 2009, 72, 1812.
[6] *G.V. Danilyan, J. Klenke, V.A. Krakhotin, Yu.N.Kopach, V.V. Novitsky, V.S. Pavlov, P.B.Shatalov*. Phys. At. Nucl., 2011, 74, 671.
[7] *G.V. Danilyan, J. Klenke, Yu. Kopatch, V.A.Krakhotin, V.V. Novitsky, V.S. Pavlov, P.B.Shatalov*. Phys. At. Nucl. 2014, 77, 677.
[8] *G.V. Valsky, A.M. Gagarski, I.S. Guseva, D.O. Krinitsin, G.A. Petrov, Yu.S. Pleva, V.E. Sokolov, V.I. Petrova, T.A. Zavarukhina, and T.E. Kuzmina*. Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2010, 74, 767.
[9] *D. Berikov, G. Ahmadov, Yu. Kopatch, et al.* , Effect of rotation in the γ-ray emission from 60 meV polarized neutron-induced fission of the ^{235}U isotope, Phys. Rev. C 104, 024607, 2021.
[10] *D.Berikov, V.Hutanu, Yu.Kopatch, G.Ahmadov, A.Gagarski, V.Novitsky, G.Danilyan, S.Masalovich, J. Klenked and H. Deng*. J. Instrum. 2020, 15, P01014.
[11] *V. Hutanu, M. Meven, and G. Heger*. Phys. B: Condens. Matter. 2007, 397 135.
[12] *V. Hutanu*. J.Large-Scale Res. Facil. 1 A16 2015.
[13] *R.A. Akbarov, G.S. Ahmadov, F.I. Ahmadov, D.Berikov, M.Holik, R.Mammadov, S.M.Nuruyev, A. Z. Sadigov, Z. Y. Sadygov and S.I. Tyutyunnikov*. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, 2019, vol. 936, pp. 549-551.

G.S. Ahmadov

MEASUREMENT OF ANGULAR CORRELATION OF PROMPT GAMMA QUANTA AND NEUTRONS IN THE FISSION OF ^{235}U INDUCED BY POLARIZED NEUTRONS WITH ENERGY OF 0.27 EV

The asymmetry of the rotational effect observed in the fission of heavy nuclei has been extensively studied for decades. These effects were first discovered in ternary fission processes, in a series of experiments at the ILL reactor (Grenoble) with the participation of scientists from Russian and European institutions, and measured for a number of nuclei. Later on, the ROT effect was observed in the emission of fast gamma rays and neutrons in the fission of ^{235}U and ^{233}U nuclei. However, the value of the effect was smaller than the value obtained for α-particles in the ternary fission. All the experiments were carried out with polarized cold neutrons with several spin states (J = 3 and J = 4) where the effect of spin states on the effect is not well known. Therefore, in this work, gamma asymmetry was measured at the resonance energy of 0.27 eV of the ^{235}U nucleus at the POLI experimental facility of the FRM-2 reactor in Garching, Germany. Unlike other energies for which the effect was measured, it was possible to see changing of ROT asymmetry at this energy, where the J = 3 spin state of the ^{235}U nucleus was dominated.

Г.С. Ахмедов

ИЗМЕРЕНИЕ УГЛОВОЙ КОРРЕЛЯЦИИ МГНОВЕННЫХ ГАММА КВАНТОВ И НЕЙТРОНОВ ПРИ ДЕЛЕНИИ ^{235}U ПОЛЯРИЗОВАННЫМИ НЕЙТРОНАМИ С ЭНЕРГИЕЙ 0.27 эВ

Асимметрия эффекта вращения, наблюдаемая при делении тяжелых ядер, широко изучается в течение многих десятилетий. Впервые эти эффекты были обнаружены в процессах тройного деления, в серии экспериментов на реакторе ILL (Гренобль) с участием ученых российских и европейских институтов и измерены для ряда ядер. Позднее ROT эффект наблюдался при испускании быстрых гамма-квантов и нейтронов при делении ядер ^{235}U и ^{233}U. Однако, величина эффекта оказалась меньше величины, полученной для α-частиц в тройном делении. Все эксперименты проводились с поляризованными холодными нейтронами со смешанными спиновыми состояниями (J = 3 и J = 4), где влияние спиновых состояний на эффект недостаточно известно. Поэтому в данной работе гамма-асимметрия была измерена при резонансной энергии 0.27 эВ ядра ^{235}U на экспериментальной установке POLI реактора FRM-2 в Гархинге, Германия. В отличие от других энергий, для которых измерялся эффект, можно было наблюдать изменение ROT асимметрии при этой энергии, где преобладало спиновое состояние J = 3 ядра ^{235}U.

Qəbul olunma tarixi: 28.01.2022

$La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ BİRLƏŞMƏSİNİN KRİSTAL QURULUŞUNUN RENTGENOQRAFİK TƏDQİQİ

R.F. HƏŞİMOV
Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,
Bakı, AZ-1143, H. Cavid küç., 131, Azərbaycan
rovshan.hashimov@physics.science.az

$La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin kristal quruluşu tədqiq edilmişdir. Tədqiqatlar otaq temperaturunda və normal şəraitdə rentgen difraksiyası metodu ilə aparılmışdır. Alınmış rentgen difraksiyası spektri Ritveld metodu ilə Fullprof proqramında analiz edilmiş və kristalloqrafik parametrləri təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin kristal quruluşu Pm-3m fəza qruplu kubik simmetriyalı perovskit quruluşa uyğun gəlir. Qəfəs parametrləri: $a=b=c=3.90704$ Å-dir. Diamond 3.2 proqramında kristal quruluş alınmış və MnO_6 oktaedrik quruluş göstərilmişdir.

Açar sözlər: Rentgen difraksiyası, kristal quruluş, $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$, perovskit.
PACS: 65.40.−b

GİRİŞ

ABO_3 perovskit quruluşa malik olan tərkiblər geniş tədqiq edilən materiallardan hesab edilirlər. Onların böyük maraq doğurmasının səbəbi təbiətdə geniş yayılması və müxtəlif oblastlarda tətbiq edilmə imkanlarının olmasıdır. Bu quruluş ilk dəfə 1839-cu ildə $CaTiO_3$ birləşməsində aşkar edilmişdir [1]. Tədqiqatlar zamanı müəyyən edilmişdir ki, yerin mantiya qatı əsasən $(Mg,Fe)SiO_3$, $CaSiO_3$ və $MgSiO_3$ tərkiblərindən ibarətdir. Perovskit quruluşa malik olan tərkiblərdə müxtəlif fiziki xassələrin alınması məqsədi ilə bir çox qeyri-üzvi birləşmələr də sintez edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, $PbTiO_3$, $BaTiO_3$ tərkiblərində seqnetoelektriklik, pyezoelektriklik müşahidə edilir [2,3].

Müəyyən edilmişdir ki, Mn, Fe, Co və s. maqnit xassələrə malik olan element atomlarının daxil olduqları perovskitlardə ferromaqnit (antiferromaqnit) xassələri müşahidə edilir [4,5]. Bu tərkiblər arasında manqanitlər xüsusi əhəmiyyət kəsb edirlər. Manqanitlər əsasən aşağı temperaturlar oblastında antiferromaqnit xassələrə malik olurlar. Temperaturun qiyməti yüksəldikcə istilik rəqslərinin amplitudunun artması hesabına uzaq maqnit nizamlığı qismən pozulur və buna görə də, maqnit xassələri yox olur. Bu tərkiblərdə maqnit xassələrinin quruluş aspektlərinin tədqiq edilməsi vacibdir. Çünki, alınmış nəticələr əsasında normal şəraitdə və otaq temperaturunda maqnit xassələrə malik olan birləşmələrin sintez edilməsi mümkündür.

Manqanitlərdə kation-kation əvəzləmələri zamanı kristal quruluşda yaranan dəyişikliklər, bir çox yeni fiziki-kimyəvi xassələrin müşahidə edilməsinə imkan verir. La atomlarının qismən Ba atomları ilə əvəz edilməsi ilə, standart metodla sintez edilmiş $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ perovskit birləşməsinin termik xassələri yüksək temperaturlar oblastında tədqiq edilmişdir. Kompleks şəkildə aparılmış TG, DSC, DTG və DTA analizləri nəticəsində yüksək temperaturlarda aparılmış tədqiqatlardan müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmənin termik xassələri: $30 \geq T \geq 220$°C, $220 \geq T \geq 407$°C, $407 \geq T \geq 429$°C, $429 \geq T \geq 500$°C və $500 \leq T \leq 890$°C intervallarında stabil olur. Bu intervallar arasında isə müxtəlif termik keçidlər baş verir. Ən ciddi effekt, mərkəzi piki T = 414°C temperaturda olan faza keçidində qeyd olunmuşdur. Həmin faza keçidinin aktivləşmə enerjisi və sahəsinin enerjisi təyin edilmişdir [6].

La və Ba atomlarının ion radiuslarında yaranmış fərqə görə x konsentrasiyanın müxtəlif qiymətlərində $La_{1-x}Ba_xMnO_3$ bərk məhlullarının kristal quruluşları fərqlənməlidir. Ona görə də, $La_{1-x}Ba_xMnO_3$ sisteminə daxil olan yeni kristalların sintez edilməsi, onların kristal quruluşlarının və müxtəlif fiziki xassələrinin tədqiq edilməsi vacibdir. Təqdim edilən tədqiqat işində, $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin polikristalları sintez edilmiş, alınmış tərkibin kristal quruluşu rentgen difraksiyası metodu ilə otaq temperaturunda və normal şəraitdə tədqiq edilmişdir.

TƏCRÜBƏ

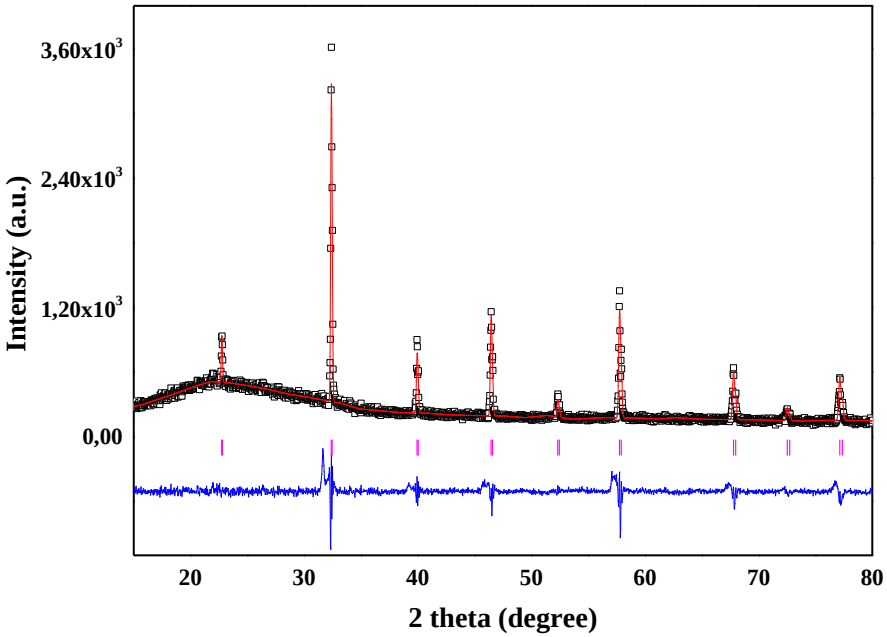
Təqdim edilən işdə, $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsi yüksək təmizliyə malik olan (>99.999%) La_2O_3, Mn_2O_3 və $BaCO_3$ oksidlərindən standart metodla sintez edilmişdir. Sintez prosesindən əvvəl La_2O_3 oksidi 2 saat ərzində 1000°C temperaturda açıq havada qızdırılmış və tərkibindən H_2O və CO_2 molekulları kənarlaşdırılmışdır. Sonrakı mərhələdə oksidlər uyğun miqdarda qarışdırılaraq 20 mm ölçüdə preslənmişdir. Bu şəkildə hazırlanmış material 5 saat ərzində açıq havada 1000°C temperaturda barium karbonatın tam parçalanmasına qədər qızdırılmışdır. Sonra nümunə yenidən həvəngdəstədə əzilərək ovuntu halına salınmış və qarışdırılmışdır. Son mərhələdə nümunə platin altlıq üzərində yerləşdirilərək 10 saat ərzində 1550°C temperaturda açıq havada qızdırılmışdır. Sintez prosesindən sonra nümunə saatda 80°C sürəti ilə soyudulmuşdur.

$La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin kristal quruluşu rentgen difraksiyası metodu ilə 40 kV, 40 mA, λ=1.5406 Å, CuKα şüalanma parametrli D8 Advance (Bruker) difraktometrində otaq temperaturunda tədqiq edilmişdir. Alınmış spektr Ritveld metodu ilə Fullprof proqramında yüksək dəqiqliklə analiz edilmişdir.

NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

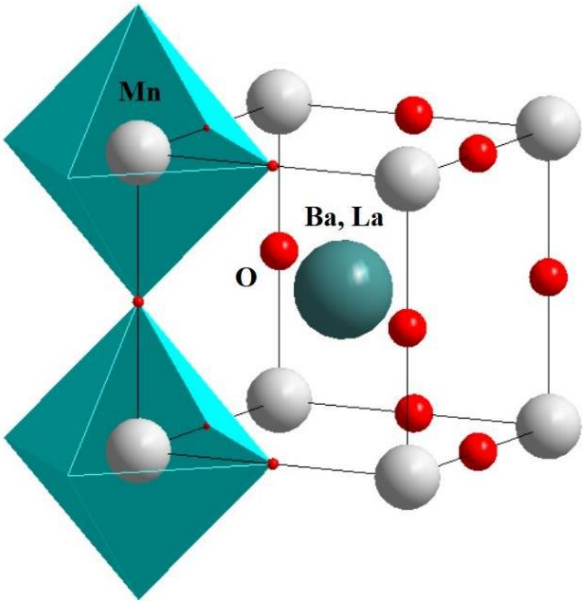
$La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin rentgen difraksiyası spektri şəkil 1-də verilmişdir.

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



Şəkil 1. $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin otaq temperaturunda alınmış rentgen difraksiyası spektri.

$15^o \leq 2\theta \leq 80^o$ bucaq intervalında alınmış rentgen difraksiyası spektrində 9 difraksiya maksimumu müşahidə edilmişdir. Ritveld metodu ilə Fulprof proqramında aparılmış analiz nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, difraksiya maksimumları: (100), (110), (111), (200), (210), (211), (220), (300) və (310) atom müstəvilərinə uyğun gəlir. Bu atom müstəviləri Pm-3m fəza qruplu kubik simmetriyalı perovskit quruluşa uyğun gəlmişdir. Qəfəs parametrlərinin qiymətləri: $a= b = c = 3.90702$ Å müəyyən edilmişdir. Bu qiymət $La_{0.5}Ba_{0.5}MnO_3$ bir qədər kiçikdir ki, o da La və Ba atomlarının ikivalentli halda ion radiusları arasındakı fərqlə əlaqədardır. Müəyyən edilmişdir ki, ikivalentli halda barium atomlarının ion radiusları: $R_{Ba2+} = 1.37$ Å, lantan atomlarının ion radiusları isə: $R_{La2+} = 1.20$ Å olur [7]. Ona görə də, $La_{1-x}Ba_xMnO_3$ birləşmələrində barium atomlarının konsentrasiyası artdıqca qəfəs parametrlərinin qiymətlərində artma müşahidə edilir. Analiz nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, kubik kristal quruluşda Mn atomları: $x/a = 0$, $y/b = 0$, $z/c = 0$, Ba və La atomları: $x/a = 0.5$, $y/b = 0.5$, $z/c = 0.5$, O atomları isə: $x/a = 0.5$, $y/b = 0$, $z/c = 0$ koordinatlarında yerləşirlər. $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin kristal quruluşu şəkil 2-də verilmişdir.



Şəkil 2. $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin kristal quruluşu.

Şəkil 2-dən göründüyü kimi, $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsində Mn atomları O atomları ilə kovalent rabitələr əmələ gətirərək MnO_6 oktaedrləri formalaşdırırlar. Mn atomları bu oktaedrlərin mərkəzində dayanırlar. Ona görə də, otaq temperaturunda bu birləşmədə maqnit xassələrin formalaşması ehtimalı böyükdür. Mn atomlarının maqnit momentlərinin təyin edilməsi üçün neytron difraksiyası tədqiqatlarına ehtiyac vardır. Ba və

La atomları isə eyni kristalloqrafik mövqedə dayanaraq növbələşirlər.

NƏTİCƏ

Ovuntu halında sintez edilmiş $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin kristal quruluşu otaq temperaturunda rentgen difraksiyası metodu ilə tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin kristal quruluşu Pm-3m fəza qruplu kubik simmetriyalı perovskit quruluşa uyğun gəlir. Kristalloqrafik parametrlər: qəfəs parametrləri və atom koordinatları təyin edilmiş, $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin kristal quruluşu qurulmuşdur.

[1] *Ф. Иона, Д. Ширане*. Сегнетоэлектрические кристаллы. Москва, Мир, 1965, 554 с.

[2] *С.Г. Джабаров*. Успехи физика металлов, 2015, 16, с.329-352.

[3] *S.G. Jabarov, D.P. Kozlenko, S.E. Kichanov, A.V. Belushkin, B.N. Savenko, R.Z. Mextieva, C. Lathe*. Physics of the Solid State, 2011, 53, 11, p.2300-2304.

[4] *D.P. Kozlenko, N.T. Dang, S.H. Jabarov, A.A. Belik, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, C. Lathe, L.S. Dubrovinsky, V.Yu. Kazimirov, M.B. Smirnov, B.N. Savenko, A.I. Mammadov, E. Takayama-Muromachi, L.H. Khiem*. Structural polymorphism in multiferroic $BiMnO_3$ at high pressure and temperatures.2014, 585, p.741-747.

[5] *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, N.T. Dang, V.G. Smatrakov, V.V. Eremkin, B.N. Savenko*. Structural, magnetic and vibrational properties of multiferroic $GaFeO_3$ at high pressure, 2016, 684, p.352-358.

[6] *R.F. Həşimov*. $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin termik xassələri, Gənc Tədqiqatçı, 2019, v, 2, s.49-52.

[7] *Л.Т. Бугаенко, С.М. Рябых, А.Л. Бугаенко*. Почти полная система средних кристаллографических радиусов и ее использование для определения потенциалов ионизации, Вестн. Моск. Ун-та, Сер.2. Химия. 2008, 49, 6, с.363-384.

R.F. Hashimov

X-RAY STUDY OF THE CRYSTAL STRUCTURE OF THE COMPOUND $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$

The crystal structure of the $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ compound has been studied. The studies were carried out by X-ray diffraction at room temperature and under normal conditions. The obtained X-ray diffraction spectrum was analyzed by the Rietveld method in the Fullprof program and the crystallographic parameters were determined. It was found that the crystal structure of $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ corresponds to the perovskite structure of the cubic symmetry of the Pm-3m space group. The unit cell parameters correspond to: $a = b = c = 3.90704$ Å. The crystal structure was obtained using the Diamond 3.2 software and the octahedral structure of MnO_6 is shown.

Р.Ф. Гашимов

РЕНТГЕНОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЯ $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$

Исследована кристаллическая структура соединения $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$. Исследования проводились методом рентгеновской дифракции при комнатной температуре и нормальных условиях. Полученный спектр рентгеновской дифракции анализирован методом Ритвельда в программе Fullprof и определены кристаллографические параметры. Установлено, что кристаллическая структура $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ соответствует структуре перовскита кубической симметрии пространственной группы Pm-3m. Параметры элементарной ячейки соответствуют: $a = b = c = 3.90704$ Å. Кристаллическая структура получена с использованием программного обеспечения Diamond 3.2, и показана октаэдрическая структура MnO_6.

Qəbul olunma tarixi: 07.02.2022

BİROXLU KRİSTALLARIN $CuGaS_2$,$CuAlS_2$,$CuInS_2$ PERİODİK STRUKTURLARINDA DÖYÜNƏN CƏRƏYAN

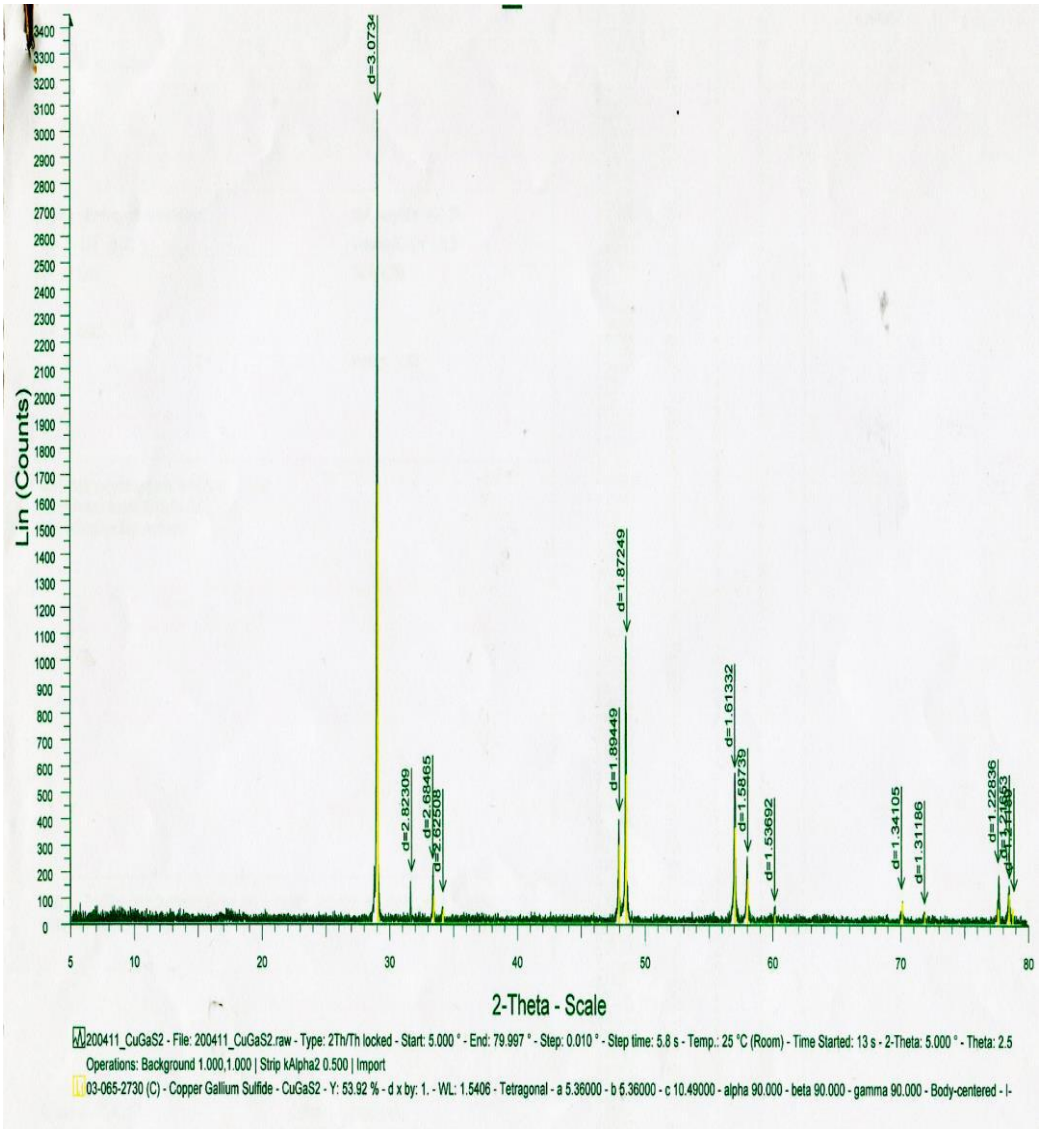
İ. QASIMOĞLU, Q.S. MEHDİYEV, Z. QADİROĞLU, İ.Q. NƏSİBOV, C.İ. HÜSEYNOV, H.M. ƏSGƏROV

Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,
Azərbaycan, Bakı 1143, H.Cavid, 131
E-mail: gasımoglu@yahoo.com

Təqdim olunan işdə matris kimi qəbul edilən $CuGaS_2$, $CuAlS_2$, $CuInS_2$ monokristalları və onların əsasında oksid təbəqəsi olan ikikomponentli dövri strukturlar tədqiq edilmişdir. Alınan nəticələrin hipotetik şərhi verilir.

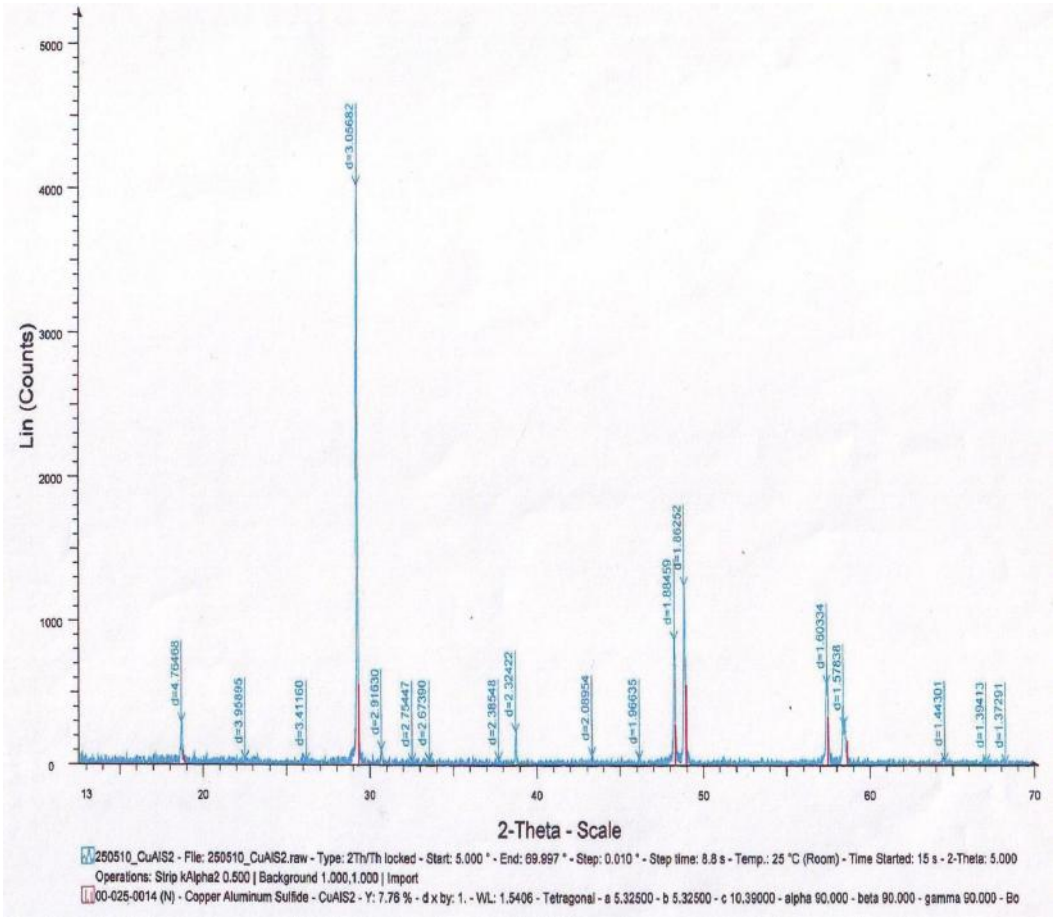
Açar sözlər: Yarımkeçirici, anizotropluq, periodik struktur
Pacs: 61.80.Ed

Son illər tədqiqatçılar tərəfindən almazabənzər quruluşlu yarımkeçiricilərə maraq artmışdır [1]. Həmin qrupa daxil olan birləşmələrin bir qismi $A^{I}B^{III}C_2^{VI}$ ümumi formulu ilə ifadə olunur. Bunlar A^{I} (Cu, Ag), B^{III} (Ga, In, Al), C^{VI} (S, Se, Te) kimi maddələri ifadə edir. Tədqiqata cəlb etdiyimiz obyektlər $CuGaS_2$, $CuAlS_2$, $CuInS_2$ Xan və əməkdaşları tərəfindən rentgen analizi üsulu ilə öyrənilmişdir. Göstərilmişdir ki, bu sinif birləşmələrin demək olar ki, hamısı xalkopirit strukturunda kristallaşır və əksəriyyəti *p*-tip keçiriciliyə malikdir [2]. Alınan maddələrin yarımkeçirici olduğunu müəyyən etmək üçün hər birinin rentgenoqramı çıxarılmışdır (şəkil 1, 2, 3)

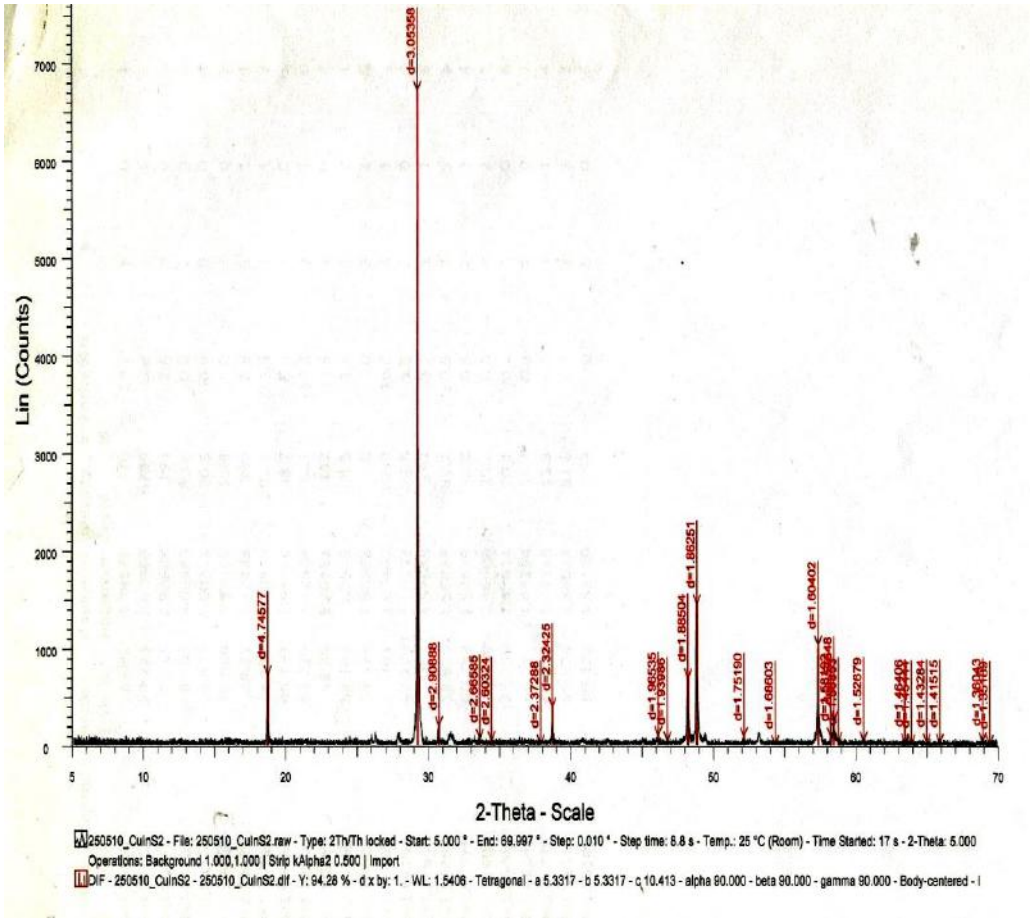


Şəkil 1. $CuGaS_2$ monokristalında rentgen şualarının difraksiyası.

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



Şəkil 2. $CuAlS_2$ monokristalında rentgen şualarının difraksiyası.



Şəkil 3. $CuInS_2$ monokristalında rentgen şualarının difraksiyası.

Bu nümunələrdə güclü ikiqat sınma müşahidə olunmuşdur və bu xassə qeyri-xətti optika üçün xüsusi əhəmiyyətə malikdir [3]. Birləşmələr düzgün zona quruluşuna malikdir və mütləq ekstremumları Brillüen zonasının Γ nöqtəsində yerləşir. $A^{I}B^{III}C_2^{VI}$ şəklində birləşən yarımkeçiricilərin zona quruluşunun ümumi mənzərəsi hörmətli alimimiz F. Həşimzadə tərəfindən tədqiq olunmuşdur[4].

MÖVZUNUN AKTUALLIĞI

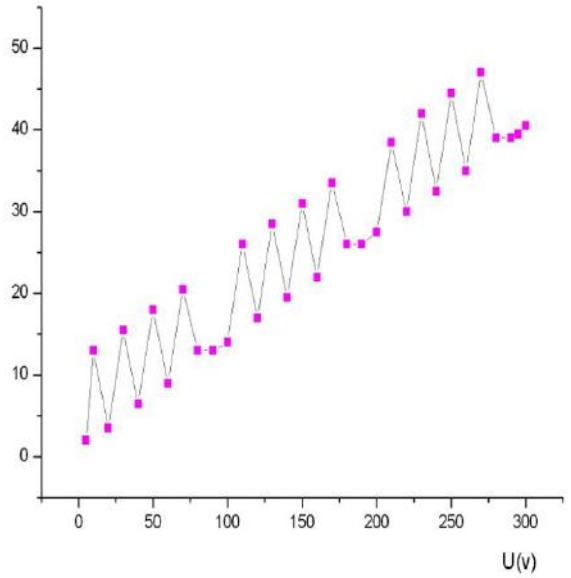
Yeni fiziki xassələrə malik yarımkeçiricilərin alınmasına böyük ehtiyac duyulur. Elektron cihazların təkmilləşdirilməsi üçün yeni texnologiyaların meydana gəlməsi vacibdir. Bircinslı maddələrdən fərqli olaraq anizotrop məddələrdə sərbəst rəqslərin və rezonansların sayının çox olması maddələrin üstün xassələrindən biridir. Kristalların üstün xüsusiyyətlərini nəzərə almaqla müasir mikroelektronika üçün yeni nəticələrin əldə olunacağına inanırıq və mövzunun aktual olduğunu düşünürük.

MƏSƏLƏNİN QOYULUŞU

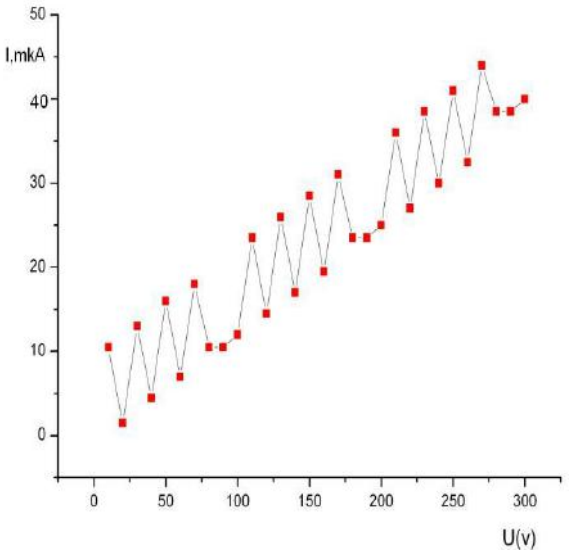
Müasir mikroelektronika bizdən tələb edir ki, tədqiqatlara yeni əlavə parametrlər, qiymətlər, həndəsi ölçülər tədbiq edək. Xarici təsirlər hesabına kristalların səthində yaranan səth dalğalarının xassələrini öyrənməyi qarşımıza məqsəd qoyduq. Üstün cəhət ondan ibarətdir ki, periodik strukturlara malik mühitlər zəif siqnallarda özlərini qeyri-sabit aktiv element kimi aparır. Bu intervallarda xarici təsirlər hesabına yaranan dalğaların fiziki xassələrini tam dəqiqliyi ilə öyrənərək, elektronun kvant sahəsindəki potensial hərəkətinə tədbiq etmək mümkündür.

TƏCRÜBƏNİN APARILMASI

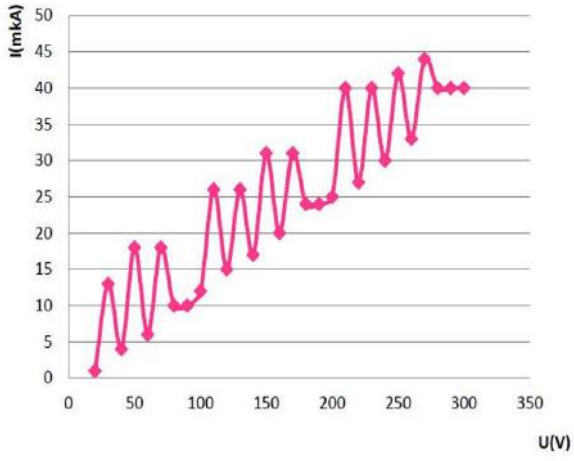
Materiallarda periodik strukturlara xas olan xassələrin mövcudluğunu aydınlaşdırmaq üçün, həmin maddələrin Volt-Amper xarakteristikası çıxarılmalıdır və bu xarakteristikalarda müəyyən şərtlərin ödənib ödənməməsi halına baxılmalıdır. Ona görə, biz nümunəyə sabit mənbədən elektirik sahəsi verməklə, yuxarıda adları çəkilən kristalların hər biri üçün Volt-Amper xarakteristikanı çıxardıq (şəkil 4, 5, 6). Aparılan təcrübələrdən aydın oldu ki, bu materialların xarakteristikalarında mənfi müqavimət müşahidə olundu. Alınan periodik strukturlar özlərini qeyri-xətti aktiv element kimi aparır, amma sonda bu qeyri-xətti dispersiya paketlərinin anizotropluğunda bir qanunauyğunluq müşahidə olunur. Periodik strukturlara kənar təsirlərdən yaranan dalğaların araşdırılması göstərir ki, səthdə yeni tipli dalğalar yaranmışdır. Təcrübə zamanı sabit elektrik sahəsinin artımlarını ifadə edən "addımların" spektrə təsirinə də baxılmışdır. Sahəni sabit olaraq (5-10V) artırmağa davam etdikdə, dalğaların amplitudunun qiymətinin kəskin artdığını görürük. Yəni, nümunəyə verilən xarici sahənin "addımı" 20V olduqda alınan spektr daha dayanıqlı və sabit olur. Biz belə düşünürük ki, addımlar 10V olduqda həyəcanlanmaların sayı və intensivliyi uyğun olaraq artır və əksər atomların əlaqə enerjisi 10eV ətrafındadır. Buradan aydın olur ki, Volt-Amper xarakteristikasını ölçərkən seçilən "addım" tədqiqatın mahiyyətinə uyğun olmalıdır.



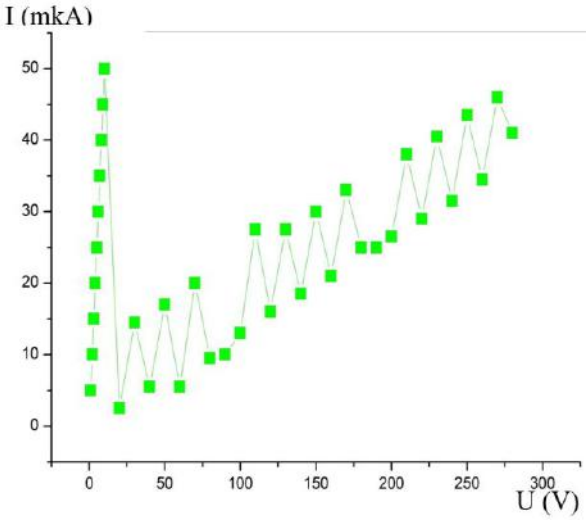
Şəkil 4 $CuGaS_2$ monokristalının Volt- Amper xarakteristikası .*T*=300K



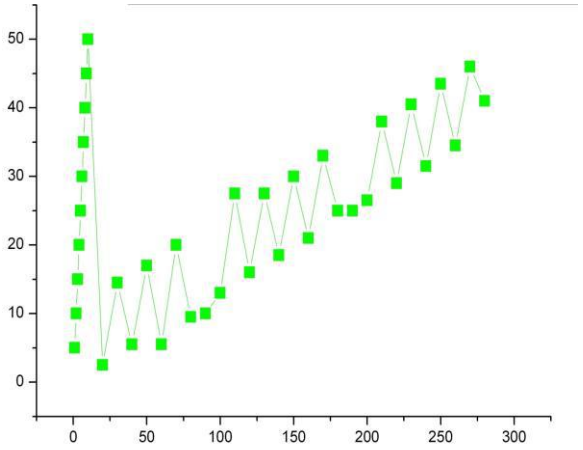
Şəkil 5. $CuAlS_2$ monokristalının Volt- Amper xarakteristikası *T*=300K.



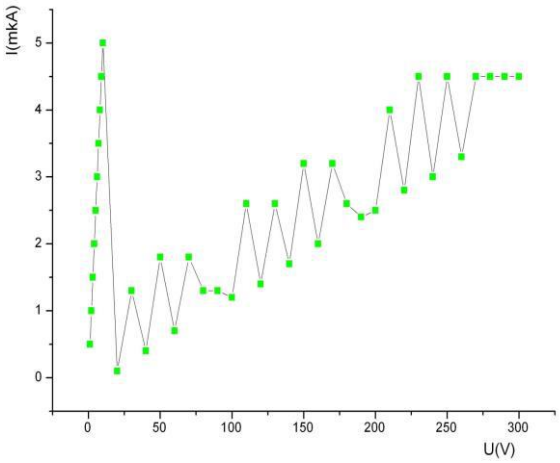
Şəkil 6. $CuInS_2$ monokristalının Volt- Amper xarakteristikası *T*=300K.



Şəkil 7. $CuGaS_2$ monokristalı. γ- şüasının təsirindən sonra (128-qrey doza), Volt-Amper xarakteristikası.



Şəkil 8. $CuAlS_2$ monokristalı. γ- şüasının təsirindən sonra (128 qrey doza), Volt-Amper xarakteristikası.



Şəkil 9. $CuInS_2$ monokristalı. γ-şüasının təsirindən sonra (128 qrey doza), Volt-Amper xarakteristikası

Kristalları zəif qamma dozası ilə şüalandırdıqda rezonansların sayının artdığını görürük (şəkil 7, 8, 9). Bu təcrübələrdə rezonansların baş verməsinin səbəbini qamma şualarının dalğa uzunluqlarının çox kiçik qiymətə malik olmasınıda görürük (o,1Å) ki, bu da periodik strukturların Volt-Amper nəzəriyyəsində deyildiyi kimi, özünü tam doğrultmuş olur (6). Aparılan təcrübələrin təhlili göstərir ki, dalğaların periodik strukturlarda yayılması ilə elektronun potensial sahədəki xassələri tam oxşarlıq təşkil edir. Bu fiziki xassələri ifadə edən riyazi tənliklərin də oxşarlığını ortaya gətirəndə aydın olur ki, zəif dalğa oblastlarında müşahidə etdiyimiz nəticələri elektronun atom ətrafındakı periodik hərəkətinə tədbiq edə bilərik.

ALINAN NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

Yuxarıda deyildiyi kimi, xarici təsirlərdən sonra periodik strukturlarda yaranan dalğaları ifadə edən dispersiya tənlikləri yəni:

$$COS\, k^{-TE} d = COSK_{z1} d1 COSK_{z2} d2 - 1/2(K_{z1}/K_{z2} + K_{z2}/K_{z1})\, SINK_{z1} d_1\, SINK_{z2} d_2 \quad (1)$$

adi dalğa

$$COSK^{-TM}\, d = COSK_{z1} d1 COSK_{z2} d2 - 1/2(K_2K_{z1}/K_1Kz2 + K_1K_{z2}/K_2K_{z1}) SİNK_{z1} d_1 SİNK_{z2} d_2 \quad (2)$$

qeyri adi dalğa ilə elektronun potensial sahədəki xassələrini ifadə edən Kroninq-Penni tənliyi eynilik təşkil edir. Bloxa görə, Şredinger tənliyini periodik potensiallar üçün aşağıdakı kimi yazmaq olar

$$\Psi_k = U_k(r) e^{İkr} \quad (3)$$

(3) tənliyindəki $e^{İkr}$ ifadəsi kristal qəfəsin periodu ilə, modullaşmış müstəvi funksiyadır və tənliyin həlli Blox funksiyası adlanır. Funksiyanın, riyazi hesablamaların dərinliyinə getmədən təqdim olunan sonuncu ifadəsi bu tənliklərin oxşar məna daşıdığını göstərir. Tənliyin qaçan dalğalar üçün həlli aşağıdakı kimi yazılır.

$$\Psi = U_K(X) e^{İKX} \quad (4)$$

sadələşdirmələrdən sonra tənlik aşağıdakı şəklini alır.

$$PSİN\, \alpha a/\alpha a + COS\alpha a = COSka \quad (5)$$

(4)-bərabərliyinin ifadə etdiyi dalğa funksiyası, (5)-tənliyinin həlli olsun deyə bu tənlik α-ya görə həll olunmalıdır. Tənliyin sağ tərəfi +1və -1 intervalında qiymətlər aldığı üçün αa-kəmiyyəti bu qiymətləri sol tərəf bu intervaldan kənara çıxa bilmədiyi halda ala bilər. Tənliyin həlli üçün

$$\alpha = (2mE/h^2)^{1/2} \quad (6)$$

ifadəsi enerji üçün(E) lazım olan qiymətləri verir. αa-nın mumkün olan sərhəd şərtləri K-dalğa vektoru üçün $n\pi$-yə uyğun gəlir. Əgər (5)-tənliyindəki P-kəmiyyəti kiçik qiymətlər alarsa onda bağlı zona yox olur. Əgər $P=\infty$ olarsa, onda açıq zona genişlənmiş olur və energetik spektr diskret olur (5). Fiziki proseslərin riyazi tənliklərdəki ifadələrindən belə nəticəyə gəlirik ki, laylı periodik strukturlarda yeni tip səth dalğalarının yarandığını müşahidə edilir. Bu dalğalar periodik strukturların kənarından əks olunaraq ziqzaq formalı dalğa paketi yaradır. Biz bu cür döyünən cərəyanları, Volt-Amper spektrlərində müşahidə edirik. Bu dalğaların kvant mexanikasındakı analoqu olaraq Tamm səviyyələrini göstərə bilərik.

YEKUN NƏTİCƏ

Nəzəri və təcrübi nəticələrə əsaslanaraq deyə bilərik ki, hər bir period qurtardıqda, döyünən cərəyanı ifadə edən elektron dalğalarının intensivliyi sifra yaxınlaşır. Periodik mühitlərdə bu dalğaların yaranmasına səbəb olan rəqslər mühitin dərinliklərinə nüfuz edə bilmir. Ona görə, xarici təsirlər zamanı həyəcanlanmanı ifadə edən dalğaların amplidudası, səthdən aşağıya doğru hər period üçün eksponensial olaraq azalmağa başlayır. Tədqiqata cəlb etdiyimiz maddələr üçqat birləşmələrdən ibarət olduqları üçün üç dalğa paketindən ibarət olan mənzərəni aydın şəkildə müşahidə edirik. Periodik mühitlər elə xüsusiyyətlərə malikdirlər ki, onların fiziki parametrləri tərkiblərindəki maddələrdən asılıdır. Ona görə də, mühitin həndəsi ölçülərini dəyişməklə rəqslərin udulma dərinliyini, layların kənarında dalğaların lokallaşmasını, dalğaların faza sürətini və dalğaların sönmə dərinliyini idarə etmək mümkündür. Yuxarıda sadalanan faktlar onu deməyə əsas verir ki, yarımkeçirici quruluşların fiziki xassələrini idarə emək üçün geniş imkanlar əldə etmiş oluruq. Təkzib olunmaz faktlar bir daha göstərir ki, xalkopirit struktura malik yarımkeçirici kristalların $CuGaS_2$, $CuAlS_2$, $CuInS_2$ öyrənilməsi tədbiqi mikroelektronika üçün çox böyük imkanlar vəd edir.

[1] *D.Wole, R.Lerner, G.Müller*. Crystal Research and Texnologu. 1996, volme 31, p. 317-320.

[2] *İ.Qasımoğlu*. Azerbaijcan journal of Physics, XX, 2014, N3, sektion: Az, p25-27.

[3] Л.И. Бергер, Ф.Э. Балыневская. Неорганические материалы. 1966, том III, N8, стр.1514-1515.

[4] *Ф.М. Гашимзаде*. ФТТ, 1963, 5, с. 1199; *А.А. Вайнолин, Ф.М. Гашимзаде, Н.А.Горюнова, Ф.П. Касаманлы, Д.Н. Наследов, Э.О. Османов, Ю.В. Рудь*. Изв.А.Н.сср,сер. Физ.,1964,т.28, ст.1085.

[5] *Ч. Киттел*. Введение в физику твердого тела. 695 ст.

[6] *İ. Qasımoğlu*. Azerbaijan journal of Physics Fizika, Section: Az, 2013, volume XIX, N1, p. 19-21.

I. Gasymoglu, G.S. Mehdiyev, Z. Gadiroglu, I.Q. Nasibov, C.I. Huseinov, G.M. Askerov

CURRENT OSCILLATIONS IN PERIODIC STRUCTURES OF UNIAXIAL $CuGaS_2$, $CuAlS_2$, $CuInS_2$ CRYSTALS

In this work single crystals $CuGaS_2$, $CuAlS_2$, $CuInS_2$ accepted as matrices and two-component periodic structures with an oxide layer based on them were studied. A hypothetical interpretation of the obtained results is given.

И. Гасымоглу, Г.С. Мехтиев, З. Гадироглу, И.Г. Насибов, С.И. Гусейнов, Г.М. Аскеров.

ОСЦИЛЛЯЦИЯ ТОКА В ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ ОДНООСНЫХ КРИСТАЛЛОВ $CuGaS_2$, $CuAlS_2$, $CuInS_2$

В работе исследовались монокристаллы $CuGaS_2$, $CuAlS_2$, $CuInS_2$, принятые в качестве матриц и двухкомпонентные периодические структуры с оксидным слоем на их основе. Дана предположительная интерпретация полученных результатов.

Qəbul olunma tarixi: 15.02.2022

ZnSe-NİN STRUKTUR VƏ ELEKTRON XASSƏLƏRİNİN LSDA VƏ LSDA+U METODU İLƏ TƏMƏL PRİNSİPLƏRDƏN TƏDQİQİ

V.N. CƏFƏROVA
Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,
Az 1143, Bakı, H. Cavid pr., 131
vcafarova@beu.edu.az

Atomistic ToolKit proqram paketi istifadə olunmaqla Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi əsasında ZnSe kristalının struktur və elektron xassələri tədqiq edilmişdir. Birləşmənin primitiv özəyini təşkil edən atomların tarazlıq vəziyyəti müəyyən edilmiş və struktur parametrləri hesablanmışdır. Brillüen zonasının simmetrik nöqtələri üzrə zona quruluşu və hal sıxlığı mənzərələri təyin edilmiş, Hubbard *U* düzəlişi tətbiq olunmaqla qadagan zolağının eni (2.7 eV, *T*=300 K) məlum eksperimental nəticəyə uyğun (2.70 eV, *T*=295 K; 2.763 eV, *T*=273 K) qiymətləndirilmişdir. Hesablamalarda elektron-ion qarşılıqlı təsiri normanıqoruyan Fritz-Haber-Institute ion psevdopotensialı ilə nəzərə alınmışdır. Birləşmə üçün təməl prinsiplərdən hesablanmış zona quruluşu və hal sıxlığı mənzərələrinə əsasən müəyyən olunmuşdur ki, valent zonanın tavanı və keçirici zonanın minimumu Brillüen zonasının mərkəzi Γ simmetrik nöqtəsində yerləşir və beləliklə, ZnSe kristalının fundamental udma kənarı düz keçidlərlə formalaşır.

Açarsözlər: ZnSe, Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi (DFT), Lokal Sıxlıq Yaxınlaşması (LDA), qəfəs parametri, zona quruluşu.
UOT: 538.915

GİRİŞ

ZnSe kristalı II-VI qrup yarımkeçirici materiallar sinfinə aid olub, iki müxtəlif strukturda kristallaşırlar: heksaqonal vürsit və səthə mərkəzləşmiş kubik kristallar. Təqdim olunan işdəki hesablamalar heksaqonal ZnSe kristalı üçün yerinə yetirilmişdir. ZnSe yarımkeçiricisinin tədqiqat obyekti olaraq seçilməsi bu birləşmənin geniş texniki tətbiq imkanları ilə bağlıdır [1, 2]. Belə ki, birləşmə mavi-işıqsaçan diodların, qısa dalğa uzunluqlu lazerlərin, foto detektorların, günəş batareyalarının, sensorların, infraqırmızı pəncərələrin, fotovoltaik qurğuların istehsalında geniş tətbiq olunur.

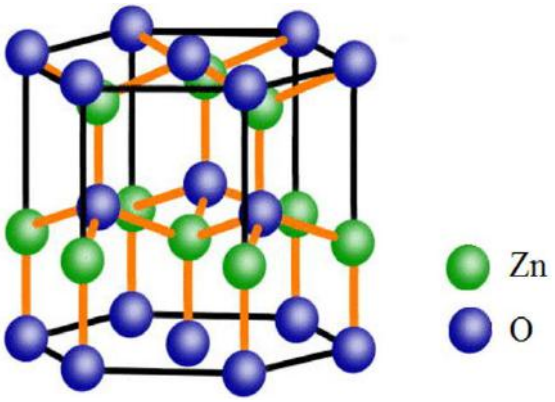
HESABLAMA METODU

Nəzəri tədqiqat işində Atomistic ToolKit (ATK) (http://quantumwise.com/) program paketi istifadə olunmaqla, Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi (DFT) [3] əsasında Lokal Spin Sıxlıq Yaxınlaşması (LDA) [4] və Hubbard *U* [5] metodları ilə ZnSe-in struktur və elektron xassələri tədqiq edilmişdir. Hesablamalarda elektron-ion qarşılıqlı təsiri normanı qoruyan Fritz-Haber-Institute ion psevdopotensialı [6] ilə nəzərə alınmışdır. Birləşmənin primitiv özəyini təşkil edən atomların tarazlıq vəziyyəti təməl prinsiplərdən hesablanmış, buradan kristal quruluş və qəfəs parametrləri təyin edilmişdir. Bundan sonra Brillüen zonası (BZ) üzrə zona quruluşu və hal sıxlığı hesablanmış, qadagan zolağın eni qiymətləndirilmişdir. BZ üzrə inteqrallama Monkhorst-Pack sxemi [7] üzrə, 7x7x7 *k*-nöqtə istifadə olunmaqla, xüsusi nöqtələr üzrə cəmləmə ilə əvəz olunmuşdur. Korrelyasiya effektləri Ceperley-Alder-Perdew-Zunger [8] sxemi üzrə nəzərə alınmışdır. Baxılan halda kristalın strukturunun optimallaşdırılması zamanı atomlararası qarşılıqlı təsir qüvvəsinin maksimal qiyməti 0.001eV/Å, mexaniki gərginlik tenzorunun maksimal qiyməti isə 0.001eV/Å^3-dan kiçik olana qədər, yəni tarazlıq quruluş parametrlərinə gətirilənə qədər optimallaşdırma proseduru davam etdirilmişdir. Dalğa funksiyalarının ayrılışında kinetik enerjinin maksimal qiyməti 75 Ha olmuşdur.

Qeyd edək ki, işdə birləşmənin qadağan zolağının eninin eksperimentdən məlum nəticəyə uyğun alınması məqsədilə Hubbard *U* yarıempirik düzəlişindən istifadə olunmuşdur: Zn 3*d*- halı üçün 4.5 eV və Se 4*p*- halı üçün 3.5eV.

NƏTİCƏ VƏ MÜZAKİRƏ
ZnSe-İN STRUKTUR XASSƏLƏRİ

Tədqiq edilən ZnSe heksaqonal birləşməsi C_{6v}^4 simmetriyasına, P6$_3$mc fəza qrupuna malik olub, vürsit strukturda kristallaşır [9]. Strukturda hər bir Zn atomu təpələrində dörd ədəd Se atomu olan düzgün tetraedrin mərkəzində yerləşir. Belə ki, Zn (0, 0, 0) və (1/3, 2/3, 0.5), Se (0, 0, 0.3408) və (1/3, 2/3, 0.8408) [10] atom koordinatlarını tuturlar. Əksər II-VI qrup yarımkeçiricilərdə olduğu kimi, bu birləşmənin kristal quruluşu ion rabitəsi (Zn^{2+}-Se^{2-}) hesabına yaranır. ZnSe heksaqonal birləşməsinin kristal quruluşu şəkil 1-də verilmişdir. İlkin strukturun qurulmasında eksperimental qəfəs parametrlərindən və atom koordinatlarından istifadə olunmuşdur. Qeyd edək ki, bütün hesablamalarda struktur üçün optimallaşdırma proseduru yerinə yetirilmişdir.



Şəkil 1. Heksaqonal ZnSe birləşməsinin kristal quruluşu.

ZnSe kristalının tam enerjisinin təməl prinsiplərdən hesablanması Funksional Sıxlıq Həyəcanlaşma Nəzəriyyəsinin [3] LSDA [4] və LSDA+U [5] metodları

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

çərçivəsində yerinə yetirilmişdir. Cədvəl 1-də qəfəs parametrlərinin [11] işindən götürülmüş eksperimental qiymətləri istifadə olunmaqla hesablanmış tam enerji və onun komponentləri (eV enerji vahidlərində) verilmişdir.

Hesablanmış kristal struktura əsasən müəyyən olunmuşdur ki, ZnSe-in özəyini təşkil edən Zn və Se atomları arasındakı rabitənin uzunluğu 2.39 Å, Zn-Zn və ya Se-Se rabitəsinin uzunluğu isə 3.91 Å -dir. Zn-Se məsafəsi üçün alınmış nəticə məlum nəzəri (2.38 Å) [12] və eksperimental (2.20 Å) [13] işlərində alınmış qiymətlərlə yaxşı uyğunluq təşkil edir. ZnSe kristalı üçün təməl prinsiplərdən təyin edilmiş qəfəs sabitlərinin qiymətləri və müqayisə üçün bu parametrlərin əvvəlki işlərdən məlum qiymətləri ilə birlikdə cədvəl 2-də verilmişdir. Qeyd edək ki, strukturun qurulmasında təməl parametrlər kimi [15] işində verilmiş atom koordinatlarından istifadə edilmişdir.

Cədvəl 1.

ZnSe üçün hesablanmış tam enerji və onun komponentləri.

Tam enerji və onun komponentləri (eV)	Istifadə olunan metod	
	LSDA	LSDA+U
Kinetik enerji	3039.26247	3059.60886
Mübadilə-korelyasiya enerjisi	-1165.48481	-1167.48504
Elektrostatik enerji	-5832.31884	-5849.88077
Hubbard enerji	-	3.88614
Tam enerji	-3953.54118	-3953.87080

Cədvəl 2.

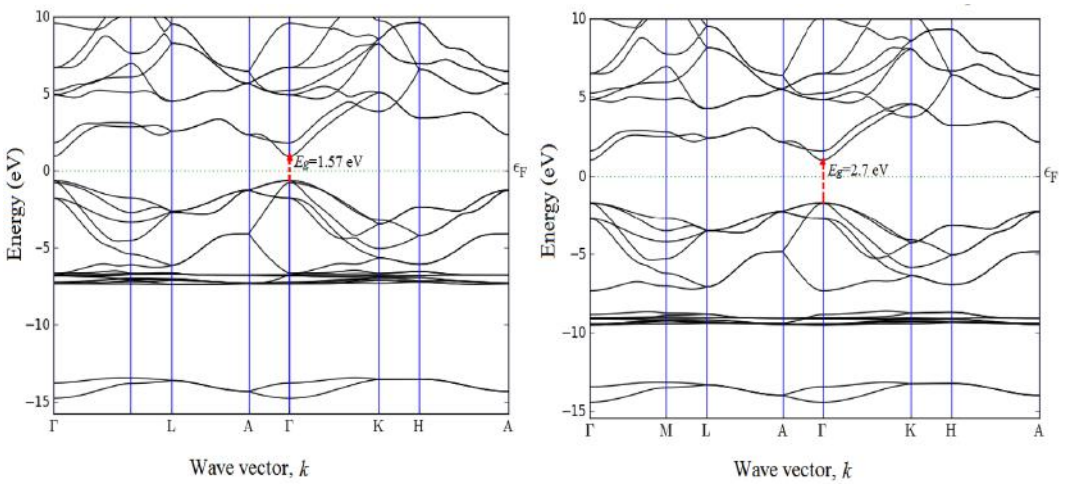
ZnSe-in DFT-LSDA və LSDA+U metodları ilə təyin edilmiş struktur parametrləri.

a (Å)	*c* (Å)	*c/a*	*u*	Ədəbiyyat
3.904	6.424	1.645	0.385	LSDA, FHI
3.918	6.394	1.632	0.385	LSDA+U, FHI
3.875	6.325	1.632	0.379	MGGA, FHI [14]
3.750	6.138	1.637	0.379	MGGA, HGH [15]
3.974	6.506	1.637	0.375	Eksp.[11]
4.003	6.540	1.634	-	Eksp.[16]
3.996	6.55	1.639	-	Eksp.[17]

ZnSe-in quruluş parametrləri üçün LSDA və LSDA+U metodları ilə hesablamalardan uyğun olaraq a=3.904 Å, c=6.424 Å və a=3.918 Å, c=6.394 Å və daxili parametr üçün isə u=0.385 alınmışdır ki, bu qiymətlər məlum nəzəri [14, 15] və eksperimental nəticələrə [11, 16, 17] uyğundur.

ZnSe-in ELEKTRON XASSƏLƏRİ

ZnSe-nin zona quruluşu hesablamalarına aid məlum nəzəri işlərin tədqiqi göstərir ki, əksər nəzəri işlərdə birləşmənin qadağan zolağının eni düzgün qiymətləndirilməmişdir. Belə ki, qadağan zolağının eni üçün [18] nəzəri işində GGA metodu ilə 1.15 eV və digər nəzəri işlərdə [19, 20] isə uyğun olaraq 2.2 və 1.85 eV alınmışdır ki, bu da eksperimentdən məlum nəticələrlə (eksp.: 2.70eV (T=295K) [21]; 2.763 eV (T=273 K) [22]) müqayisədə çox kiçikdir.



Şəkil 2. ZnSe vürsit kristalının LSDA(solda) və LSDA+U (sağda) metodları ilə hesablanmış zona quruluşları.

İşdə LSDA və LSDA+U tədqiqat metodundan istifadə etməklə ZnSe-in elektron xassələri təməl prinsiplərdən tədqiq edilmiş, birləşmənin qadağan zolağının eni qiymətləndirilmişdir. ZnSe vürsit struktur üçün DFT metodu və normanı qoruyan FHI ion psevdopotensialı ilə hesablamalardan alınmış zona quruluşu mənzərələri uyğun olaraq şəkil 2-də verilmişdir. Şəkillərdə Fermi səviyyəsi qırıq xətlərlə göstərilmişdir. DFT-LSDA ilə hesablamadan T=300 K temperaturda ZnSe-in qadağan zolağının eni üçün 1.57 eV alınmışdır ki, bu da məlum eksperimental qiymətlərdən çox aşağı nəticədir. Qadağan zolağın eninin eksperimental nəticələrə [21, 22] yaxın alınması məqsədilə Hubbard U yarı-empirik düzəlişindən istifadə olunmuşdur. Beləliklə, LSDA+U metodu ilə ZnSe-in qadağan zolağının eni üçün 2.7 eV (eksp.: 2.70 eV (T=295K) [21]; 2.763 eV (T=273K) [22]) alınmışdır ki, bu da məlum eksperimental nəticələrlə çox yaxşı uyğunluq təşkil edir.

ZnSe birləşməsi üçün LSDA+U metodu ilə hesablanmış zona quruluşu mənzərəsinə əsasən valent zona quruluşunu əsasən üç qrupa ayırmaq mümkündür. Birinci qrup (-14.4÷-13.4) eV enerji oblastını əhatə etməklə,əsasən selenin 4*s* hallarından yaranır. İkinci qrup valent enerji zolağı (-9.53÷-8.84) eV isə sinkin 3*d* enerji səviyyələrindən ibarətdir. Yuxarı valent zonaları (-7.3÷-1.7) eV enerji aralığını əhatə etməklə əsasən selenin 4*p* hallarından yaranır.Valent zonanın tavanı və keçirici zonanın dibi əsasən selenin 4*p* və sinkin 4*s* hallarından təşkil olunur. Beləliklə, ZnSe-in təməl prinsiplərdən hesablanmış zona quruluşlarına əsasən valent zonasının maksimumu və keçirici zonasının minimumu Brillüen zonasının mərkəzində yerləşir.

NƏTİCƏ

İşdə Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsinə əsaslanmaqla LSDA və LSDA+U yaxınlaşmalarından istifadə edərək ZnSe heksaqonal birləşməsinin struktur və elektron xassələri tədqiq edilmişdir. ZnSe-in Hubbard U düzəlişi ilə hesablanmış zona quruluşuna əsasən təyin edilmiş qadağan zolağının eni (E_g=2.7 eV) məlum eksperimental işlərin nəticələrilə (E_g=2.70; 2.763 eV) çox yaxşı uyğunluq təşkil edir. Təməl prinsiplərdən hesablanmış zona quruluşu mənzərələrinə əsasən müəyyən olunmuşdur ki, tədqiq edilən ZnSe heksaqonal kristalnın qadağan zolağı Brillüen zonasının mərkəzi Γ (0.0, 0.0, 0.0) simmetrik nöqtəsində yerləşir və birləşmə düzkeçidli yarımkeçiricilər qrupuna aiddir.

[1] *G.F. Neumark, R.M. Park, J.M. Depuydt,* Physics Today, 1994, v.47,p.26.

[2] *H. Karzel et al.*.Physical Review B, 1996, v. 53, p.11425.

[3] *P. Hohenberg, W. Khon.* Phys. Rev. B, 1964, v.136, p.B864.

[4] *R.G. Parr and W. Yang,* Oxford University Press, New York, Oxford, IX, 1989, 333 p.

[5] *M. Cococcioni and S. de Gironcoli*. Phys. Rev. B 2005, v.71, p. 035105-1.

[6] *F.Martin, S.Matthias*. Comput. Phys. Commun., 1999, v. 119, p. 67.

[7] *H.J. Monkhorst, J.D. Pack.* Phys. Rev. B, 1976, v.13, p.5188.

[8] *J.Perdew, A.Zunger.* Phys. Rev. B, 1981, v. 23, p. 5048.

[9] *S.G. Alghamdi, A.Z. Alzahrani.* Middle-East J. of Sci.Research, 2013, v. 13, p.1144.

[10] *R.W.G. Wyckoff,* Crystal Structures 1963, v.1, p.85.

[11] *C.Y.Yeh, Z.W.Lu, S.Froyen, A.Zunger.* Phys. Rev. B, 1992, v. 46, p. 10086.

[12] *X.L.Chen, B.J. Huang, Y. Feng, P.J. Wang, C.W. Zhang and P. Li,*RSC Adv., 2015, v.5, p.106227.

[13] *H. Park, H. Chung and W. Kim.* Mater. Lett., 2013, v.99 p.172.

[14] *V.N. Cəfərova.* AMEA Xəbərləri, 2021, v. XLI, №2, p.121.

[15] *V.N. Cəfərova,* AJP Fizika, 2021, c. XXVII, №2, s.49.

[16] *W.M. Yim and E.J. Stofko*. J. Electrochem. Soc. Solid-State Sci. Technol., 1972, v.119, p.381.

[17] *P. Kumar and K. Singh*. J. Optoelectron. and Biomed. Mater., 2009, v.1, p. 59.

[18] *S. Dai, G. Feng, Y. Zhang, L. Deng, H. Zhang, S. Zhou,* Results in Physics, 2018, v.8, p.628.

[19] *I.Khan, I.Ahmad, H.A.R.Aliabad, M.Maqbool*. Materials Today: Proc., 2015, v.2, p.5122.

[20] *C.C. Chen and H.C. Wu*. Materials, 2016, v.9, p.164.

[21] *D.Theis.* Physica Status Solidi (b), 1977, v.79, p.125.

[22] *W.Y.Liang and A.D.Yoffe*. Mathem. and Phys. Sciences, 1967, v. 300, p. 326.

V.N. Jafarova

AB INITIO STUDY OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF ZnSe WITHIN LSDA AND LSDA+U METHODS

The structural and electronic properties of ZnSe crystal were studied by DFT within LSDA and LSDA+U methods using Atomistix ToolKit program software. The electron-ion interactions were treated by the norm-concerning Fritz-Haber-Institute pseudopotential. The PZ exchange-correlation functional and DZP basis sets were used in resent calculations. First-principle studied reveal that the valence band maximum and conduction band minimum located at the Γ (0, 0, 0) symmetric point.

В.Н. Джафарова

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ZnSe ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ С МЕТОДАМИ LSDA И LSDA+U

Представлены результаты теоретических исследований структурных и электронных свойств ZnSe.Основные расчеты выполнены с использованием программного пакета Atomistix ToolKit. Для описания структурных и электронных свойств применялись, теория функционала электронной плотности в рамках LSDA и LSDA+U приближениии использовались обменно-корреляционный функционал PZ и базисные наборы DZP. Исследования из первых принципов показывают, что в обычных условиях максимум валентной зоны и минимум зоны проводимости расположены в точке симметрии Γ (0, 0, 0).

Qəbul olunma tarixi: 17.02.2022

KİMYƏVİ ÇÖKDÜRMƏ YOLU İLƏ ALINMIŞ PbSe NAZİK TƏBƏQƏSİNƏ VƏ NARIN TOZUNA TRİETANOLAMİN KOMPONENTİNİN TƏSİRİ

S.N. YASİNOVA

AMEA Naxçıvan bölməsi Təbii Ehtiyatlar İnstitutu, Naxçıvan, Azərbaycan
Heydər Əliyev prospekti 35, Naxçıvan şəhəri, AZ7000.
sara.novruzova@yahoo.com

Kimyəvi çökdürmə yolu ilə PbSe nazik təbəqəsi və narın tozu trietanolamin komponenti olan və olmayan məhlulda alınmışdır. PbSe-nin narın tozları qurudulmuş, rentgen spektri çəkilmiş, strukturu öyrənilmişdir.Trietanolamin komponentli və trietanolamin komponentsiz məhlulda alınmış narın tozların Rentgen spektrləri müqayisə olunmuş və məlum olmuşdur ki, rentgen spektrlərinin pikləri uyğun yerləşmiş və intensivlikləri PbSe standartları ilə üst-üstə düşmüşdür. Trietanolamin komponenti olan mühitdə PbSe nazik təbəqəsində,trietanolamin komponenti olmayan mühitdə isə PbSe-nin narın tozunda nanostruktur müşahidə olunmuş və onların nanoçubuqlardan ibarət olduğu göstərilmişdir.

Açar sözlər: kimyəvi çökdürmə, nazik təbəqə, narın toz, rentgen spektri, trietanolamin komponenti, nanostruktur, nanoçubuqlar.
PACS: 61.46.Fg, 71.45.Gm, 71.20.Tx.

GİRİŞ

Qurğuşun duzları kimi tanınan PbS, PbSe, və PbTe yarımkeçirici birləşmələr həm özlərinin geniş texnoloji tətbiqinə görə, həm də maraqlı və qeyri-adi fiziki xassələrinə görə son onilliklər ərzində ən çox öyrənilən birləşmələrdəndir. PbX birləşmələrinin belə geniş şəkildə öyrənilməsinin bir səbəbi də digər yarımkeçiricilərdən fərqli olaraq onların temperatur əmsallarının müsbət olmalarıdır (məsələn, PbSe üçün $\beta = 5{,}1 \cdot 10^{-4}$ eV/K) [1]. Qeyd etmək lazımdır ki, PbX sistemləri CdX xalkogenid ailəsi (CdS, CdSe, CdTe) ilə birlikdə yeni fiziki xassələrə malik heterogen nanokristalların alınmasında istifadə olunur [11-12].

Onlardan infraqırmızı oblastda işləyən detektorlar, fotomüqavimətlər, fotoşüalandırıcıların hazırlanmasında, fotovoltatikada və digər optoelektron qurğularda geniş istifadə olunur.

Qurğuşun selenid birləşməsi Brillüen zonasının *L*-nöqtəsində dar enerji zolağına malikdir (0,28 eV), dielektrik sabitinin yüksək və Bor-eksiton radiusunun böyük olması ilə xarakterizə olunur.

PbSe nazik təbəqələrinin alınmasında kimyəvi çökdürmə [2-4], elektrolitik yolla çökdürmə [8], atom epitaksiyası [9], fotokimyəvi [5], impuls lazer çökdürmə [6] vakuum tozlandırma [7] və s. üsullardan istifadə olunur. Bunlardan kimyəvi çökdürmə üsulu daha geniş istifadə olunur, çünki bu üsul ucuz və texnoloji cəhətdən əlverişlidir və bu üsulla alınan təbəqələr keyfiyyətliliyi ilə seçilir.

TƏDQİQAT METODU

Məqalədə PbSe nazik təbəqəsinin kimyəvi çökdürmə yolu ilə trietanolamin komponentli və trietanolamin komponentsiz məhlulda alınmasından bəhs edilir. Bunun üçün istifadə olunan məhlul aşağıdakı qaydada məhlulların hər birindən eyni qədər (həcm ölçüsü ilə) götürülməklə hazırlanır: qurğuşun asetat $Pb(CH_3COO)_2$ - 0,07 M; natrium hidroksid (NaOH)-0,3 M; trietanolamin $N(CH_2CH_2OH)_3$-0,06 M; natrium selenosulfat Na_2SSeO_3-0,17 M. Məhlula selen komponentinin daxil olunması üçün istifadə olunan natrium selenosulfat məhlulu 0,425 q. metal selen tozu və 1,245q. natrium sulfidin 100 ml distillə suyunda 90°C-də əks soyuducuda 7 saat müddətində qaynadılması yolu ilə alınmışdır [10].

Kimyəvi çökdürmə prosesi 60 millilitrlik laboratoriya stəkanının içərisində 40°C-də aparılmışdır. Məhlulun içərisinə əvvəlcədən şaquli vəziyyətdə şüşə altlıq yerləşdirilir və bütün proses müddətində məhlul maqnit qarışdırıcı ilə daima qarışdırılır. 20 dəqiqədən sonra şüşə altlıq məhluldan çıxarılır və distillə edilmiş suda yuyularaq qurudulur. Bu prosesdən sonra şüşə altlıq üzərində və istifadə olunan laboratoriya stəkanının divarlarında tünd qəhvəyi rəngli, yaxşı adgeziyaya malik, bircins nazik təbəqə alınır.

PbS nazik təbəqəsinin və narın tozunun trietanolamin komponentsiz məhlulda alındığını [3] nəzərə alaraq həmin metodu PbSe nazik təbəqəsinin, narın tozunun alınmasına tətbiq edərək trietanolamin komponentsiz şəraitdə və eyni komponentlərlə həmin temperaturda PbSe narın tozu alınmış və göstərilmişdir ki, trietanolamin komponentsiz məhlulda PbSe təbəqəsi çox nazik alınır.

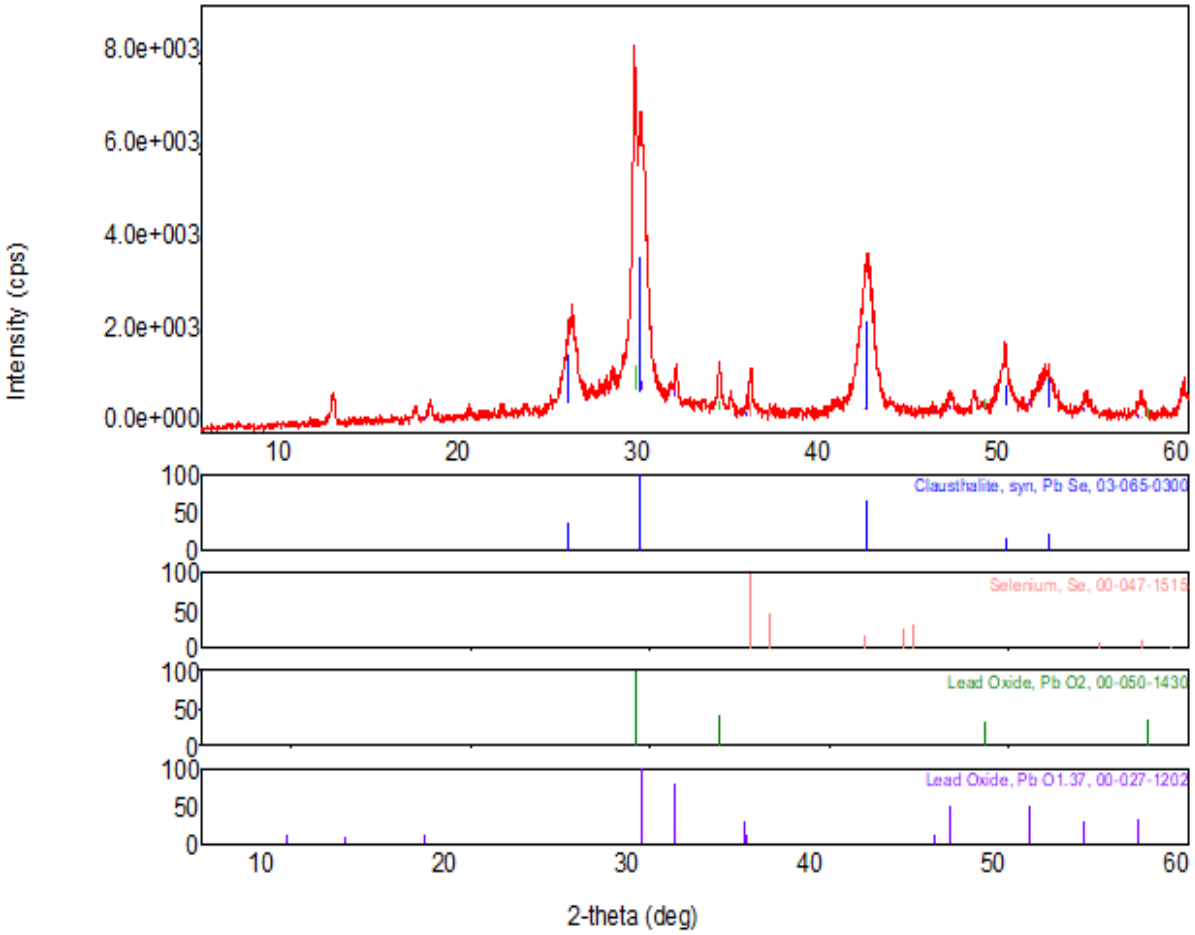
Alınmış maddənin rentgen spektri ilə həmin maddənin spektrinin piklərinin üst-üstə düşməsi alınmış maddənin təmizliyinin sübutudur.

Trietanolamin komponentli (dördkomponentli) və trietanolamin komponentsiz (üçkomponentli) məhlulda alınmış PbSe narın tozunun Pentgen spektri Miniflex 600 markalı rentgen cihazında, morfoloji və mikroskopik quruluşu isə "TM-3000" Hitachi elektron mikroskopunda çəkilmişdir.

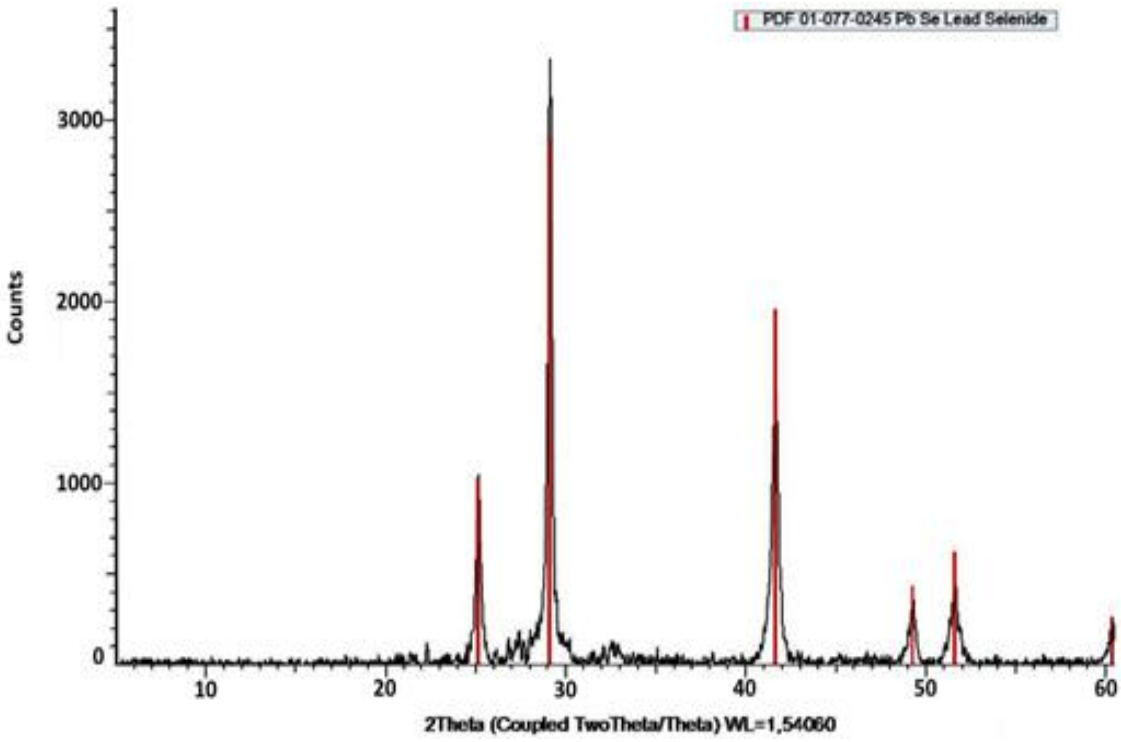
ALINAN NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil 1-dən göründüyü kimi rentgen spektrində PbSe ilə yanaşı Se, PbO_2və PbO birləşmələrinin fazaları da müşahidə olunur, lakin demək olar ki, bu fazalar yox dərəcəsindədir. Belə bir nəticəyə gəlmək mümkündür ki, alınmış rentgen spektrinə əsasən maddə PbSe narın tozudur.

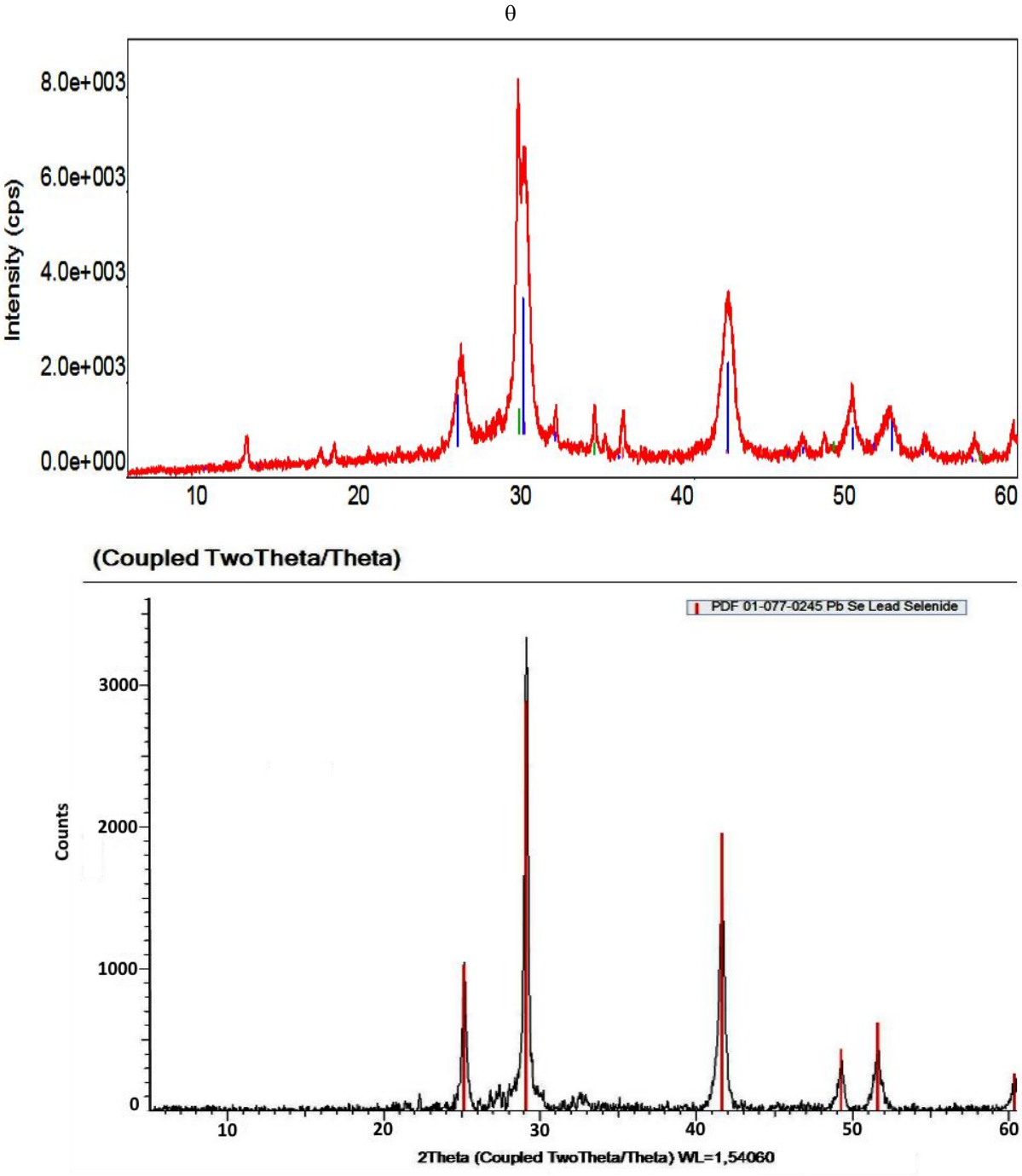
131, H.Javid ave, AZ-1143, Baku
ANAS, Institute of Physics
E-mail: jophphysics@gmail.com



Şəkil 1. Üçkomponentli məhlulda alınmış PbSe narın tozunun rentgen spektri.



Şəkil 2. Dördkomponentli məhlulda alınmış PbSe narın tozunun rentgen spektri.

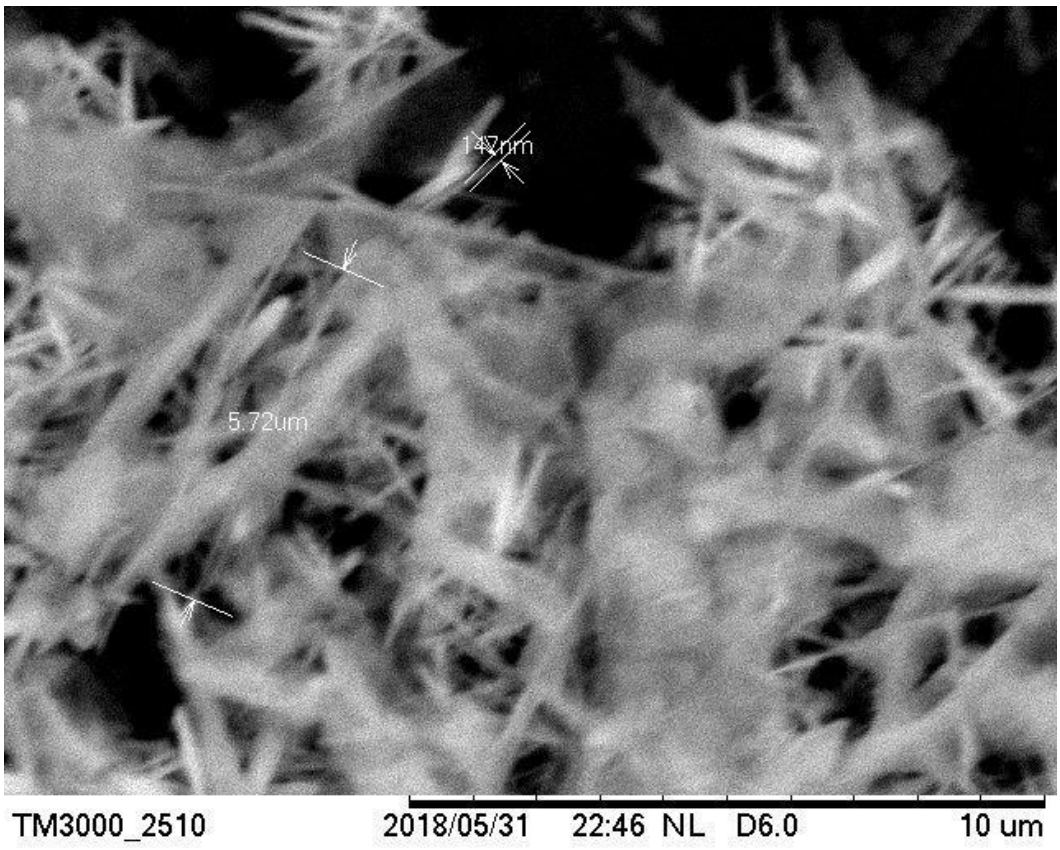


Şəkil 3. Üçkomponentli məhlulda (yuxarıdakı qrafik) və dördkomponentli məhlulda (aşağıdakı qrafik) alınmış PbSe narın tozlarının rentgen spektrlərinin müqayisəsi.

Şəkil 3-dən də göründüyü kimi dördkomponentli məhlulda və üçkomponentli məhlulda alınmış PbSe narın tozlarının rentgen şüalarının pikləri $2\theta = 27°$ və $2\theta = 44°$ qiymətlərində üst-üstə düşür. Ən böyük piklər isə dördkomponentli məhlulda alınmış narın tozun Rentgen spektrində 29°-yə uyğun gəlir. Həmçinin üçkomponentli məhlulda alınmış PbSe narın tozunun Rentgen spektrinin ən böyük pik nöqtəsi 30°-yə uyğun gəlir.

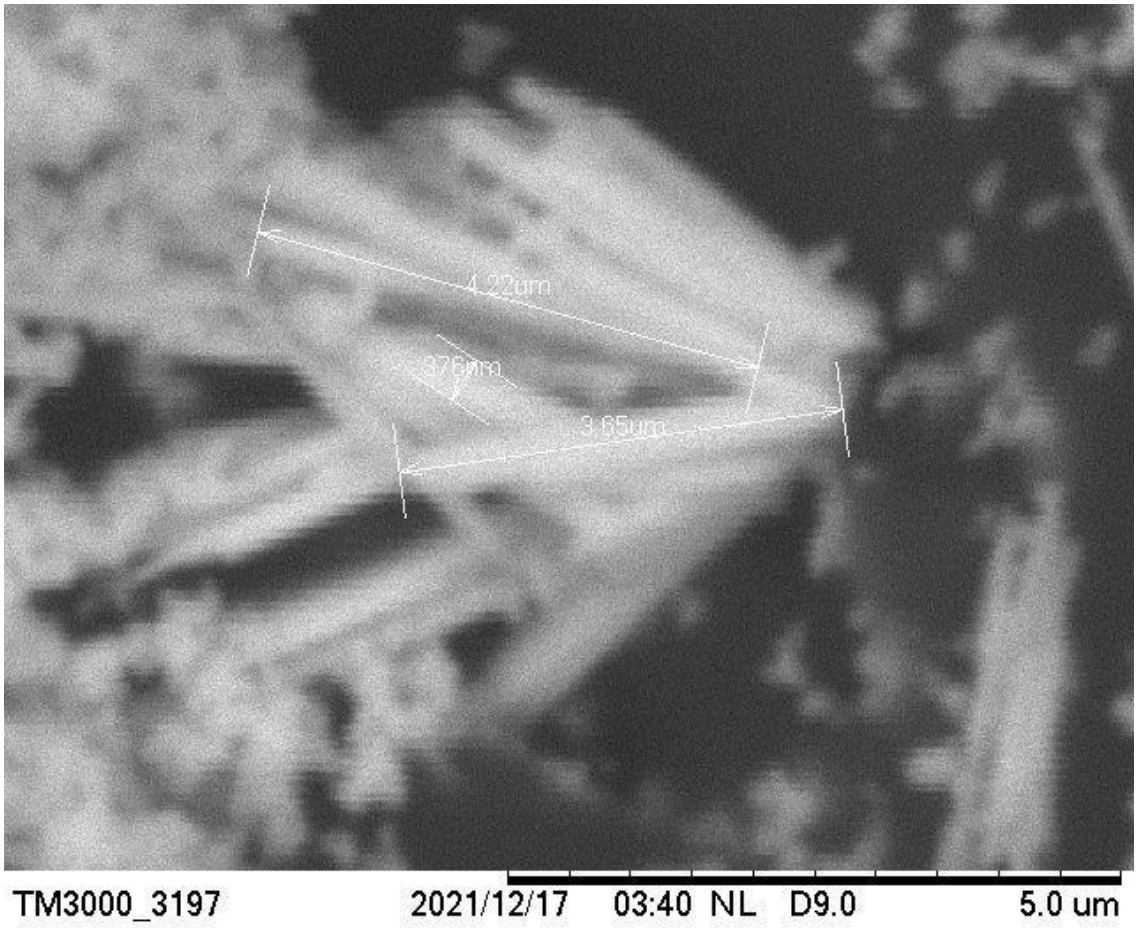
Şəkil 4-də PbSe nazik təbəqəsinin nanostrukturu verilmişdir. Göründüyü kimi, PbSe nazik təbəqəsi nanoçubuqlardan ibarətdir. Alınmış çubuqların uzunluqları 5-6 mkm və enləri isə 150 nm təşkil edir. Aparılan reaksiyanın məhlulundan çöküntü şəklində ayrılan PbSe-in narın tozunda heç bir nanoquruluş müşahidə olunmamışdır.

Şəkil 5-dən göründüyü kimi üçkomponenti məhlulda alınmış PbSe narın tozunda nanostruktur müşahidə olunmuşdur. Alınmış nanostruktur nanoçubuqlardan ibarətdir və nanoçubuqların eni 376 nm, uzunluqları isə 3-4 mkm təşkil edir.



Şəkil 4. Dördkomponentli məhlulda alınmış PbSe nazik təbəqəsində müşahidə olunan nanoçubuqlar.

.



Şəkil 5. Üçkomponentli məhlulda alınmış PbSe narın tozunun nanostrukturu.

NƏTİCƏ

Beləliklə, PbSe məhlulunda trietanolamin komponenti olan zaman nanostruktur yalnız PbSe nazik təbəqəsində müşahidə olunur, PbSe məhlulundan trietanolamin komponentini çıxardıqda PbSe nazik təbəqəsi çox nazik alınır və narın tozunda nanoçubuqlar müşahidə olunur.

[1] *H. Zhao, H. Liang, F. Vidal et.al.* J. Phys. Chem. C, 2014, 118, (35), p.20585–20593.

[2] *S.S. Oluyamo, A.S. Ojo and M.S. Nyagba* Appl. Phys. (IOSR-JAP). 2015, vol. 7(1), ver.I. p. 10-15.

[3] *M.M. Hüseynəliyev, S.N. Yasinova, L.N. İbrahimova*. AMEA Naxçıvan Bölməsi, "Elmi Əsərlər", Təbiət və texniki elmlər seriyası, 2018, cild, № 2, səh. 254-258.

[4] *A. Kassim, S.M. Ho, A.H. Abdullah and S.Nagalingam.* Transaction C: Cem. And Chem. Engr. 2010, vol. 17, No. 2, p. 139-143.

[5] *J. Zhu, X. Liao, J. Wang J. and Chen H.Y.* Mater. Res. Bull., 2001, vol. 36(7-8), p. 1169-1176.

[6] *S.Prabahar, N.Suryanarayanan, K. Rajasekar and Srikanth S.* Chacogenide Letters, 2009, 6(5), p. 203-211.

[7] *M.A. Izzat and J.N. Ahmed*. Journ. of Infor. Tech. 2014, vol. 2(9), p. 18-23.

[8] *K. Li, X. Meng, X. Liang, H. Wang and H. Yan* Journ. of Solid State Electrochemistry, 2006, vol. 10(1), p. 48-53.

[9] *R.Vaidyanathan,J.L.Stickney and U.Happeck.* Electrochemica Acta, 2004, vol. 49(8), p.1321-1326.

[10] *T.R. Kumar, M.Vedamalai.* International J. of Pure and Applied Mathematics. 2018, vol. 119 No. 12, p. 6665-6675

[11] *H. Lee et al,* Adv. Funct. Mater., 2009, 19, p. 2735-2742,

[12] *H. Groiss et al,* Appl. Phys. Lett., 2007, 91, p. 222106.

Sara Yasinova

EFFECT OF TRIETANOLAMINE COMPONENET ON PbSe THIN LAYER AND FINE POWDER OBTAINED WITH CHEMICAL PRECIPITATION

PbSe thin layer and fine powder have been obtained by chemical precipitation in a solution without triethanolamine component. PbSe fine powders were dried, X-ray spectra were measured, and the nanostructure was studied. X-ray spectra of fine powders obtained in solution of triethanolamine component and solution without triethanolamine component were measured, compared and it was found that the peaks of X-ray spectra were located accordingly and their intensities coincided with PbSe standards. Also, in a thin layer of nanostructured PbSe in an environment containing a triethanolamine component. Also, in a medium containing a triethanolamine component, the nanostructure was observed in a thin layer of PbSe, and in a medium without a triethanolamine component, a nanostructure was observed in PbSe fine powder. It was studied that observed nanostructure it consists of nanotubes.

Сара Ясинова

ВЛИЯНИЕ ТРИЭТАНОЛАМИНОВОГО КОМПОНЕНТА НА ТОНКИЙ СЛОЙ И МЕЛКИЙ ПОРОШОК PbSe, ПОЛУЧЕННЫХ ХИМИЧЕСКИМ ОСАЖДЕНИЕМ

Методом химического осаждения из раствора, не содержащего триэтаноламинового компонента были получены тонкие слои и мелкий порошок PbSe. Порошки PbSe высушивали, а затем сняли рентгеновские спектры. Из сопоставления рентгеновских спектров мелких порошков, полученных в растворе триэтиламинового компонента, и без него было установлено, что пики рентгеновских спектров соответствовали, а их интенсивности совпадали со стандартами для PbSe.

Было показано, что в среде, содержащей триэтаноламинового компонента наноструктура в тонком слое PbSe, а в среде без триэтаноламинового компонента в мелком порошке. Наблюденная наноструктура состояла из нанотрубок.

Qəbul olunma tarixi: 22.02.2022

A. Həsənov, X.T. Həsənova, S.R. Bağırova

YÜKSÜZ POLİMERLƏR ƏSASINDA YARANMIŞ İKİFAZALI SİSTEMLƏRİN BİMODALINA BƏZİ DUZLARIN TƏSİRİ

KSCN, KI, KBr, KCI, $KClO_4$, KF, K_2SO və NH_4CI, LiCI, NaCl, KCI, CsCl duzlarının dekstran-polivinilpirrolidon və dekstran-polietilenqlikol ikifazalı sistemlərinin bimodal əyrilərinə təsiri öyrənilmişdir. K duzlarının 0.1 və 0.5 mol/kq konsentrasiyalarının baxılan sistemlərin faza diaqramlarına təsiri öyrənilmişdir. Duzun təsirinin, duzun liotropik sırasına uyğun səthi gərilməsinin artımı ilə bağlı olduğu aşkar edilmişdir. Sulu polimer ikifazalı sistemdə faza əmələgəlmə prosesi əsasən duzun sistemdəki suyun quruluşuna və yaxud vəziyyətinə təsiri səbəbindən olması güman edilir.

A.İ. Cabbarov

KVAZİ İKİÖLÇÜLÜ $Cu_{1.04}Fe_{1.12}Te_{1.84}$ MONOKRİSTALIN İSTİLİK TUTUMU VƏ FAZA KEÇİDLƏRİ

Kvazi iki ölçülü $Cu_{1.04}Fe_{1.12}Te_{1.84}$ (CFT) istiqamətli kristallaşma üsulu ilə alınmış monokristalın 2 – 306K temperatur intervalında istilik tutumu öyrənilmişdi. Cp/T-nin temperatur asıllığından, spin-şüşə halına keçid T_G = 55K və antiferromaqnit-paramaqnit T_N = 65K temperaturlarda müşahidə olunur. Əldə olunan eksperimental nəticələr tanınmış model çərçivəsində izah olunur. CFT (mis dəmir tellurda) alınan eksperimental istilik tutumunun temperatur asılılığından Cp(T) Debay temperaturu Θ_D=176.9K, habelə anisotropiya əmsalı η = 0.309 və ikiölçülü Debay temperaturu Θ_2 = 122.2K hesablanmışdır.

Şahmərdan Ş. Əmirov

METAMATERİALDA LAZER İMPULSLARININ PARAMETRİK QARŞILIQLI TƏSİRİNİN NƏZƏRİYYƏSİNƏ DAİR

Lazer impulslarının metamaterialda parametrik qarşılıqlı təsirinin nəzəriyyəsi inkişaf etdirilmişdir. Qrup sürətlərinin dispersiyasının və qrup sürətlərinin sinxronizmdən kənara çıxmasının mövcudluğu halında əks istiqamətdə yayılan siqnal dalğasının spektral sıxlığı üçün analitik ifadə alınmışdır. Qrup sürətlərinin dispersiyasına və qrup sürətlərinin sinxronizmdən kənara çıxmasına uyğun xarakteristik uzunluqlar metamaterialın qeyri-xətti uzunluğundan kiçik olduqda, həyəcanlanan dalğanın spektrinin bir neçə pikə parçalanması müşahidə olunmuşdur. Düz istiqamətdə yayılan güclü və dayaq dalğalarırın əks istiqamətdə yayılan siqnal dalğası ilə parametrik qarşılıqlı təsiri zamanı sonuncunun itkilərinin güclü və zəif dalğaların itkiləri ilə kompensasiya olunması hesabına əks dalğanın parametrik güclənməsi və generasiya olunması müşahidə olunmuşdur.

E.R. Həsənov, Ş.G. Xəlilova, R.K. Mustafayeva, G.M. Məmmədova

GÜÇLÜ ELEKTRİK SAHƏSİNDƏ İKİ VƏRƏLİ YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ CƏRƏYAN RƏQSLƏRİ

GaAs tipli iki vadili yarımkeçiricilərdə cərəyan rəqslərini öyrənmək üçün ilk dəfə Boltsman kinetik tənliyindən istifadə edilmişdir. Boltsman tənliyinə yük daşıyıcıların vadidaxili və intervalda səpələnməsini nəzərə almaq bu tənliyin həllini çətinləşdirmir. Qeyri-sabitliyin başladığı kritik sahənin alınan qiymətləri Qunn təcrübəsi ilə uyğundur.

S.S. Rzayeva

FOTON-FOTON SƏPILMƏSI

Bu məqalədə məqsədimiz $\gamma\gamma\rightarrow\gamma\gamma$ prosesi üçün bir ilgəkli spiral səpilmə amplitudunı və diferensial kəsiyi analitik şəkildə hesablamaqdır. Burada proses ilgək-fermionun sıfırdan fərqli kütləsini nəzərə almaqla hesablanır. Müəyyən kinematik məhdudiyyətlərdə kompakt analitik ifadələr mövcuddur və onları tez bir zamanda əldə etmək olar. Bu proses üçün kovariant və spiral amplitudlardan istifadə edirik.

V.M. Əliyev, C.Ə. Rəhimov, G.Ə. Əliyeva

$Y_{0,5}Cd_{0,5}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ YUXARI TEMPERATURLU İFRATKEÇİRİCİ MATERİALIN YAYILMIŞ FAZA KEÇİDİNİN PARAMETRLƏRİNİN (T_0, a, $L_0(T)$, dL_0/dT) TƏYİNİ

$YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ifratkeçirici polikristalda Y elementinin Cd elementi ilə əvəz olunması zamanı əlavə keçiriciliyin əmələ gəlməsi mexanizmi tədqiq edilmişdir. Y elementinin Cd elementi ilə əvəz olunması $Y_{0,5}Cd_{0,5}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ ifratkeçirici materialın xüsusi müqavimətinin nəzərə çarpacaq dərəcədə artmasına səbəb olur. Eyni zamanda materialın ifratkeçiriciliyə keçid temperaturunun (T_c) qiymətinin azalmasına səbəb olur.

Göstərilmişdir ki, onun faza keçidi (FK) yayılmış xüsusiyyətə malikdir. Bu səbəbdən $Y_{0,5}Cd_{0,5}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ ifratkeçirici materialın yayılmış faza keçidinin (FK) parametrləri tədqiq edilmişdir: T_0, a, $L_0(T)$ və dL_0/dT. Müəyyən edilmişdir ki, $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ifratkeçirici polikristalda Y elementinin Cd elementi ilə əvəz olunması $Y_{0,5}Cd_{0,5}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ ifratkeçirici materialın FK sahəsini azaldaraq onun keçidin surətini (dL_0/dT) artırır.

S.O. Məmmədova, S.S. Hüseynova, A.Y. Şərifli

QRAFENDƏ Li ADSORBSİYASININ GEOMETRİK QURULUŞU VƏ MAQNİT XASSƏLƏRİ

Qrafen superqəfəsinə adsorbsiya edilmiş Li_{α} və tək Li atomunun struktur, elektron və maqnit xassələri araşdırılıb. 5×5 qrafen superqəfəsində atomların adsorbsiyası zamanı maqnit momenti həm karbon vakansiyası, həm də vakansiyasız halda hesablanıb. Superqəfəslərin ümumi maqnit momentləri və vakansiya olunmuş karbon atomunun yaxınlığında əmələ gələn lokal maqnit momentləri tapılıb. Li ilə adsorbsiya edilmiş vakansiyalı 5×5 qrafen superqəfəslərində ferromaqnit spin düzülüşü müəyyən edilib. Bu strukturlarda adsorbsiya enerjisinin hesablamalarından istifadə edərək, qrafendə Li-C atomlarının deformasiyası araşdırılıb.

A.R. İmaməliyev, G.F. Qənizadə

SUBMİKRON ÖLÇÜLÜ BARİUM TİTANAT HİSSƏCİKLƏRİNİN ÖLÇÜSÜNÜN ONLARIN DİELEKTRİK XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ

Müxtəlif ölçülü submicron barium titanat hissəciklərdən və olein turşusundan ibarət heterogen sistemin dielektrik xassələri tədqiq olunmuşdur. Alınan nəticələrdən hər bir ölçü üçün dielektrik nüfuzluğu və elektrik keçiriciliyi təyin edilmişdir. Çox kiçik ölşülərdə seqnetoelektrik xassəsinin itməsi ilə 100 nm ölçülü hissəciklər üçün dielektrik nüfuzluğunun qiyməti kiçik alınır. 200 nm ölçülü barium titanat hissəciklərinin dielektrik nüfuzluğu isə ən böyükdür. Bu fakt həmin hissəciklərin polidomen quruluşa malik olması ilə izah oluna bilər. Barium titanat hissəciklərinin ölçüsü böyüdükcə, onların elektrik keçiriciliyi artır. Alınan nəticələrin keyfiyyətcə izahı verilmişdir.

T.C. İbrahimov, İ.S. Ramazanova, G.X. Hüseynova, U.V. Yusifova, A.F. Nurəliyev

BARİUM TİTANAT ZƏRRƏCİKLƏRİ İLƏ DİSPERSİYA OLUNMUŞ POLİETİLENİN DİELEKTRİK XÜSUSİYYƏTLƏRİ

Barium titanatın monodispers hissəciklərinin əlavə edilməsi ilə yüksək sıxlıqlı polietilenin dielektrik keçiriciliyinin real hissəsinin tezlik və temperaturdan asılılıqları öyrənilir. Eksperimental məlumatlar Maksvell-Garnett və Brugemann nəzəriyyələri ilə müqayisə edilir.

M.H. Kazımov, S.M. Rzayeva, L.V. Rustamova

$Fe_{0,75}Ga_{0,25}InS_3$, $MnGaInS_4$ və $Fe_{0,25}Ga_{0,5}In_{1,25}S_3$ KRİSTALLARININ NAZİK MONOKRİSTAL TƏBƏQƏLƏRİNİN FIRLANMA ELEKTRON DİFRAKSİYA METODLARI İLƏ ÖYRƏNİLMƏSİ

Kristaltutanın (KT), monokristal təbəqə (MT) ilə birlikdə, ilkin dönmədən sonra KT-nin səthinə perpendikulyar ox ətrafında fırlanması ilə alınan elektronoqramlardan $Fe_{0,75}Ga_{0,25}InS_3$ (a = 3,78 Å, c = 24,44 Å) və $MnGaInS_4$ (a = 3,80 Å, c = 24,55 Å) kristallarının fəza qrupları $P6_3mc$ olan yeni 2H politipləri aşkar olunmuşdur. Həmçinin, $Fe_{0,25}Ga_{0,5}In_{1,25}S_3$ kristalının a=3.78Å, c=36.78Å və f. qr. R3m olan 3R politipi aşkar olunmuşdur. $Fe_{0,75}Ga_{0,25}InS_3$-nin monokristal təbəqəsi KT-nin səthi üzərində düz, $MnGaInS_4$ və $Fe_{0,25}Ga_{0,5}In_{1,25}S_3$ kristallarının MT-ləri isə müəyyən bucaqlar altında yerləşmişlər. $MnGaInS_4$-ün timsalında standart olmayan yerlərdə yerləşən bəzi reflekslərin (ellipslərin üzərində olmayan) yaranmasını izah edən sxem verilmişdir. Bu sxem KT uzərində ixtiyari istiqamətlənmiş nanoobyektlərin gələcək elektronoqrafik quruluş tədqiqatlarında istifadə oluna bilər.

V.A. Tanrıverdiyev

ÜÇDİVARLI İSİNG NANOBORUDA QARIŞIQ (1/2, 1 və 3/2) SPİN DİNAMİKASI

Daxili altıbucaqlı boşluğa malik üçdivarlı qarışıq spinli İsing nanoborunun tədqiqi üçün orta sahə yaxınlaşması və Qlauber tipli stoxastik dinamika tətbiq edilmişdir. Zamana görə dəyişən xarici maqnit sahəsində qarışıq spin (1/2,1, 3/2) İzinq sisteminin dinamik davranışına müxtəlif mübadilə sabitlərinin, tək ion anizotropiyalarının və temperaturun təsiri araşdırılmışdır. Sistemdə Hamilton parametrlərinin müəyyən qiymətlərinə uyğun olaraq bəzi müxtəlif fundamental fazalar və qarışıq fazalar müşahidə edilmişdir. Nəticələr parametrlərin seçilmiş qiymətləri üçün kəmiyyətcə təsvir edilmişdir.

S.R. Əzimova, Ş.S. İsmayılov, İ. Qasımoğlu, N.M. Abdullayev

$Bi_2Te_{2,7}Se_{0,3}$ KRİSTALLARININ KEÇİRİCİLİK XÜSUSİYYƏTLƏRİ

Nikel ionları ilə interkalasiya olunmuş n- tipli Bi2Te2,7Se0,3 həcmli, laylı termoelektrik yarımkeçiricinin keçiriciliyi və Van- der Vaals səthlərindəki kristallitlərın materiala təsiri tədqiq olunmuşdur.

ISSN 1028-8546

volume XXVIII, № 01, 2022
Section: Az

MÜNDƏRİCAT

1. $TlFe_{0.975}Ga_{0.025}S_2$ bərk məhlulunun nümunələrinin hazırlanması metodunun AFM faza keçidinə və elektrik xassələrinə təsiri
A.İ. Cabbarov 3
2. PVDF+PKR12 kompozitin istilik və kinetik parametrlərinin təyin edilməsi
B.M. İzzətov, B.H. Xudayarov, F.F. Yəhyayev 7
3. TiO_2 nanohissəcikləri ilə modifikasiya olunmuş PVX əsaslı polimer nanokompozitlərin quruluş dəyişiklikləri
A.M. Rəhimli 12
4. Elektron cihazların etibarlığının nəzəri tədqiqi
E.Ə. Kərimov, S.N. Musayeva 15
5. Sürətli ağır ion, neytron, elektron və qamma şüalanmanın təsiri nəticəsində borlu binar birləşmələrdə defekt əmələgəlmə mexanizmi və termofiziki effektlər
O.A. Səmədov, M.N. Mirzəyev 18
6. 0.27 eV enerjili polyarlaşmış neytronların təsiri ilə ^{235}U nüvəsinin bölünməsi zamanı ani qamma kvantların və neytronların bucaq korrelyasiyasının ölçülməsi
Q.S. Əhmədov 31
7. $La_{0.63}Ba_{0.37}MnO_3$ birləşməsinin kristal quruluşunun rentgenoqrafik tədqiqi
R.F. Həşimov 35
8. Biroxlu kristalların $CuGaS_2$,$CuAlS_2$,$CuInS_2$ periodik strukturlarında döyünən cərəyan
İ. Qasımoğlu, Q.S. Mehdiyev, Z. Qadiroğlu, İ.Q. Nəsibov, C.İ. Hüseynov, H.M. Əsgərov 38
9. ZnSe-nin struktur və elektron xassələrinin LSDA və LSDA+U metodu ilə təməl prinsiplərdən tədqiqi
V.N. Cəfərova 43
10. Kimyəvi çökdürmə yolu ilə alınmış PbSe nazik təbəqəsinə və narın tozuna trietanolamin komponentinin təsiri 47
S.N. Yasinova
11. **FİZİKA, vol. XXVIII №1, 2022 section: En**buraxılışında dərc olunan məqalələrin qısa xülasəsi 52