



ISSN 1028-8546

Section: C H.A. Aliyev
08 - 09 June 2023

Azerbaijan Journal of Physics

Fizika

“NƏZƏRİ VƏ TƏTBİQİ FİZİKANIN
İNKİŞAFI” MÖVZUSUNDA
BEYNƏLXALQ KONFRANS
ÜMUMMİLLİ LİDER
HEYDƏR ƏLİYEVİN
100 İLLİYİNƏ
HƏSR OLUNUR

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

Institute of Physics

Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan

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

ISSN 1028-8546
Section: C Conference
H.A. Aliyev 2023

Azerbaijan Journal of Physics

FIZIKA

*Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan
Institute of Physics*

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
Majid Ebrahim-Zadeh, Spain

Huseyn Ibragimov, Azerbaijan
Nazim Mamedov, Azerbaijan
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.

PUBLISHING OFFICE

131, H. Javid ave., AZ-1143, Baku
Ministry of Science and Education
Republic of Azerbaijan, 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:

Ümummilli Lider Heydər Əliyevin
100 illiyinə həsr olunmuş

NƏZƏRİ VƏ TƏTBİQİ FİZİKANIN İNKİŞAFI

mövzusunda konfrans

azərbaycan dilində
məqalələr

08-09 İyun, 2023-cü il

POLİVİNİLİDENFTORİD MATERIALININ BƏZİ ELEKTROFİZİKİ XASSƏLƏRİNİN POLİMERİN ÜST MOLEKULAR STRUKTURU İLƏ ƏLAQƏLƏRİNİN TƏDQIQI

**A.M. HƏŞİMOV¹, L.Ç. SÜLEYMANOVA², K.B. QURBANOV¹, F.Ş. CƏFƏROVA¹,
Z.A. TAĞIYEVA¹, V.M. HACIYEVA¹, S.S. ƏHƏDOVA¹**

*1. Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu
Az-1143, Bakı, H.Cavid prospekti, 131.*

a.hashimov@physics.science.az

2. Mingəçevir, Mingəçevir Dövlət Universiteti Az-4500., Dilarə Əliyeva küçəsi, 21.

suleymanovalc@mail.ru

Təqdim olunan məqalədə, yüksək gərginlikli mikrosaniyəli impuls qazboşalmasının təsirlərinə məruz qalan, müxtəlif texnoloji şəraitlərdə hazırlanmış polivinilidenftorid polimer materialların tədqiqat nümunələrinin səthindən makromolekulların hissələrinin (atom və molekullarının) səthdən emissiya proseslərinin tədqiqindən əldə edilmiş nəticələr şərh olunmuşdur.

Açar sözlər: polimer, izotrop, anizotrop, emissiya, struktura, üst molekulyar struktur, kütlə spektrometri.

PACS: 07.75+h, 82.80.Ms

Amorf - kristallik struktura malik polimer materialların bir sıra fiziki, elektrofiziki və mexaniki xassələri üst molekulyar quruluşdan asılı olduğunu nəzərə alaraq, bu baxımdan polimerlərdə “struktur xassə” əlaqələrinin tədqiqi polimerlər fizikasının mühüm məsələlərindən hesab olunur. Məlumdur ki, polimer materiallar müxtəlif ölçülü struktur elementlərindən təşkil olunaraq, mürəkkəb üst molekulyar struktura malik olur. Beləliklə ədəbiyyat məlumatlarından məlumdur ki, kristallaşan xətti polimer sistemlərin mühüm xassələri materialların kimyəvi tərkibindən, molekulyar quruluşundan və üst molekulyar strukturundan asılı olaraq müxtəlif xassə göstəriciləri ilə xarakterizə olunur.

Ədəbiyyatlarda, polimer materialların mexaniki və elektrofiziki xassələrinin öyrənilməsi üzrə çoxsaylı tədqiqatlar yerinə yetirilmiş və materialların xassələrini xarakterizə edən mühüm nəticələrin əldə edilməsi şərh olunmuşdur [1-7]. Polimerlərin “üst molekulyar struktur- xassə” əlaqələrinin öyrənilməsinə həsr olunan işlərin azlığı və bu istiqamətdə aparılan işlərdə bir sıra həlli tələb olunan məsələlərin mövcudluğu özünə yer almışdır.

Yuxarıda qeyd olunanları nəzərə alaraq, polimer materiallarda “üst molekulyar struktur- xassə” əlaqələrinin öyrənilməsi və xüsusən yüksək gərginlikli elektrik qazboşalmasının təsirlərinə məruz qalan polimer-izolyasiya materiallarının köhnəlməsinə səbəb olan amillərdən biri olan, onların elektromodifikasiya proseslərində səthində və həcmində baş verən proseslərin öyrənilməsi günün aktual məsələsi hesab olunur.

Qeyd etmək lazımdır ki, polivinilidenftorid polimer materialları, ftoroplast sinfinə daxil olaraq, mexaniki möhkəmliyi alcaq temperatura, radiasiya və ultrabənövşəyi şüaların təsirlərinə dözümlü, elektrik və dielektrik xassələri, daxil olduğu sinif polimerlərindən müqayisədə üstün olaraq fərqlənilir. Bu səbəblərdən PVDF materialı perspektiv polimer olaraq, kimya sənayesində, elektronika, elektrotexnikada və digər sənaye sahələrində geniş tətbiq tapmışdır. Digər tərəfdən PVDF amorf - kristallik struktura malik polimerlərin quruluşlarının tədqiqində model olması baxımından

əhəmiyyət kəsb edir, belə ki onun makromolekul şəbəkəsi yuvarlaq konformasiyadan, bir ox istiqamətində deformasiya olunanda çox asan nizamlanmış paralel hala keçid edə bilir. Materialın bu xassəsi polimerlərdə üst molekulyar strukturla materialın kimyəvi strukturu arasında mövcud olan əlaqələrin araşdırılmasına imkan verir. Digər tərəfdən, PVDF-in kimyəvi tərkibinə flüor elementlərinin olması, onun digər amorf-kristallik polimerlərdən fərqli olaraq, elektron şüasının təsirlərinə dözümlülük nümayiş edilməsindən bu materialın strukturunun tədqiqində elektrik mikroskopundan istifadə etmək olur.

Tədqiqatda, məqsədə uyğun olaraq, aşağıdakı təcrübə işləri yerinə yetirilmişdir:

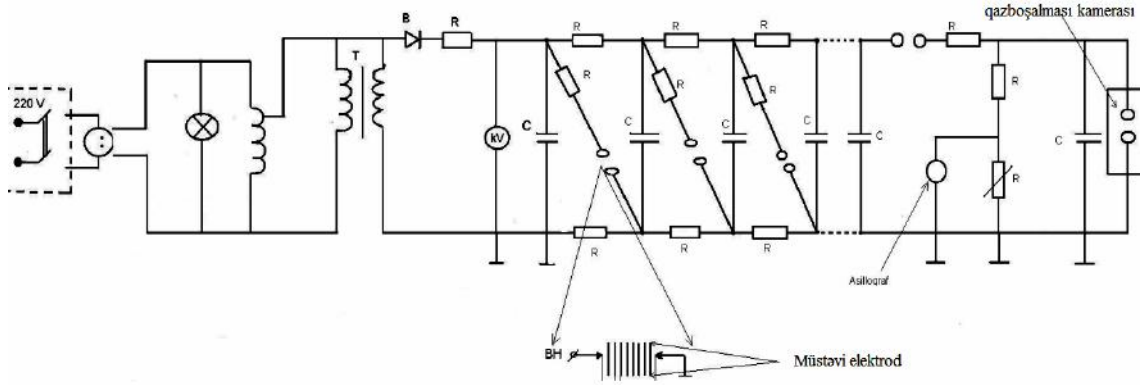
- PVDF materialından dənəciklər $T=300^{\circ}\text{C}$ temperaturda $p=100$ atm. təzyiqdə və $T_{kr}=80^{\circ}\text{C}$ kristallaşdıraraq, $d=0,5$ mm qalınlıqda polimer plyonkası əldə etdikdən sonra plyonkanın səthi mikrosaniyəli impuls qazboşalmasının təsirləri vasitəsilə $t=5$ dəqiqə müddətində işlənərək, emissiya prosesinin kütlə-spektrometrik spektri qeydə alınmışdır.

- PVDF materialından tədqiqat nümunələrinin hazırlanmasının texnoloji prosesini xarakterizə edən P , T_{kr} və t parametrlərini dəyişərək, müxtəlif üst molekulyar struktura malik və impuls qazboşalmasının təsirlərinə məruz qalan polimer sistemindən makromolekulların hissələrinin emissiya prosesi və qaz reaksiyaları tədqiq edilmişdir.

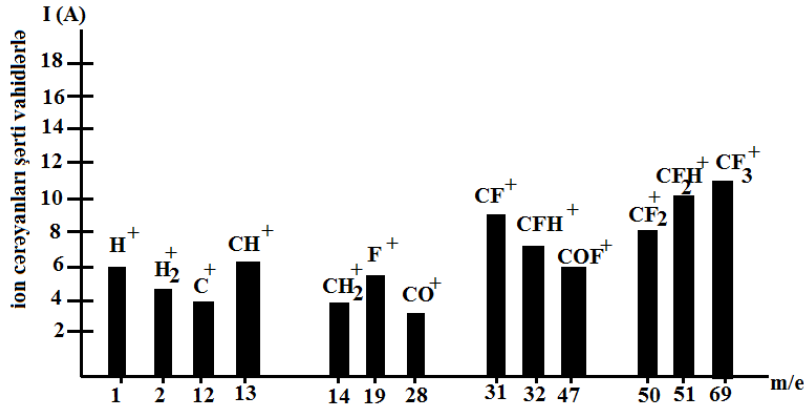
Şəkil 1-də yüksək gərginlikli mikrosaniyəli impuls qazboşılması yaradan qurğunun elektrik sxemi verilmişdir.

Şəkildə T_p - yüksək gərginlikli transformatoru-140kv; BB -yüksək gərginlik çevricisi; $R_{müh}$ - mühafizə müqaviməti; R - yükləyici müqavimət; R_d - demfer müqaviməti; C_1-C_{10} - enerji toplanan kondensatorlar; PII - PII_{11} - qazboşalması aralıkları; R_p - boşalma müqaviməti; C_p - boşalma kondensatoru; R_p - dəyişən müqavimətdir.

Şəkil 2-də ilkin variantda qazboşalmasının təsirlərinə məruz qalan PVDF-in səthindən emissiya prosesini xarakterizə edən kütlə spektri verilmişdir.



Şəkil 1. Yüksək gərginlikli mikrosaniyəli impuls qazboşalması üçün elektrik sxemi.

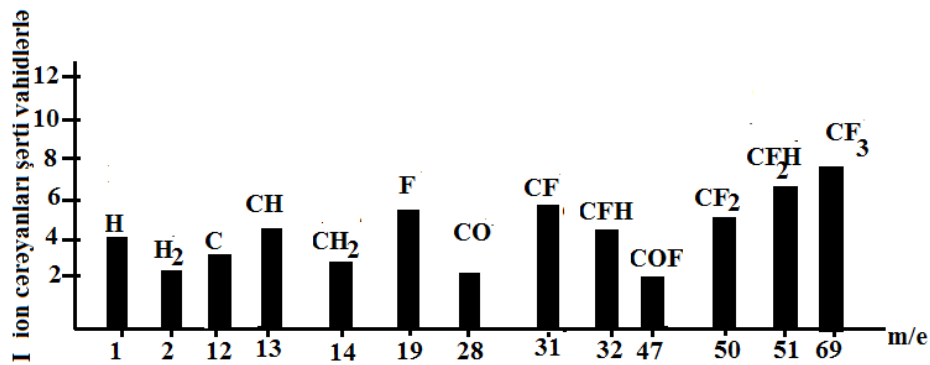


Şəkil 2. 10^{-7} Pa tərtibində ifrat yüksək vakuüm şəraitində, atmosfer havasının qalıq qazlarının minimal qiymətlərində, yüksək gərginlikli mikrosaniyəli impuls qazboşalması üçün $U=6$ kv gərginlikdə, $t=5$ dəqiqə müddətində təsirlərinə məruz qalan, isti prosesləmənin $p=100$ atmosfer, kristallaşma temperaturunun $T_{kr}=80^{\circ}\text{C}$ qiymətində PVDF materialının səthindən müşahidə olunan kütlə-spektroqramı.

Kütlə-spektroqrammasından görünür ki, materialın səthindən əsasən onu təşkil edən atom və molekullar və konversiya prosesi vasitəsilə onların əmələ gətirdiyi birləşmələrdən ibarətdir.

Tədqiqatın növbəti mərhələsində PVDF materia-

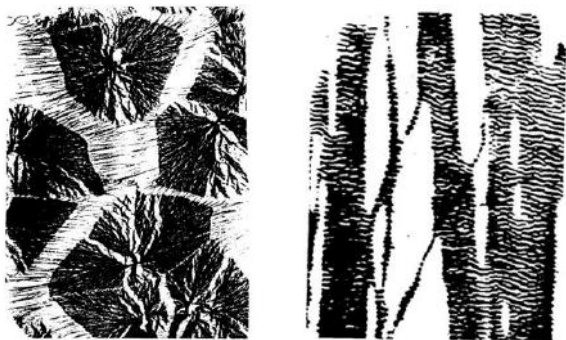
lını bir ox istiqamətində dartılma deformasiyasına 400% məruz edərək emissiya prosesinin analogi təcrübələri yerinə yetirilmişdir. Şəkil 3-də qeyd olunan halda emissiya prosesinin kütlə-spektroqramı verilmişdir.



Şəkil 3. Bir ox istiqamətində 400% deformasiyasına məruz qalan PVDF materialının səthindən emissiya prosesinin kütlə-spektroqramı.

Şəkil 3-dən görünür ki, materialın səthindən atom və molekulların emissiya prosesinin intensivliyi nəzərə çarpacaq dərəcədə azalmışdır. Məlumdur ki, PVDF materialı bir ox istiqamətində dartılma deformasiyasına məruz qaldıqda materialda sferolit üst molekulyar qu-

ruluş dağılıraq sıxlığı çox olan və müvafiq olaraq kristallaşma dərəcəsi daha yüksək olan fibrilyar struktura keçir ki, bu da öz növbəsində emissiya prosesinin zəifləməsinə səbəb olmuşdur [1-7].



a

b

Şəkil 4. PVDF materialının üst molekulyar strukturunu xarakterizə edən elektron mikroskopik şəkil.

Şəkil 4a-da PVDF materialında sferolit strukturunu, Şəkil 4b -də isə fibrilyar strukturu xarakterizə edən elektron mikroskopik şəkilləri verilmişdir.

NƏTİCƏ

PVDF materialını bir ox istiqamətində dartılma deformasiyaya məruz etdikdə materialın sferolit strukturundan fibrilyar struktura keçid prosesinin müxtəlif mərhələlərində, səthindən atom və molekulların emissiya prosesinin intensivliyi müxtəlif ədədi qiymətlərlə xarakterizə olunur. Əldə edilən nəticələr kristallaşan polimer materiallarda materialların “üst molekulyar strukturu – xassə” əlaqələrinin olmasını təsdiq edir.

- [1] *A.M. Həşimov, L.Ç. Süleymanova, K.B. Qurbanov və b.* Fizika, cild XXIII, №1, sektion: Az, s., 2017, 13-15.
- [2] *A.M. Həşimov, L.Ç. Süleymanova, K.B. Qurbanov.* Energetikanın problemləri, №1, 2018, s.6-10.
- [3] *L.Ç. Süleymanova.* Fizika, cild XXV, №3, 2019, s.37-42.
- [4] *C.Л. Баженов, А.В. Ефимов, А.В. Бобров.* Высокомолек. соед. том 60, №5, серия А, 2018, с.426-431.
- [5] *К.Б. Галицкий, Я.Б. Тиманцев, Р.В. Докучаев и др.* Высокомолек. соед., том 62, №5, 2020, с.370-379.
- [6] *А.С. Шурина, М.В. Базунова, В.В. Чернова и др.* Высокомолек. соед. том 62, №4, 2020, с.294-301.
- [7] *I.H. Tavman, , T. Evgin.* Thermally Conductive Polymer Nanocomposites for Thermal Management of Electronic Packaging. IEEE 23rd Int. Semp. for Design and Technology in Electronic Packaging (SIITME), Constanta, Romania, 26-29 October, 2017, p.64-67.

**А.М. Гашимов, Л.Ч. Сулейманова, К.Б. Гурбанов, Ф.Ш. Джафарова,
З.А. Тагиева, В.М. Гаджиева, С.С. Ахадова**

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗЕЙ НЕКОТОРЫХ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ С НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРОЙ ОБРАЗЦОВ ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА

В работе выявлено, что при одноосно ориентированных образцов поливинилиденфторида, подвергнутых воздействию высоковольтный микросекундной импульсного разряда, интенсивность эмиссии осколков макромолекул заметно уменьшается. Полученный результат интерпретируется, в данном случае, с увеличением степени кристалличности образцов с фибриллярной надмолекулярной структурой.

**A.M. Gashimov, L.Ch. Suleymanova, K.B. Gurbanov, F.Sh. Jafarova,
Z.A. Taghiyeva, V.M. Hajiyeva, S.S. Akhadova**

INVESTIGATION OF THE RELATIONSHIP OF SOME ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF THE SUPRAMOLECULAR STRUCTURE OF POLYVINYLIDENE FLUORIDE SAMPLES

It was found in the work that with uniaxially oriented samples of polyvinylidene fluoride subjected to a high-voltage microsecond pulsed discharge, the emission intensity of macromolecule fragments noticeably decreases. The result obtained is interpreted, in this case, with an increase in the degree of crystallinity of samples with a fibrillar supramolecular structure.

Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<Sn> KRİSTALLARI ƏSASINDA METAL-YARIMKEÇİRİCİ STRUKTURLARIN ELEKTRİK XASSƏLƏRİ

T.C. ƏLİYEV¹, G.Z. BAĞIYEVA¹, G.C. ABDİNOVA², N.M. AXUNDOVA³

¹ Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutu
AZ-1143, Bakı ş. H.Cavid pr.131

² Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Kolleci, AZ-1065, Bakı ş. İnşaatçılar pr.45

³ Azərbaycan Dövlət İqtisad Universiteti, AZ- 1001, Bakı ş. İstiqlaliyyət küç. 6
e-mail:tunzalaaliyeva@mail.ru

Stexiometriyadan əlavə 1,0 at.% -dək qalaya malik Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te kristalları göyərdilmiş, kristallar əsasında metal-yarımkeçirici strukturları yaradılmış, onlarda elektron daşınma və fiziki-kimyəvi hadisələr tədqiq olunmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, aşağı miqdarda stexiometriyadan artıq qalay atomları kristallarda kation altqəfəsi elektroaktiv vakansiyaları ilə elektroneytral, və ya birqat ionlaşmış komplekslər yaradaraq xüsusi müqaviməti (ρ) və termoelektrik əmsalını (α) artırır, yuxarı miqdarlarda isə yeni donör mərkəzləri əmələ gətirərək ρ -nu azaldır. Termoelektrik hərəkət qüvvəsinin temperaturla artımı valent zonada ağır dəşiklərin keçiricilikdə payının artması ilə bağlıdır. Öyrənilən strukturların kontakt müqaviməti və onun temperaturla yüksəlməsi metal ərintisi komponentlərinin kontaktyanı sahəyə diffuziya edərək həmin sahədə yeni akseptor mərkəzləri və aşağı müqavimətli aralıq faza yaratması, habelə qeyri-təkmilliklər üzrə yerləşməklə ayrılma sərhədində metal şuntlar əmələ gətirməsi ilə əlaqədardır.

Açar sözlər: bərk məhlul, metal-yarımkeçirici strukturu, kontakt müqaviməti, aralıq faza.

PACS: 71.20

GİRİŞ

Pb_{1-x}Sn_xTe bərk məhlulları termo- və fotoelektrik çeviriciləri üçün perspektiv materiallardır [1-4]. Bu sistem üzrə 25-30 mol.% SnTe-a malik tərkiblər ən yüksək termoelektrik effektivliyinə malikdirlər və onların valent zonasının quruluşu PbTe birləşməsininkinə uyğundur [2-5].

Foto- və termoçeviricilərin effektivliyi əhəmiyyətli dərəcədə onların ayrılmaz hissəsi olan metal-yarımkeçirici kontaktının xassələrindən asılıdır. Termoelementlərin effektivliyi

$$Z = Z_0 / (1 + 2r_k \sigma / l) \quad (1)$$

ifadəsi ilə təyin olunur. Burada $Z_0 = \alpha^2 \sigma / \chi$, σ -termoelement budaqlarını təşkil edən yarımkeçirici materialın elektrikkeçiriciliyi, α - termoelektrik əmsalı, χ - istilikkeçirmə əmsalı, l – budaqların uzunluğu, r_k - termoelementdə metal-yarımkeçirici kontaktının xüsusi müqavimətidir. Effektivliyin ifadəsinə daxil olan α , σ , χ , r_k - yarımkeçirici materialda cərəyan daşıyıcılarının konsentrasiyasından asılıdır. Digər tərəfdən, Z əsasən istifadə edilən yarımkeçirici materialda μ / χ_q nisbəti ilə təyin olunur (μ - cərəyan daşıyıcıların yürüklüyü, χ_q - qəfəs istilikkeçirmə əmsalıdır).

Metal-yarımkeçirici strukturun kontakt müqaviməti yarımkeçiricinin kontaktyanı oblastında baş verə bilən fiziki-kimyəvi hadisələrlə də (ərinti komponentlərinin bu oblasta diffuziyası, həmin komponentlərin yarımkeçiricini təşkil edən elementlərlə kimyəvi qarşılıqlı təsiri, bu təsir nəticəsində aralıq fazaların yaranması və s.) təyin olunur [6-8].

Buna görə, kation altqəfəsində müxtəlif konsentrasiyalı vakansiyalara malik Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te monokristallarının alınması, onlar əsasında termoelementlərin yaradılması, bu kristal və termoelementlərin elektrik

xassələrinin tədqiqi müəyyən elmi-praktiki əhəmiyyət kəsb edir.

Deyinənləri nəzərə alaraq təqdim olunan işdə kation vakansiyalarının Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te kristallarının və onların metal ərintilərlə kontaktının, habelə həmin kontakta baş verə bilən fiziki-kimyəvi proseslərin bu kontaktların elektrik xassələrinə təsiri qanunauyğunluqlarını aydınlaşdırmaq məqsədi ilə bərk məhlulun stexiometriyadan 1 at.%-dək artıq qalaya malik monokristalları göyərdilmiş, (kütlə% 95In+4Ag+1Au)-Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<Sn> strukturları yaradılmış və onların elektrik xassələri 77÷300K intervalında tədqiq olunmuşdur.

NÜMUNƏLƏRİN ALINMASI VƏ ÖLÇMƏ METODU

Tərkiblərin sintezi yüksək təmizlikli başlangıç komponentlərin havası $\sim 10^{-3}$ Pa təzyiqə qədər sorulmuş, daxili səthi əvvəlcədən qrafitlənmiş konusvari uclu kvarts ampulada ~ 1245 K-də 6 saat birgə əridilməsi üsulu ilə aparılmışdır. Sintez müddətində ərinti ampula ilə birlikdə müntəzəm olaraq qarışdırılmışdır. Stexiometriyadan artıq 0; 0,01; 0,05; 0,1; 0,5 və 1,0 at.% miqdarında qalay tərkibə sintez prosesində daxil edilmişdir. Komponentlər 0,0001 qram dəqiqliklə çəkilməmişdir. Sintezdən sonra ampula tərkiblə birgə suya salınmaqla otaq temperaturuna qədər soyudulmuş və Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<Sn> monokristalları həmin ampulada göyərdilmişdir.

Alınmış ~ 25 mm uzunluqlu külçələrin (çubuqların) monokristallığı və birləşməliliyi Rentgen üsulu ilə təsdiq olunmuşdur.

Göyərdilmiş monokristal çubuqlardan elektroqılqım qurğusunda diametri ~ 8 mm, uzunluğu ~ 12 mm olan düzbucaqlı paralelepiped formalı nümunələr kəsilmişdir. Kəsmə zamanı nümunələrin uc səthində yara-

nan pozulmuş təbəqə elektrokimyəvi aşındırma ilə təmizlənmişdir. Pozulmuş təbəqə təmizləndikdən sonra nümunələr 673K-də 120 saat spektral təmiz arqon mühitində termik işlənmədən keçmişlər. Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<Sn> nümunələrin elektrik parametrləri zond üsulu ilə sabit cərəyanda ölçülmüşdür. Kontakt müqavimətini təyin etmək üçün hazırlanmış metal-yarımkeçirici strukturlar uc səthləri biri-birinə kütlə % 95In+4Ag+1Au evtektikası ilə lehirlənmiş eyni ölçülü Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<Sn> kristallarından yaradılmışdır. Peltze effekti hesabına yarana biləcək xətanı ləğv etmək məqsədilə strukturların kontakt müqaviməti dəyişən cərəyanda zond üsulu ilə təyin edilmişdir [9]. Struk-

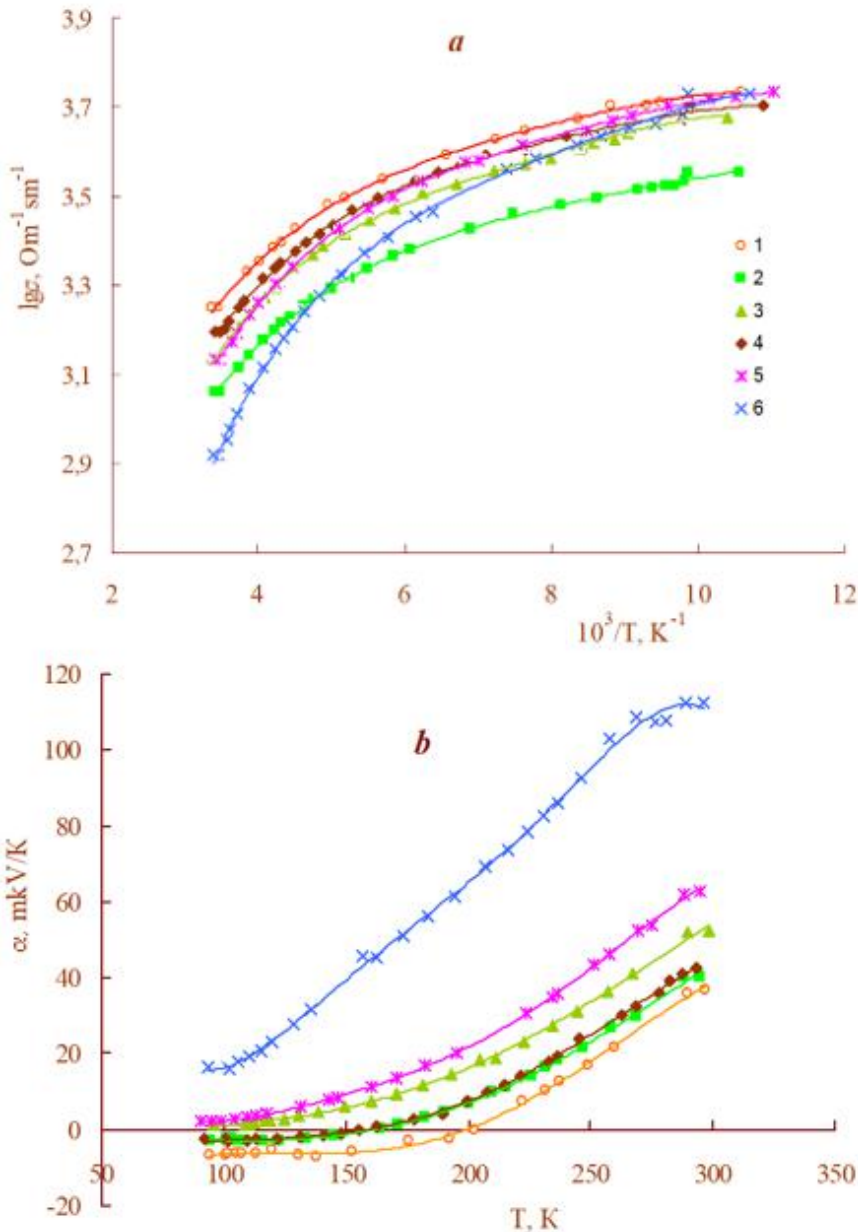
turların kontaktlarının omikliyi onların volt-ampere xarakteristikalarının ölçülməsi ilə təsdiqlənmişdir.

Elektrik parametrlərinin ölçülməsi xətası ~4% təşkil edir.

TƏCRÜBƏ NƏTİCƏLƏRİ VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Təcrübədən alınmış nəticələr 1-ci və 2-ci şəkillərdə verilmişdir.

Birinci şəkillərdə görünür ki, müxtəlif miqdarda artıq qalaya malik nümunələrin hamısının elektrikkeçiriciliyinin temperatur asılılığı metallik xarakterdədir (şəkil 1a)



Şəkil 1. Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<Sn> kristallarının elektrikkeçiriciliyi (a) və termoelektrik əmsalının (b) temperatur asılılıqları. 1÷6 ayrıləri 0; 0,01; 0,05; 0,1; 0,5 və 1,0 at.% artıq qalaya malik nümunələrə aiddir.

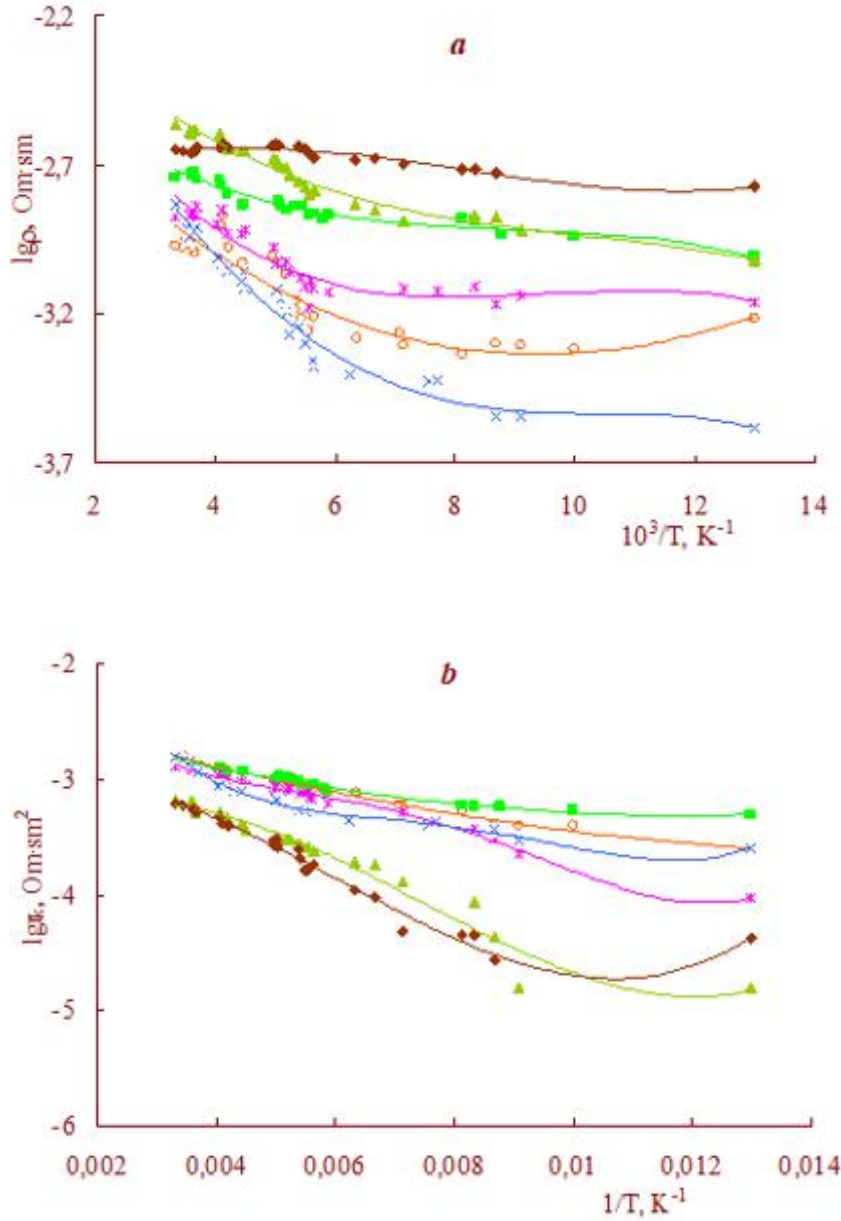
Tərkibində 0,01 at.% artıq qalaya olan nümunənin elektrikkeçirməsi stexiometrik tərkibli nümunənin, keçiriciliyinə nəzərən kiçikdir, Sn-un miqdarının sonrakı artımında σ tədricən yüksələrək stexiometrik tərkibin

elektrikkeçirməsinə yaxınlaşır. Stexiometrik tərkibin termoelektrik əmsalı α otaq temperaturunda müsbət işarəyə malikdir və temperaturun azalması ilə qiymətə kiçilərək ~200K-də işarəsini mənfiyə dəyişir. Tərkibdə artıq

qalayın miqdarı 0,1at.%-də yüksəldikcə ~77K-də α -nın mütləq qiyməti azalır və onun işarəsinin mənfiyə mənfiyə müsbətə dəyişməsi aşağı temperaturlara (~150K-dək) sürüşür. Tərkibində 0,5 və 1,0 at.% artıq qalay olan nümunələrin termoeht bütün temperatur oblastında müsbət işarəlidir. Nümunələrin hamısı üçün α -nın müsbət işarə

rəyə malik olduğu oblastda termoeht əmsalı temperaturla artır.

Kristalların strukturların tərkibində dəyişən cərəyanda təyin olunmuş xüsusi müqavimətləri artıq qalayın miqdarı və temperaturdan analoji asılılığı ilə müəyən olur (şəkil 2a).



Şəkil 2. Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<Sn> kristallarının xüsusi müqaviməti (a) və (In-Ag-Au)-Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<Sn> strukturlarının kontakt müqavimətinin (b) temperatur asılılıqları. İşarələmələr 1-ci şəkiləki kimidir.

(In+4Ag+1Au)-Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<0,05at.%Sn> strukturunun kontakt müqaviməti r_k , stexiometrik tərkibli kristal əsasında strukturun kontakt müqavimətindən ~12 dəfə azdır. Artıq qalayın miqdarının 0,05 at.-%-dən sonra r_k -nin qiyməti tədricən artaraq $2,58 \cdot 10^{-4}$ Om·sm-a çatır. 300K-də də analoji asılılıq müşahidə olunur. Strukturların hamısında temperatur yüksəldikcə r_k artır.

Qurğuşun tellur birləşməsi stexiometriyadan kənarə çıxma ilə kristallaşır. Bu, kristalda qurğuşun alt-qəfəsində $\sim 10^{18} \div 10^{19} \text{sm}^{-3}$ konsentrasiyada elektroaktiv vakansiyaların əmələ gəlməsinə səbəb olur. Hər bir

qurğuşun vakansiyası kristalda 2 ədəd deşik yaradır [1,2].

PbTe kristalı üçün iki valent zonası modeli təklif olunmuşdur [10]. Bu modelə görə 0K-də kristalda əsas valent zona (yüngül deşiklər zonası) keçiricilik zonasının dibindən 0,19 eV, ikinci valent zona (ağır deşiklər zonası) isə 0,36eV məsafədə yerləşir. Temperaturun artması ilə əsas valent zonasının maksimumu $dE_g/dT=4,1 \cdot 10^{-4} \text{eV/dərəcə}$ sürəti ilə keçirici zonanın dibindən uzaqlaşaraq ikinci valent zonanın maksimumuna yaxınlaşır. İkinci valent zonada deşiklərin effektiv kütləsi $\sim 1,2 m_o$ təşkil edir və bu zonanın maksimumu

temperaturla yerini dəyişmir. Nəticədə ~450K-də 1-ci və 2-ci valent zonanın maksimumları arasındakı enerji yarığı yox olur. ~450K-dən yuxarı temperaturalarda yüngül dəşiklər zonası keçirici zonadan ağır dəşiklər zonasına nisbətən daha uzaqda yerləşdiyindən optik keçidlər əsasən ağır dəşiklər zonası ilə keçirici zona arasında baş verir.

PbTe-SnTe sistemində elektronların yüürlüüyü PbTe üçün olan $1600 \text{ sm}^2/\text{V}\cdot\text{san}$ -dən SnTe üçün olan $200 \text{ sm}^2/\text{V}\cdot\text{san}$ -dək dəyişir və ~70% SnTe-a malik tərkibdə $80 \text{ sm}^2/\text{V}\cdot\text{san}$ -yə bərabər minimal qiymət alır. Göstərilən sistemdə SnTe-un miqdarının 30%-nədək valent zonanın strukturu PbTe-un zonasına uyğun olur və buna görə yüürlüük tərkiblə zəif dəyişərək ~400÷500 $\text{sm}^2/\text{V}\cdot\text{san}$ təşkil edir [2, 5].

Bu məlumatlara əsaslanaraq qəbul etmək olar ki, Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te bərk məhluluna daxil edilmiş stexiometriyadan artıq qalay atomları aşağı miqdarlarda (0,05at.% -dək) kation vakansiyaları ilə elektroneytral, və ya birqat ionlaşmış komplekslər yaradaraq sərbəst yükdaşıyıcıların (dəşiklərin) konsentrasiyasını azaldır, yeni kristalın xüsusi müqavimətini artırır. Qalayın miqdarının sonrakı artımında onun kation vakansiyaları ilə qarşılıqlı təsirdə olmayan atomları kristalda əlavə donor mərkəzləri yaradaraq sərbəst elektronların konsentrasiyasını yüksəldir və xüsusi müqaviməti azaldır.

Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te-da α -nın kiçik mütləq qiyməti, bu kristalın qarışıq keçiriciliyə malik olduğunu, α -nın elektron və dəşiklərin termoeqlərinin cəmi ilə təyin edildiyini göstərir. Stexiometrik tərkibli nümunədə elektron və dəşiklərin konsentrasiyasının yaxınlığı, eləcə də elektronların yüürlüüyünün dəşiklərin yüürlüüyündən böyük olması aşağı temperaturalarda α -nın mənfəi işarəyə malik olmasına gətirir. Temperaturun yüksəlməsi ilə ağır dəşiklərin keçiricidəki payı da yüksəlir və nəticədə α işarəsini müsbətə dəyişərək temperaturla artır.

Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te-un uc səthlərini (In-Ag-Au) evtektikası ilə lehimlədikdə, ərintinin komponentləri kristalın kontaktyanı oblastına diffuziya etməklə orada bərk məhlulun komponentləri ilə qarşılıqlı kimyəvi təsirdə olaraq aralıq faza yaradırlar [6]. In, Ag, Au atomlarının AⁿB^m birləşmələri kristallarına diffuziya parametrlərinin [1] təhlili göstərir ki, Ag-un Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te-a diffuziyası daha ehtimaldır. Ona görə qəbul etmək olar ki, Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<Sn> nümunələrinin uc səthləri (In-Ag-Au) ərintisi ilə lehimlədikdə kontaktyanı təbəqə əsasən gümüş atomları ilə zənginləşəcək. Gümüş atomları PbTe kristallarında akseptor səviyyələri yaradır və dəşiklərin konsentrasiyasını ~1,5·10²⁰sm⁻³-dək artırır [1, 11]. Bu səbəbdən, baxılan strukturların kontakt müqaviməti ~2·10⁻⁵Om·sm²-a qədər azalır. Digər tərəfdən, gümüş atomları kontaktyanı oblastda bərk məhlulda

olan tellur atomları ilə birləşərək Ag₂Te şəklində aralıq faza yarada bilər. Yarlanmış aşağı müqavimətli aralıq faza da (In-Ag-Au)- Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<Sn> strukturunun kontakt müqavimətinin azalmasına gətirəcək.

Metal-yarımkeçirici kontaktında cərəyan, əsasən termoelektron emissiyası, sahə emissiyası və termosahə emissiyası mexanizmləri ilə həyata keçir. Bu mexanizmlərdə kontakt müqaviməti ya temperaturla azalır, ya da təqribən sabit qalır. Ərintilərlə alınmış metal-yarımkeçirici kontaktında qeyd olunan mexanizmlərdən əlavə, cərəyan kristalın kontaktyanı sahəsində yaranan və həcmi yüklər təbəqəsini qısa qapayan metal şuntlarla da axa bilər [12]. Hesab etmək olar ki, kristalların uc səthlərini ((In-Ag-Au) ərintisi ilə lehimləməklə kontakt yaradarkən In, Ag, Au atomları Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<Sn> kristallarının struktur defektləri boyunca çökərək metal şuntlar yaradır və həmin şuntlar həcmi yüklər təbəqəsini qapayaraq cərəyan keçməsinə təmin edir. Baxılan bərk məhlul kristalları ilə kontakt ərintisinin qəfəs sabitlərinin müxtəlifliyi kristalın kontaktyanı oblastında əlavə struktur defektlərinin və göstərilən metal şuntların yaranmasına köməklik göstərəcəkdir.

Göründüyü kimi, Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te kristalları və onlar əsasında metal-yarımkeçirici strukturlarda yüldəşıyıcıların əmələ gəlməsi və daşınması mexanizmləri fərqlidir.

NƏTİCƏ

Tərkibində stexiometriyadan artıq 0÷1,0at.% qalay olan Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te monokristalları göyərdilmiş, bu kristallar əsasında (kütlə %95In+4Ag+1Au)-Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te<Sn> metal-yarımkeçirici strukturları yaradılmış, həmin monokristal və strukturların elektrik xassələri 77÷300K intervalında tədqiq edilmişdir. Göstərilmişdir ki, stexiometriyadan artıq qalay atomları 0,05at.%-dək kristalda olan kation varansiyaları ilə elektroneytral və ya birqat ionlaşmış komplekslər yaratmaqla cərəyan daşıyıcıların konsentrasiyasını azaldır xüsusi müqaviməti ρ və termoeql əmsalının α mütləq qiymətini artırır. Qalayın yuxarı miqdarlarında yaranan yeni donor mərkəzləri hesabına ρ azalır. Temperaturla termoeql əmsalı α -ın qiymətinin böyüməsi və işarəsinin dəyişməsi valent zonada ağır dəşiklərin keçiricilikdə payının artması ilə bağlıdır. (In-Ag-Au)-Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te strukturunun kontakt müqavimətinin ~2·10⁻⁵ Om·sm² tərtibində olması, əsasən Ag atomlarının kristalın kontaktyanı oblastında yeni akseptor səviyyələri və aşağı müqavimətli Ag₂Te tipli aralıq faza yaratması nəticəsindədir. Göstərilən kontaktda cərəyan kontakt ərintisi komponentlərinin kristalın kontaktyanı oblastında yaratdıqları metal şuntlarla axır.

[1] Ю.И.Равич, Б.А.Ефимова, И.А. Смирнов. Методы исследования полупроводников в применении халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS. М.: Наука, 1968, 384с.
[2] А.В. Дмитриев, И.П. Звягин. Современные тенденции развития физики термоэлектрических материалов, УФН, 2010,18 с.821-838.

[3] Успехи инфракрасной фотосенсорики. Сборник обзорных статей М.:АО «НПО» Орион» 2021, 480 с.
[4] Г.З. Багеева. Влияние отжига на электрические свойства кристаллов твердого раствора Pb_{0,75}Sn_{0,25}Te со сверхстехиометричными атомами свинца. Transactions of National

- Academy of Science of Azerbaijan, series of physics-mathematical and technical sciences, Physics and Astronomy, 2022, №2, с.80-84.
- [5] *А.С. Охотин, А.А. Ефимов, В.С. Охотин, А.С. Пушкарский.* Термоэлектрические генераторы. М.: Атомиздат, 1966, 320 с.
- [6] *Т.Д. Алиева, Д.Ш. Абдинов.* Неорган. Материалы, 1997, 33, с. 27-38.
- [7] *В.И. Стафеев.* ФТП, 2009,43, с. 636-639.
- [8] *И.А. Дрabbкин, В.Б. Освенский, А.И. Сорокин, В.П. Панченко, О.Е. Нарожная.* ФТП, 2017, 51, с.1038-1040.
- [9] *Т.Д. Алиева, Г.Дж. Абдинова, Н.М. Ахундова, С.З. Джафарова.* Transactions of National Academy of Science of Azerbaijan, series of physics-mathematical and technical sciences, Physics and Astronomy, 2011, XXX, с.126-130.
- [10] *R.N.Tauber, A.A.Machonis, I.V.Cadoff.* J. Appl. Phys, 1966, 37, 4855-4860.
- [11] *Ю.И. Равич, С.А. Немов.* ФТП, 2002, 36, с.3-23.
- [12] *Т.В. Бланк, Ю.А. Гольдберг.* ФТП, 2007, 41, с.1281-1309.

T.D. Aliyeva, G.Z. Bagieva, G.D. Abdinova, N.M. Akhundova

ELECTRICAL PROPERTIES OF METAL-SEMICONDUCTOR STRUCTURES BASED ON $Pb_{0.75}Sn_{0.25}Te<Sn>$ CRYSTALS

Single crystals of the $Pb_{1-x}Sn_xTe$ solid solution with superstoichiometric tin up to 1.0% were grown, metal-semiconductor structures were created on their basis, and the phenomena of electron transfer and physicochemical processes at the interface were studied in them. It was found that excess tin atoms at low contents, compensating for electroactive cationic vacancies, increase resistivity ρ and thermoelectric coefficient α , and at high contents, creating new donor centers, decrease ρ . The increase in α with temperature is due to the increase in the contribution of heavy holes to the conductivity. The contact resistance and its temperature dependence in the studied structures are determined by the diffusion of metal components into the near-contact region of the crystal, the creation by them in this region of new acceptor centers, highly conductive intermediate phases, and metal shunts.

Т.Д. Алиева, Г.З. Багиева, Г.Д. Абдинова, Н.М. Ахундова

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТРУКТУР МЕТАЛЛ-ПОЛУПРОВОДНИК НА ОСНОВЕ КРИСТАЛЛОВ $Pb_{0.75}Sn_{0.25}Te<Sn>$

Выращены монокристаллы твердого раствора $Pb_{1-x}Sn_xTe$ со сверхстехиометричным оловом до 1,0%, созданы на их основе структуры металл-полупроводник, исследованы в них явления переноса электронов и физико-химических процессов на границе раздела. Выяснено, что атомы избыточного олова при малых содержаниях, компенсируя электроактивные катионные вакансии, повышают удельное сопротивление ρ и коэффициент термоэдс α , а при больших содержаниях, создавая новые донорные центры, уменьшают ρ . Рост α с температурой обусловлен ростом при этом вклада тяжелых дырок в проводимость. Контактное сопротивление и ее температурная зависимость в изученных структурах определяются диффузией компонентов металла в приконтактную область кристалла, созданием ими в этой области новых акцепторных центров, высокопроводящих промежуточных фаз и металлических шунтов.

AŞQARLI YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ TERMOMAQNİTİK DALĞALAR

E.R. HƏSƏNOV^{1,2}, Ş.Q. XƏLİLOVA², R.K. MUSTAFAYEVA¹

Bakı Dövlət Universiteti, Z. Xəlilov küç., 23, Bakı, Azərbaycan

Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutu, H.Javid pr-ti, 131 Bakı, Azərbaycan

E-mail: shahlaganbarova@gmail.com

GeAu tipli aşqarlı yarımkeçiricilərdə həyəcanlı maqnit sahələrinin təsiri altında müəyyən tezlikli termomaqnit dalğası yaranır. Hidrodinamik hərəkətlərin sürəti dalğa vektoruna perpendikulyar istiqamətləndirilir. Elektron tutma tezliyi (rekombinasiya zamanı) və dəşik emissiyasının tezliyi müəyyən nisbətlərlə dəyişir. Xarici elektrik sahəsi temperatur gradientinə perpendikulyar yönəldilmişdir. Temperatur qradienti və xarici elektrik sahəsinin digər istiqamətləri üçün həyəcanlanmış termomaqnit dalğası fərqli bir tezlikdə baş verir. Termomaqnit dalğalarının qeyri-sabitliyi şərtləri sabit temperatur qradienti qiymətindən və nümunənin temperaturundan asılıdır. GeAu nümunəsindəki aşqarın ədədi qiyməti termomaqnit dalğalarının həyəcanlanması üçün çox vacibdir. Göstərilən problem xarici maqnit sahəsi olmadan həll edilir. Xarici bir maqnit sahəsinin olması, şübhəsiz ki, termomaqnit dalğalarının oyanması üçün şərtləri əhəmiyyətli dərəcədə dəyişdirəcəkdir. Bu nəzəriyyə bütün dəyişən fiziki kəmiyyətlərin kiçik dalğalanmaları üçün qurulmuşdur. Termoelektrik enerjinin elektron və dəşik hissələri yük daşıyıcılarının yaranması və rekombinasiyasının xarakterik tezlikləri ilə ifadə edilir. Termomaqnit dalğalarının həyəcanlanması üçün şərait tək və ikiqat yüklü mərkəzlər daha aktiv olduqda nəzərə alınır. Şarj daşıyıcıları tam tək və ikiqat mənfi mərkəzlərlə dəyişir. Bu yarımkeçiricilərdə termomaqnit dalğaları görünəndə elektron konsentrasiyalarının dəşik konsentrasiyalarına nisbəti müəyyən qiymətlərə malik olur.

Açar sözlər: cərəyan sıxlığı, termomaqnit dalğaları, aşqarlı yarımkeçiricilər, Nernst-Ettingshausen effekti əmsalı

PACS: 78.55, 73.22.CD, 73.22

GİRİŞ

Keçirici mühitlərdə yük daşıyıcılarının hidrodinamik hərəkətləri dəyişən maqnit sahəsi yaradır ki, bu da sabit temperatur qradienti $\vec{\nabla}T = \text{const}$ olduqda tezliyə malik termomaqnit dalğaları [1] həyəcanlandırır $\omega_T = -cA'k\vec{\nabla}T$ (\vec{k} - dalğa vektoru, A' - Nernst-Ettingshausen effekti əmsalı). İzotrop və anizotrop keçirici mühitlərdə termomaqnit dalğaları uzununa $\vec{k} \parallel \vec{\nabla}T$ və eninə istiqamətlərdə yayıla bilər $\vec{k} \perp \vec{\nabla}T$ [2].

Aşqarlı yük daşıyıcıları zamanla nəsil və rekombinasiya ilə dəyişir və yarımkeçirici qeyri-bərabər və tarazlıq vəziyyətinə keçir. Məsələn, GeAu yarımkeçiricisində, qəfəsdəki qızıl (Au) atomları beş yük vəziyyətində, neytral, tək mənfi yük vəziyyətində və ikiqat mənfi yük vəziyyətində, üçlü mənfi yük vəziyyətində və müsbət yük vəziyyətində qablaşdırılır. Xarici şəraitdən (elektrik sahəsinin mövcudluğu, maqnit sahəsi, temperatur qiyməti və s.) asılı olaraq, bu aşqarlıq səviyyələri az, və ya çox dərəcədə aktivdir. Otaq temperaturunda Ge-də tək və iki dəfə mənfi qızıl çirkələri daha aktivdir [2]. GeAu birləşməsindəki qeyri-sabit vəziyyətlər [3, 4, 5]-də nəzəri cəhətdən daha ətraflı öyrənilmişdir. Təbii ki, GeAu tipli yarımkeçiricilərdə termomaqnit dalğalarının həyəcanlanması elmi maraq doğurur.

Bu nəzəri işdə sabit temperatur qradienti olduqda iki növ yük daşıyıcısı (elektron və dəşik) olan yarımkeçiricilərdə termomaqnit dalğalarının həyəcanlanması şərtlərini öyrənəcəyik. Yükdaşıyıcıların generasiyasını və rekombinasiyasını nəzərə alaraq, GeAu tipli yarımkeçiricilərdə qeyri-sabit termomaqnit dalğalarının həyəcanlanması zamanı xarici elektrik sahəsinin dəyişmə intervalını və generasiya ilə rekombinasiya tezlikləri arasında əlaqəni tapırıq.

PROBLEMIN ƏSAS TƏNLİKLƏRİ

Nümunənin daxilində hidrodinamik hərəkətlərin olması halında aşağıdakı formada elektrik sahəsi yaranır

$$\vec{E}^* = \vec{E} + \frac{[\vec{\nabla}\vec{H}]}{c} + \frac{T}{e} \left(\frac{\nabla n_+}{n_+^0} - \frac{\nabla n_-}{n_-^0} \right) \quad (1)$$

\vec{E} - xarici elektrik sahəsi, $\vec{\nabla}$ - hidrodinamik hərəkətlərin sürəti, \vec{H} - hidrodinamik hərəkətlərdə yaranan maqnit sahəsi, $\frac{T \nabla n_+}{e n_+^0}$ və $\frac{T \nabla n_-}{e n_-^0}$ dəliklərin və elektronların konsentrasiyası dəyişdikdə nümunə daxilində həyəcanlanan elektrik sahələridir.

Elektronların və dəliklərin cari sıxlığı formaya malikdir:

$$\vec{j}_- = -\sigma_- \vec{E}^* - \sigma'_- [\vec{E}^* \vec{H}] - \alpha_- \vec{\nabla}T - \alpha'_- [\vec{\nabla}T \vec{H}] \quad (2)$$

$$\vec{j}_+ = \sigma_+ \vec{E}^* + \sigma'_+ [\vec{E}^* \vec{H}] + \alpha_+ \vec{\nabla}T + \alpha'_+ [\vec{\nabla}T \vec{H}] \quad (3)$$

$$\vec{j} = \vec{j}_+ - \vec{j}_- \quad (4)$$

σ_{\pm} -dəşik və elektron keçiriciliklər, σ'_{\pm} -dəşik və elektron Hall keçiricilikləri, α_{\pm} -dəşik və elektron termoenerji, α'_{\pm} -dəşik və elektron Hall termoenerjisi, \vec{H} -hidrodinamik hərəkətlə həyəcanlanan maqnit sahəsidir.

Problemi xarici maqnit sahəsi olmadan nəzərdən keçiririk və buna görə də $\vec{H} = \vec{H}'$, $H_0 = 0$.

(4)-ə (1-3) əvəz etsək

$$\bar{E} = -\frac{[\bar{g}\bar{H}]}{c} + \Lambda'[\nabla TH] + \frac{c}{4\pi\sigma} \text{rot}\bar{H} + \frac{T}{e} \left(\frac{\nabla n_+}{n_+^0} - \frac{\nabla n_-}{n_-^0} \right) - \Lambda \nabla T \quad (5)$$

alırıq. Burada $\sigma = \sigma_+ + \sigma_-$, $\Lambda = \frac{\alpha}{\sigma}$ - diferensial termogüc, $\Lambda' = \frac{\alpha'\sigma - \alpha\sigma'}{\sigma^2}$ - Nernst-Ettingshausen effektinin əmsalı

$$\begin{aligned} (E', H') &\sim e^{i(\bar{k}\bar{x} - \omega t)} \\ \frac{\partial H}{\partial t} &= -c \text{rot} E \\ H' &= \frac{c}{\omega} [\bar{k}\bar{E}'] \end{aligned} \quad (6)$$

Yük daşıyıcılarının rekombinasiyası və generasiyası mövcud olduqda, elektronlar və dəliklər üçün davamlılıq tənliyi formaya malikdir.

$$\frac{\partial n_-}{\partial t} + \text{div}\bar{j}_- = \left(\frac{\partial n_-}{\partial t} \right)_r, \quad \frac{\partial n_+}{\partial t} + \text{div}\bar{j}_+ = \left(\frac{\partial n_+}{\partial t} \right)_r \quad (7)$$

$$\frac{\partial n_-}{\partial t} = \gamma_-(0)n_{1-}N_- - \gamma_-(E)n_-N, \quad \frac{\partial n_+}{\partial t} = \gamma_+(E)n_{1+}N - \gamma_+(0)n_+N_- \quad (8)$$

Burada N - bir dəfə mənfi mərkəz, N_- - iki dəfə mənfi mərkəz, $n_{1+} = \frac{\gamma_+(0)N_-}{\gamma_+(E)N^0} n_+^0$, $n_{1-} = \frac{\gamma_-(E)N^0}{\gamma_-(0)N_-} n_-^0$ - tərslik vəziyyətində konsentrasiya.

NƏZƏRİYYƏ

Dispersiya tənliyini əldə etmək üçün (5-6-7-8) və tənliyi birlikdə həll etməliyik.

$$\frac{\partial N_-}{\partial t} = \left(\frac{\partial n_+}{\partial t} \right)_r - \left(\frac{\partial n_-}{\partial t} \right)_r \quad (9)$$

$$N = N_+ + N_- = \text{const} \quad (10)$$

Aşağıdakı xarakterik tezlikləri təqdim edirik

$$\nu_- = \gamma_-(E_0)N^0, \quad \nu_+ = \gamma_+(0)N_-^0, \quad \nu_+^E = \gamma_+(E_0)N^0, \quad \nu_-(0) = \gamma_-(0)n_+, \quad \nu_+(0) = \gamma_+(0)n_+^0$$

Bütün $(E', H', n'_\pm) \sim e^{i(\bar{k}\bar{x} - \omega t)}$ dəyişənləri nəzərə alaraq (5-10) tənliyindən E' və n'_\pm üçün aşağıdakı iki tənliyi asanlıqla əldə edirik.

$$\begin{aligned} -i\omega n'_+ + \text{div} \left\{ \bar{g}_+ n'_+ + n_+^0 \mu_+^0 \bar{E}' + \frac{n_+^0 \mu_+^0}{c} [\bar{g}_0 \bar{H}'] + i \frac{n_+^0 \mu_+^0}{e} T \bar{k} \left(\frac{n'_+}{n_+^0} - \frac{n'_-}{n_-^0} \right) + n_+^0 \mu_{1+}^0 [\bar{E}_0 \bar{H}'] + i \bar{k} \alpha_+ n'_+ \right\} = \\ = -\nu_+^E \frac{\nu_+(0)n'_+ - \nu_- n'_-}{i\omega - \Omega} - \nu_+(0)n'_+ \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} -i\omega n'_- + \text{div} \left\{ -\bar{g}_- n'_- - n_-^0 \mu_-^0 \bar{E}' - \frac{n_-^0 \mu_-^0}{c} [\bar{g}_0 \bar{H}'] - i \frac{n_-^0 \mu_-^0 T}{e} \bar{k} \left(\frac{n'_+}{n_+^0} - \frac{n'_-}{n_-^0} \right) + n_-^0 \mu_{1-}^0 [\bar{E}_0 \bar{H}'] - i \bar{k} \alpha_- n'_- \right\} = \\ = \nu_-(0) \frac{\nu_+(0)n'_+ - \nu_- n'_-}{i\omega - \Omega} - \nu_- n'_- \end{aligned} \quad (12)$$

$$\left(1 + \frac{2\omega_T}{\omega} - \frac{2\bar{k}\bar{\mathcal{G}}_0}{a\omega} + i\frac{c^2k^2}{4\pi a\sigma\omega}\right)\bar{E}' = \frac{iT}{e}\bar{k}\left(\frac{n'_+}{n_+^0} - \frac{n'_-}{n_-^0}\right) + \frac{2\Lambda\bar{\nabla}T\gamma}{E_0^2}\bar{E}_0\bar{E}'$$

$$\Omega = \nu_+ + \nu_- + \nu_+(0) + \nu_-(0)$$

$$a = 1 + \frac{2\bar{k}\bar{\mathcal{G}}_0}{\omega}, \bar{\mathcal{G}}_{\pm} = \mu_{\pm}\bar{E}_0$$

(13)-ü (11-12) ilə əvəz edərək, alırıq

$$\left[-i\omega + ik\mathcal{G}_+ - \frac{\mu_+Tk^2}{e} - k^2\alpha_+ + \nu_+(0) + \frac{\nu_+^E\nu_+(0)}{i\omega - \Omega} - \mu_+\varphi\bar{k}\bar{E}_x\right]n'_+ + \left[\frac{n_+^0}{n_-^0} \cdot \frac{Tk^2\mu_+}{e} + \frac{\nu_+^E\nu_-}{i\omega - \Omega} + \mu_+\frac{n_+^0}{n_-^0}\varphi\bar{k}\bar{E}_x\right]n'_- = 0$$

$$\left[\frac{n_+^0}{n_+^0} \cdot \frac{Tk^2\mu_+}{e} - \frac{\nu_-(0)\nu_+(0)}{i\omega - \Omega} + i\mu_-\frac{n_+^0}{n_+^0}\varphi_1\bar{k}\bar{E}_x\right]n'_+ + \left[-i\omega - ik\bar{\mathcal{G}}_- - \frac{\mu_-Tk^2}{e} + k^2\alpha_- + \nu_-(0) - \frac{\nu_-(0)\nu_-}{i\omega - \Omega} - \mu_-\varphi_1\bar{k}\bar{E}_x\right]n'_- = 0$$

$$\varphi = 1 + \frac{2i\bar{k}\bar{\mathcal{G}}_0}{a\omega} + \frac{2i\mu_{1+}}{\mu_+} \frac{c^2k^2}{a^2\omega^2}, \quad \varphi_1 = 1 + \frac{2i\bar{k}\bar{\mathcal{G}}_0}{a\omega} + \frac{2i\mu_{1-}}{\mu_-} \frac{c^2k^2}{a^2\omega^2},$$

işarə etsək

$$\Omega_+ = ik\bar{\mathcal{G}}_+ - ik\bar{\mathcal{G}}_{1+} - k^2\alpha_+ + \nu_+(0)$$

$$\Omega_- = -ik\bar{\mathcal{G}}_- - ik\bar{\mathcal{G}}_{1-} + k^2\alpha_- + \nu_-(0)$$

$$\alpha_+ = \frac{\nu_+(0)}{k^2}, \quad \alpha_- = -\frac{\nu_-(0)}{k^2} \quad \text{olduqda, dispersiya tənlikləri (15-16)}$$

$$\left[-i\omega(i\omega - \Omega) + \omega_+(i\omega - \Omega) + \nu_+(0)\nu_+^E + \bar{k}\mathcal{G}_{+x}A_+(i\omega - \Omega)\right]n'_+ + \left[\frac{n_+^0}{n_-^0}\bar{k}\bar{\mathcal{G}}_{1+}(i\omega - \Omega) + ik\bar{\mathcal{G}}_{+x}\frac{n_+^0}{n_-^0}A_+(i\omega - \Omega) + \nu_+^E\nu_-\right]n'_- = 0$$

$$\left[\frac{n_+^0}{n_+^0}\bar{k}\bar{\mathcal{G}}_{1-}(i\omega - \Omega) - \nu_-(0)\nu_+(0) + ik\bar{\mathcal{G}}_{-x}\frac{n_+^0}{n_+^0}A_-(i\omega - \Omega) + \nu_+^E\nu_-\right]n'_+ + \left[-i\omega(i\omega - \Omega) + \omega_-(i\omega - \Omega) - \nu_-(0)\nu_- - \bar{k}\mathcal{G}_{-x}A_-(i\omega - \Omega)\right]n'_- = 0$$

kimi yazaq.

$$\text{Burada } \bar{k}\mathcal{G}_{\pm x} = \frac{\mu_{\pm}E_1k^2}{\varphi_1} \left(1 + \frac{2\Lambda_0\bar{\nabla}T\bar{E}_0}{E_0^2}\right), \quad \omega_{\pm} = \pm ik\bar{\mathcal{G}}_{\pm} - \bar{k}\bar{\mathcal{G}}_{1\pm}, \quad A_{\pm} = 1 + i\frac{2\bar{k}\bar{\mathcal{G}}_0}{a\omega} + i\frac{2\mu_{1\pm}}{\mu_{1\pm}} \frac{c^2k^2}{a^2\omega^2}$$

$$\bar{k} \perp \bar{v}_0, \quad \mu_- \gg \mu_+, \quad \frac{\nu_-(0)}{\nu_+^E} = \left[\frac{\nu_+(0)}{\nu_-}\right]^{1/3}, \quad E_0 \perp \nabla T \text{ olduqda, (18-19)-dan aşağıdakı dispersiya tənliklərini alırıq}$$

$$x^6 - (b + ib_1)x^5 + (d + i\varphi)x^4 - (\theta + i\theta_1)x^3 + (\gamma + i\gamma_1)x^2 + (r + ir_1)x - u = 0$$

$$x = \frac{\omega}{ck}, \quad b = \frac{4\omega_T}{ck}, \quad b_1 = \frac{ck}{2\pi\sigma} + \frac{\Omega}{ck} + \frac{\mathcal{G}_-k}{ck}$$

$$d = \frac{4\omega_T^2}{c^2k^2} + \frac{c^2k^2}{16\pi^2\sigma^2} - \frac{\Omega_-}{2\pi\sigma} - \frac{\mathcal{G}_+\mathcal{G}_-}{c^2} - \frac{\mathcal{G}_-k}{4\pi\sigma} - \frac{\Omega_+\mathcal{G}_-}{c^2k} - \frac{n_-^0}{n_+^0} \frac{\mathcal{G}_-\mathcal{G}_+}{c^2}$$

$$d_1 = \frac{\omega_T}{\sigma} + \frac{4\omega_T\Omega_-}{c^2k^2} + \frac{2\vartheta_- \omega_T}{c^2k} - \frac{n_-}{n_+} \frac{\vartheta_- \vartheta_+}{c^2}$$

$$\theta = \frac{4\omega_T \vartheta_- \vartheta_+}{c^3k} + \frac{2\omega_T \Omega_+ \vartheta_+}{c^3k} + \frac{2\omega_T \vartheta_- \vartheta_+}{c^3k} - \frac{n_-^0}{n_+^0} \frac{\vartheta_- \vartheta_+ k}{4\pi\sigma c}$$

$$\theta = \frac{2\vartheta_+ \vartheta_-}{4\pi\sigma ck} + \frac{\Omega_+ \vartheta_+ k}{4\pi\sigma c} + \frac{\vartheta_- \vartheta_+ k}{4\pi\sigma c} - \frac{n_-}{n_+} \frac{2\omega_T \vartheta_- \vartheta_+}{c^3k}$$

$$\gamma = \frac{4\omega_T^2 \vartheta_- \vartheta_+}{c^2k^2} - \frac{\vartheta_- \vartheta_+}{16\pi^2 \sigma^2} - \frac{2n_-}{n_+} \frac{\vartheta_- \vartheta_+}{c^2}$$

$$\gamma_1 = \frac{\omega_T \vartheta_- \vartheta_+}{c^2 \sigma} + \frac{2\vartheta_- \vartheta_+}{c^2} \left(2 + \frac{n_-}{n_+} \right) + \frac{2\vartheta_- \vartheta_+ \alpha_+}{c^2}$$

$$r = \frac{2\omega_T \vartheta_- \vartheta_+}{c^2 ck} - \frac{\vartheta_- \vartheta_+ k}{4\pi k \sigma},$$

$$r_1 = \frac{2\omega_T \vartheta_- \vartheta_+ \alpha_+}{c^3 k} - \frac{n_-}{n_+} \frac{\vartheta_- \vartheta_+ k}{4\pi \sigma}$$

$$u = \frac{4\vartheta_- \vartheta_+ \alpha_+ \alpha_-}{c^2}$$

$x = \frac{\omega}{ck}$ И $x = x_0 + ix_1$, $x_1 \ll x_0$ əvəz etsək, (20)-dan

$$\omega = \omega_0 + \omega_1, \quad \omega_0 = \frac{10}{3} \omega_T, \quad x_1 = \frac{\theta_1}{4}$$

alırıq və qeyri-sabitlik üçün alırıq

$$40\omega_T > 3ck\theta_1 \quad (21)$$

$$\frac{n_-}{n_+} = \frac{2\pi\omega_T \sigma \alpha_+}{c^2 k^2} \quad (22)$$

$$\alpha_T = \frac{\mu_+ H_0}{c} \ll 1$$

$$E_0 > \frac{4\omega_T}{k\mu_-} \quad (23)$$

$$E_0 > \frac{c[\Lambda' \nabla T]^{1/3}}{[2\sqrt{2}\mu_+ \mu_-^2]^{1/3}}$$

$$E_0 < E_1 \left(\Lambda' \nabla T \frac{\sigma}{ck} \right)^{1/2}$$

$$\Lambda' \nabla T > \left(\frac{ck}{\sigma} \right)^6 \left[\frac{c}{E_1 (2\sqrt{2}\mu_+ \mu_-^2)^{1/3}} \right]^6$$

$$E_1 = \frac{Tk}{e}$$

Beləliklə, GeAu tipli yuxarıda göstərilən aşqarlı yarımqeçiricilərdə, hidrodinamik hərəkətlər nəticəsində sabit temperatur qradienti olduqda, qeyri-sabit

termomaqnit dalğası həyəcanlanır. Xarici elektrik sahəsi müəyyən bir intervalda dəyişərsə, termomaqnit dalğası həyəcanlanır.

- [1] Л.Э. Гуревич, Э.Р. Гасанов. Теория спонтанных колебаний тока в кристаллах типа германия, легированного золотом, 1969., ФТП т.3, №8, 1201-1206.
- [2] E.R. Hasanov, A.V. Islamzade, H.Sh. Hasanov. Thermomagnetic waves in anisotropic conductors, International Journal on "Technical and Physical Problems of Engineering" (IJTPE), 2016, Ankara, Turkey, Issue 26, Vol. 8 N1, 50-54.
- [3] E.R. Hasanov, M.F. Novruzov, A.Z. Panahov, A.I. Demirel. "Instability of Thermomagnetic Waves in the GeAu Semiconductors with Impurities", India, International Journal of Pure and Applied Physics, 2008, 1, ISSN 0973-1776, Vol. 4, N1, 23-28.
- [4] E.R. Hasanov, M.F. Novruzov, A.Z. Danahov, A.I. Demirel. Energy Generation and Amplitude of Thermomagnetic Waves in the Conducting Medium", London, England, Modern Phys. B, Lett., 2008, 2, Vol. 22, N6, 455-457.
- [5] A.H. Новрузов, Э.Р. Гасанов. Терромагнитные волны в примесных полупроводниках. Баку, Азербайджан, АМЕА, Fizika İnstitutu, "Fizika", 2007, №1-2, cild XIII, 134-136.

E.R. Hasanov, Sh.G. Khalilova, R.K. Mustafayeva

THERMOMAGNETIC WAVES IN IMPURITY SEMICONDUCTORS

In impurity semiconductors of type of GeAu, thermomagnetic wave with a certain frequency appears under the influence of excited magnetic fields. The speed of hydrodynamic motions is directed perpendicular to the wave vector \vec{k} . The frequency of electron capture (at recombination) and the frequency of hole emission vary with certain ratios. The external electric field E_0 is directed perpendicular to the temperature gradient. For other directions of the temperature gradient and the external electric field, the excited thermomagnetic wave occurs with a different frequency. The conditions for instability of thermomagnetic waves depend on the value of the constant temperature gradient and on the temperature of the sample. The numerical values of impurities in a GeAu sample are very important for the excitation of thermomagnetic waves. The stated problem is solved without an external magnetic field. The presence of an external magnetic field, for sure, will significantly change the conditions for the excitation of thermomagnetic waves. This theory is constructed for small fluctuations of all variable physical quantities. The electron and hole parts of the thermoelectric power are expressed by the characteristic frequencies of generation and recombination of charge carriers. The conditions for the excitation of thermomagnetic waves are considered, when singly and doubly charged centers are more active. Charge carriers change with fully singly and doubly negative centers. The ratio of electron concentrations to hole concentrations has certain values when thermomagnetic waves appear in these semiconductors.

Э.Р. Гасанов, Ш.Г. Халилова, Р.К. Мустафаева

ТЕРМОМАГНИТНЫЕ ВОЛНЫ В ПРИМЕСНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

В примесных полупроводниках типа GeAu влиянием возбуждаемых магнитных полей появляется терромагнитная волна с определённой частотой. Скорость гидродинамических движений направлена перпендикулярно волновому вектору \vec{k} . Частота захвата электронов (при рекомбинации) и частота испускания дырок меняются с определёнными соотношениями. Внешнее электрическое поле E_0 направлено перпендикулярно к градиенту температуры. При других направлениях градиента температуры и внешнего электрического поля, возбуждаемая терромагнитная волна происходит с другой частотой. Условия неустойчивости терромагнитных волн зависит от значения постоянного градиента температуры и от температуры образца. Численные значения примесей в образце GeAu имеют очень важные значения для возбуждения терромагнитных волн. Поставленная задача решена без внешнего магнитного поля. Наличие внешнего магнитного поля, наверняка, будет существенно изменять условия возбуждения терромагнитных волн. Данная теория построена при малых флуктуациях всех переменных физических величин. Электронной и дырочной частью термоэдс выражаются характерными частотами генерации и рекомбинации носителей заряда. Рассматриваются условия возбуждения терромагнитных волн, когда однократно и двукратно заряженные центры являются более активными. Носители заряда меняются с полностью однократно и двукратно отрицательными центрами. Отношения концентраций электронов к концентрациям дырок имеет определённые значения при появлении терромагнитных волн в указанных полупроводниках. Значения частоты возбуждаемых терромагнитных волн больше, чем частота возбуждаемых терромагнитных волн в обычных полупроводниках без примесных уровней.

BƏRPA OLUNAN ENERJİ MƏNBƏLƏRİNİN ELEKTRİK STANSİYALARINDA HİDROAKKUMULYASIYA İMKANLARI

ÜLKƏR İZZƏT qızı AŞUROVA

Mingəçevir Dövlət Universiteti,
AZ-4500, Mingəçevir, Dilarə Əliyeva küç. 21
ulker_ashurova@mail.ru

Hidroakkumulyasiya elektrik stansiyaları, artıq qeyd edildiyi kimi, sanki nasos stansiyası və su elektrik stansiyasının birləşməsidir. Suyun həcmi müəyyən hündürlüyə vurmaqla potensial enerji ehtiyatı yaratmaq və sonra bu həcmi enerjisini hidroturbinlərdə istifadə etmək ideyası bir əsrdən çox tarixə malikdir. "Enerji təhlükəsizliyini, rifahını təmin etmək və iqlim məqsədlərinə nail olmaq üçün biz bərpa olunan enerji mənbələrinin böyük potensialını maksimum dərəcədə artırmalıyıq və 2030-cü ilə qədər qitənin Günəş Teravatt Səyahətinə qoşulmaq imkanı verməliyik". Elektrik enerjisi sənayesi milli iqtisadiyyatın əsasını təşkil edir və müasir cəmiyyətin həyatı üçün müstəsna əhəmiyyət kəsb edir.

Açar sözlər: Hidroakkumulyasiya Elektrik stansiyaları (HAES), Bərpa olunan enerji mənbələri (BOEM), Kiçik Su Elektrik Stansiyaları (KSES), Adi Asinxron Maşınlar (AAM)

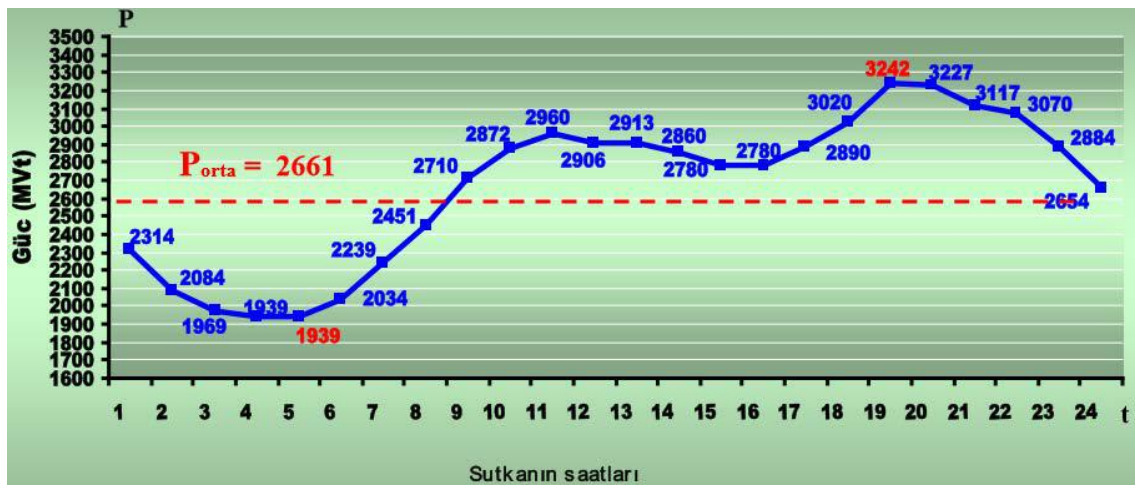
UOT: 621.311

GİRİŞ

Hər bir ölkənin elektrik enerjisi təchizatı mürəkkəb texniki sistemdən ibarət olmaqla onun idarə edilməsi, istismar və perspektiv inkişafı bəzi spesifik xüsusiyyətlərin nəzərə alınmasını tələb edir. Energetika sisteminin strukturu müəyyən sayda, müxtəlif tipdə və gücdə olan elektrik stansiyaları, fərqli gərginliyə, birləşmə sxeminə malik elektrik yarımstansiyaları və elektrik veriliş xətlərindən ibarətdir. Əksər hallarda energetika sistemləri müxtəlif təbii, iqlim və relyef şəraitinə malik olan ölkənin bütövlükdə ərazisini əhatə etməklə qonşu dövlətlərin energetika sistemləri ilə əlaqəli şəkildə fəaliyyət göstərirlər. Göründüyü kimi, müasir şəraitdə energetika sistemi respublika ərazisində yaşayan əhalinin məişət şəraitinə və onun əksər fəaliyyət dairəsinə hiss ediləcək dərəcədə təsir göstərdiyindən, energetika sisteminə baş verən irimiqyaslı qəzalar çoxsaylı tələbatçıları elektrik enerjisindən məhrum edir. Məhz bu səbəbdən, qəzanın milli iqtisadiyyata və cəmiyyətin təhlükəsizliyinə vurduğu ziyanın miqyası dağıdıcı fəlakətlərlə eyniləşdirilə bilər. Ona görə

də, energetika sisteminin etibarlı, dayanıqlı, təhlükəsiz və səmərəli fəaliyyətinin təmin edilməsi milli təhlükəsizliyin tərkib hissəsi kimi həmişə dövlətin diqqət mərkəzində saxlanılır [5].

Dünyada siyasi sabilliyin möhkəmləndirilməsi, enerji resurslarının xaricdən idxalının azaldılması və enerji təhlükəsizliyinin artırılması məqsədilə bərpa olunan enerji mənbələrindən (BOEM) geniş istifadə edilməsi müstəsna əhəmiyyət kəsb edir. Belə ki, məhdud ölkələrin ərazilərində monopoliya şəraitində mövcud olan karbohidrogen ehtiyatlarından fərqli olaraq, BOEM-in yer kürəsində paylanması, demək olar ki, nisbətən daha müntəzəmdir. Bu tükənməz enerji növündən istifadə etməklə elektrik enerjisinin istehsalı, beləliklə də karbohidrogen yanacağı ilə işləyən və ənənəvi elektrik stansiyalarının enerji istehsalında payının azaldılması global məsələlərdəndir. BOEM hesabına işləyən elektrik stansiyalarının həcmi artdıqca onların energetika sisteminə təsirinin yaradacağı problemlər həllini gözləyən əsas məsələlərdəndir. Başlıca problem energetika sisteminə tezliyin tənzimlənməsidir ki, bu məsələdə də HAES-nin rolu əvəzsizdir [1].



Şəkil 1. Xarakterik qış günü üçün sutkalıq elektrik enerjisi istehsalının qrafiki [3].



Şəkil 2. Xarakterik yay günü üçün sutkalıq elektrik enerjisi istehsalının qrafiki [3].

Şəkilə Respublikanın elektrik enerjisi istehsalının xarakterik qış maksimumu və yay minimumu yük qrafikləri göstərilmişdir [3].

Sutkalıq yük qrafiki – aktiv gücün (yarım saatdan çox) sutkanın saatları üzrə dəyişmə əyrisi;

Pik gücü – sutkalıq yük qrafikinin yarım saatdan çox davam edən maksimum gücü;

Orta güc – sutkalıq elektrik enerjisinin sutkadakı saatlara (24 saat) nisbəti;

Qeyri-bərabərlik (dolma) əmsalı – sutkalıq yük qrafikində gecə saatlarında minimum gücün pik saatlarında maksimum gücə nisbəti;

Qoyuluş gücündən istifadə əmsalı – ES-in illik faktiki elektrik enerjisi istehsalının bütün aqreqların qoyuluş güclərinin cəminin illik saatlara (8760 saat) həsilinə nisbəti.

Göründüyü kimi,

Maksimal güc:

$$P_{\max \text{ qış}} = 3242 \text{ MVt}, P_{\max \text{ yay}} = 2874 \text{ MVt}$$

Minimal güc:

$$P_{\min \text{ qış}} = 1939 \text{ MVt}, P_{\min \text{ yay}} = 1672 \text{ MVt}$$

Orta güc:

$$P_{\text{orta qış}} = 2661 \text{ MVt}, \\ P_{\text{orta yay}} = 2307 \text{ MVt}$$

Sutkalıq elektrik enerjisinin istehsalı:

$$W_{\text{qış}} = 65,5 \text{ mln.kVts}, W_{\text{yay}} = 58,1 \text{ mln.kVts}$$

Yük sıxlığı əmsalı:

$$\gamma_{\text{qış}} = P_{\text{ort qış}} / P_{\max \text{ qış}} = 2661 / 3242 = 0,821$$

$$\gamma_{\text{yay}} = P_{\text{ort yay}} / P_{\max \text{ yay}} = 2307 / 2874 = 0,803$$

Sutka ərzində elektrik enerjisi tələbatı nə qədər müntəzəm olarsa, γ və β əmsalları da bir o qədər yüksək olar ki, bu da öz növbəsində energetika sistemində rejimin səlisliyinə və onun qənaətli fəaliyyətinə şərait yaradar [3].

Sutkalıq yük qrafikini xarakterik zonalara bölsək:

1) Bazis hissə absis oxu ilə P_{\min} arasında: Qış 0 MVt-dan ÷ 1939 MVt-a qədər,

$P_{\text{baz}} = 1939 \text{ MVt}$. Yay 0 MVt-dan ÷ 1672 MVt-a qədər, $P_{\text{baz}} = 1672 \text{ MVt}$

2) Yarım-pik hissə P_{\min} -la P_{orta} arasında: Qış 1939 MVt-dan ÷ 2661 MVt-a qədər, $P_{Y/P_{\text{PIK}}} = 722 \text{ MVt}$, Yay 1672 MVt-dan ÷ 2307 MVt-a qədər, $P_{Y/P_{\text{PIK}}} = 635 \text{ MVt}$

3) Pik hissə P_{orta} -dan yuxarı qalan hissə: Qış 2661 MVt-dan ÷ 3242 MVt-a qədər,

$P_{\text{pik}} = 581 \text{ MVt}$, Yay 2307 MVt-dan ÷ 2874 MVt-a qədər, $P_{\text{pik}} = 567 \text{ MVt}$.

Göründüyü kimi, qış aylarında yük qrafikinə tənzimlənməsi üçün generasiyanın gecə çökməsindən yarım-pik səviyyəsinə qaldırmaq üçün qısa vaxt ərzində 1020 MVt gücün artırılması tələb olunur. Bu vəzifəni yerinə yetirəcək pik elektrik stansiyalarının lazımı gücə malik olması energetika sisteminin dayanıqlılığının əsas şərtlərindəndir. Hal-hazırda respublikanın energetika sistemində gecə çökməsində ehtiyac olmadığı halda modul tipli və su elektrik stansiyalarından istifadəsi baza rejimində işləyən İES-lərin gücünün daha da aşağı salınmasına, bu isə öz növbəsində stansiyanın iş rejiminin korlanmasına səbəb olur. Lakin aqreqların hazırlıq səviyyəsindən (işdə - isti, ehtiyatda - soyuq) asılı olaraq iş buraxılma müddətlərinin böyük həddə dəyişdiyi nəzərə alınmalı və buxar-qaz aqreqlarında buxar turbinlərinin bazis gücünə (434 MVt) aid edilməsi bazis gücünü 3734 MVt-a qədər artırmış olacaqdır. Bu hal qaz turbinlərinin işi ilə əlaqəli olacaqdır. Qaz turbinlərinin işə salınma müddəti isti vəziyyətdə 25 dəqiqə olduğundan, onların pik gücü kimi qəbul edilməsi şübhə doğurur və bu gücü yarım-pik güclərinə aid etmək daha doğru olardı. Lakin isti vəziyyətdə modul tipli ES 15 dəqiqəyə işə buraxılır ki, onda bu aqreqları pik güclərinə aid etmək olar. Beləliklə, energetika sisteminin sutkalıq yük qrafikindən və generasiyanın güc strukturundan asılı olaraq (pik, yarım-pik və bazis üzrə), energetika sistemində elektrik stansiyalarının qoyuluş güclərinin dəqiqləşdirilmiş bölgüsünün aparılmasına ehtiyac yaranır. Beləliklə, yaranmış vəziyyətdə bazis stansiyalarının 150 və 300 MVt-lıq enerji blokları istismar qaydalarına uyğun olmayan aşağı gücdə qeyri-efektiv şərəitdə işləməli və ya gecə saatlarında bir neçə

blok dayandırılmalıdır. Dayandırılmış blokların səhər yenidən işə qoşulması isə ehtiyatda saxlama müddətindən asılı olaraq 150 MVt-lıq bloklarda 35-60 ton, 300 MVt-lıq bloklarda isə 60-125 ton şərti yanacaqın izafi sərf edilməsinə səbəb olur. Bu cür mütəmadi dayanmalar (qızma-soyuma tsikli) istilik avadanlıqlarında baş verən qəzalarda da 25%-ə qədər artması ilə nəticələnir. Bu da öz növbəsində qəzalarda avadanlıqların bərpa xərclərinin və xüsusi yanacaq sərfiyyatının artmasına, nəticədə isə bütövlükdə energetika sisteminin texniki-iqtisadi göstəricilərinin aşağı düşməsinə səbəb olur [3].

Son dövrlərdə qlobal istiləşmə ilə əlaqədar, elektrik enerjisi istehsalında ekoloji tələblər sərtləşdirildiyindən, hal-hazırda BOEM-dən, xüsusən külək və günəş elektrik qurğularından istifadəyə böyük önəm verilir. BOEM-in tətbiqi yalnız energetika ilə məhdudlaşmır, o, eyni zamanda bəşəriyyətin üç əsas qlobal probleminin: - Energetika; - Ekologiya; - Ərzaq təminatının həllində mühüm rol oynayır [4].

BOEM-nin tətbiqinin Energetika Sistemində təsiri:

Bərpa olunan enerji mənbələri – Təbiətdə daim mövcud olan və yeniləşən enerji növüdür.

Müsbət cəhəti: Ekoloji cəhətdən təmizliyi; Elektrik enerjisi istehsalında karbohidrogen yanacağına qənaət və ölkənin yanacaq ixracı potensialının artırılması; Energetika sistemində əlavə generasiya güclərinin daxil edilməsi yanacaq tələbatının azalması hesabına ölkənin enerji təhlükəsizliyinin yüksəldilməsi; Paylanmış generasiya güclərinin tətbiqi nəticəsində şəbəkə itkilərinin azaldılması və təchizatın etibarlılığının yüksəldilməsi.

Mənfi cəhəti: Təbiətdən asılı olan dəyişən (fluktasiya) xarakterli gücün energetika sisteminin istehsal-istehlak balansının tənzimlənməsinə təsiri SO-nun istehsal-istehlak üzrə tənzimləmə aparması üçün BOEM-in gücünə uyğun əlavə ehtiyat gücün yaradılması zərurəti, gecə saatlarında İES-lərdə gücün texniki minimumdan da aşağı salınması nəticəsində sistemin texniki-iqtisadi göstəricilərinin korlanması. Energetika sistemində yuxarıda göstərilən mənfi halların qarşısının alınması üçün gecə saatlarında izafi gücün sistemdən (İES-lərdən və gələcəkdə külək, günəş qurğularından) alınaraq bu enerjinin akkumulyasiya edilməsi və pik saatlarında yenidən əlavə ehtiyat güc (enerji) şəklində sistemə qaytarılması tələb olunur. Məqsəd tənzimlənməyən ABOEM və İES-lərdə izafi gücün elektrik enerjisi tələbatının az olduğu saatlarda energetika sistemindən alınaraq, elektrik enerjisinin artan tələbat saatlarında yenidən sistemə qaytarılmasıdır [4].

Beləliklə, Azərbaycan Energetika Sistemində Hidroakkumulyasiya Elektrik Stansiyasının (HAES) tətbiqi və fəaliyyəti yük qrafikində gücün ikiqat tənzimlənməsini (həm generator, həm də tələbatçı – mühərrik kimi) təmin etməklə, İES-lərin (İstilik elektrik stansiyası – yanacağın kimyəvi enerjisini elektrik enerjisinə çevirən stansiya) və bütövlükdə Energetika Sisteminin texniki-iqtisadi göstəricilərinin yaxşılaşdırılmasına imkan verir. Ümumiyyətlə, HAES-ləri müəyyən yüksəklik fərqi ilə malik iki su hövzəsini birləşdirən, həm nasos (pump), həm də turbin (generator) rejimində fəaliyyət göstərən Su Elektrik Stansiyası (SES)

kimi təsəvvür etmək olar. Hal-hazırda bu stansiyaların hidroaqreqlarının konstruktiv təkmilləşdirilməsi nəticəsində onların faydalı iş əmsalı, yəni elektrik enerjisi istehsalı ilə istehlakının nisbəti $\eta = 80\%$ -ə yüksəldilmişdir. Birgə fəaliyyət göstərən SES-HAES-lərdə bütün hidroaqreqlar bir maşın zalında da yerləşdirilə bilər, lakin yuxarı su akkumulyasiyası hövzəsi üçün təbii, və ya süni göllərdən, aşağı hövzə üçün isə dənizdən, və ya yeraltı boşluqlardan (şaxtalardan) istifadə edilə bilər. Hidroakkumulyasiyanın məqsədi enerjiyə az tələbat olan gecə saatlarında, elektrik enerjisini energetika sistemindən almaqla bu enerjini suyun potensial enerjisinə çevirərək su anbarında toplamaq və enerjiyə böyük ehtiyac duyulan axşam pik saatlarında isə bu ehtiyat su enerjisini yenidən elektrik enerjisinə çevirərək, geriye energetika sistemində qaytarmaqdır. Respublikada HAES-lərin tətbiqi və inkişafı üzrə layihələrin həyata keçirilməsi yalnız BOEM-in energetika sistemində inteqrasiyası və energetika sisteminin texniki-iqtisadi göstəricilərinin yaxşılaşdırılması ilə deyil, həm də bu elektrik stansiyalarının bazar şəraitində qəzaəleyhinə əlavə cəldqoşulan ehtiyat güc mənbəyi kimi iqtisadi cəhətdən xeyli gəlirli olması ilə cəlbədidir [3].

Energetika sistemində HAES-lərin nəinki tezliyin tənzimlənməsi və qəza zamanı cəld işə qoşulan qəza əleyhinə ehtiyat güc kimi, həm də enerji keyfiyyətini yaxşılaşdıracaq reaktiv enerji mənbəyi (Sinxron Kompensator - SK) və gecə saatlarında elektrik tələbatçısı kimi fəaliyyət göstərmək qabiliyyəti onun Azərbaycan energetika sistemində tətbiqini zəruri edir. HAES-lərin respublikanın energetika sistemində tətbiqi yük qrafikinin düzləndirilməsi ilə yanaşı, aşağıdakı müsbət amillərlə müşayiət olunacaqdır: Təbiət faktorlarından (külək, günəş və s.) asılı olduğundan tənzimlənməyən BOEM-də istehsal edilən elektrik enerjisinin tələbat qrafikinə uyğunlaşdırılması nəticəsində onun energetika sistemində asanlıqla inteqrasiyası; İES-lərin gecə saatlarında texniki minimum gücündən artıq yüklənməsi hesabına elektrik enerjisi istehsalına xüsusi yanacaq sərfiyyatının azaldılması; İES-lərdə qoyuluş gücündən istifadə əmsalının yüksəldilməsi; İES-lərin yarımpik rejimindən stabil bazis rejiminə keçirilməsi və beləliklə, həm elektrik stansiyalarının, həm də energetika sisteminin texniki-iqtisadi göstəricilərinin xeyli yüksəldilməsi; Energetika sisteminin qəza əleyhinə cəld işə qoşulan və pik saatlarında operativ ehtiyat gücünün artırılması; Qiymətə ucuz gecə enerjisinin bahalı pik enerjisinə çevrilməsi; Energetika sistemində generator-tələbatçı (elektrik mühərriki) kimi HAES-in qoyuluş gücündən ikiqat çox tənzimləmə imkanının yaranması ($P_{gen}+P_{müh}$); Energetika Sistemində enerji keyfiyyətinin yüksəldilməsi və itkilərin azaldılması məqsədilə əlavə həm induktiv, həm də tutum xarakterli reaktiv güc mənbəyinin (SK) yaradılması; Su anbarlarında periodik sirkulyasiya hesabına suyun oksigenlə zənginləşməsi nəticəsində ərazinin flora və faunasının yaxşılaşdırılması; - İstismarda olan su anbarlarının illik faydalı istifadə həcmələrinin artırılması; Tikinti xərclərinin SES-lərdən iki dəfə ucuz başa gəlməsi; SES-dən fərqli olaraq məhdud ərazidə inşasının mümkünlüyü, təbiətdə quruntularının üzə çıxması və şoranlaşma kimi mənfi halların

nisbətən az olması; - Ekoloji mühitin sağlamlaşdırılması.

HAES-in bazar şəraitində fəaliyyətinin effektivliyi.

Hidroakkumulyasiya elektrik stansiyası - müəyyən yüksəklik fərqi malik iki su hövzəsini birləşdirən, həm nasos (pump), həm də turbin (generator) rejimində fəaliyyət göstərən SES-dir. Energetikanın bazar şəraitində fəaliyyəti HAES-dən yalnız ənənəvi əmtəə, yəni güc və elektrik enerjisi mənbəyi kimi deyil, eyni zamanda SO-nun texnoloji xidmətləri üçün, yəni tezlik və gərginliyin (həmçinin reaktiv enerjinin) tənzimlənməsi, aktiv gücün operativ və qəza ehtiyat mənbəyi və s. kimi də istifadə edilməsinə imkan verəcəkdir. HAES-in göstərilən bu əlavə texnoloji üstünlükləri onun həm generasiya mənbəyi, həm də sistemdən artıq gücün alınmasını təmin edən istehlakçı kimi yüksək manevr qabiliyyətinə malik olmasından irəli gəlir. Energetika sistemində tənzimləyici olaraq SO-u qəzanın aradan qaldırılması üçün HAES-in hidroaqreqlərindən operativ ehtiyat kimi dörd səviyyədə istifadə edə bilər: Birinci səviyyədə - operativ heyətin iştirakı olmadan aqreqlərin ehtiyat güc mənbəyi kimi tezliyin avtomatik tənzimlənməsində; Sistemdə generasiya gücünün çatışmazlığı zamanı tezlik relesi vasitəsilə HAES-in ehtiyata saxlanmış aqreqlərinin avtomatik işə salınaraq generatorların tam yüklənməsi, və ya SK rejimindən generator rejiminə keçirilməsi və nasos rejimində işləyən aqreqlərin sistemdən açılması; İkinci səviyyədə - ehtiyat aqreqlərinin (gücün) avtomatik, və ya əl ilə birinci səviyyəli güclərin kompensasiyası üçün minimal tezlik relesinin təsiri ilə işə qoşulması; Üçüncü və dördüncü səviyyədə - bu səviyyələrin həyata keçirilməsi üçün ehtiyatda olan aqreqlərin hazırlıq səviyyəsindən asılı olaraq müəyyən vaxt tələb edilir (dəqiqə, saat, hətta gün). Bu səviyyədəki ehtiyatlar birinci və ikinci səviyyəli ehtiyat gücləri əvəzləmək, və ya proqnozlaşdırılan aktiv güc çatışmazlığını ləğv etmək üçün istifadə edilə bilər. Ümumiyyətlə, ehtiyat aqreqlər fırlanırsa (isti ehtiyat) bir dəqiqəyə (birinci səviyyə), dayanan aqreqlər (soyuq ehtiyat) 15 dəqiqəyə (ikinci səviyyə), İES-də ehtiyat aqreqlər 2 saata yükü dəyişməli, və ya işə qoşulmalıdırlar. Energetika sistemində tənzimləmə tələbatçıları müqavilə əsasında, onların tələbat gücü azaldılmaqla da (məs: tezlikdən avtomatik yüksüzləşdirmə - TAY) aparıla bilər. Beləliklə, SES-lərdə hidroakkumulyasiya rejiminin tətbiqi, yəni onların SES-HAES kimi fəaliyyəti çoxillik su tənzimlənməsinə hesablanmış su anbarlarında suyun mövsüm ərzində akkumulyasiyasının daha intensiv aparılmasına imkan verməklə, energetika sisteminin payız-qış mövsümünə daha yaxşı hazırlığını təmin etmiş olur. Göründüyü kimi, Azərbaycanda çoxillik su anbarına malik olan "Mingəçevir" SES və "Şəmkir" SES-lərdə SES-HAES sistemi mövcud su potensialından daha effektiv istifadəyə imkan verir. Lakin nəzərə alınmalıdır ki, baxılacaq hər iki halda mövcud hidroaqreqlərin nasos-turbin rejiminə çevrilməsi, yalnız gecə saatlarında istehlak yükünü artırmaqla, İES-in gecə çökməsində iş rejimini yaxşılaşdıracaq və ucuz gecə enerjisini bahalı pik enerjisinə çevirəcəkdir. Bu variantlarda energetika sisteminin pik saatlarında əlavə güc ehtiyatı yaradılır.

Digər variant kimi respublikada mövcud SES-lərin fəaliyyətdə olan aqreqlərinə toxunmadan mövcud hidroqovşaqların konstruktiv imkanlarından istifadə edərək çevrilən tipli yeni hidroaqreqlərin quraşdırılması ilə əlaqədar sistemin pik gücünün artırılması məsələsinə diqqət yetirək. Bu məqsədlə "Mingəçevir" SES-də su bəndinin gövdəsində yerləşdirilmiş dib sutullayıcısının çıxışında turbin-nasos tipli çevrilən aqreqlərin quraşdırılması, və ya relyefin imkan verdiyi müvafiq ərazidə müstəqil HAES-in (Hidroelektrik stansiyası – suyun mexaniki enerjisini elektrik enerjisinə çevirən stansiya) tikintisini nəzərdən keçirək. Yekun olaraq, HAES-in energetika sistemində fəaliyyətinin araşdırılmasını aşağıdakı dörd variantın texniki-iqtisadi müqayisəsi əsasında apararaq daha effektiv variantı üstün variantı seçək:

1. "Mingəçevir" SES-in üç hidroaqreqlərinin (50%) çevrilən hidroakkumulyasiya rejiminə keçirilməsi, yəni SES-HAES kimi fəaliyyəti;
2. "Şəmkir" SES-in hər iki hidroaqreqlərinin (100%) çevrilən hidroakkumulyasiya rejiminə keçirilməsi, yəni SES-HAES kimi fəaliyyəti;
3. "Mingəçevir" SES-in su bəndində dib sutullayıcısının çıxışında turbin-nasos tipli çevrilən hidroaqreqlərin quraşdırılması;
4. Relyefin imkan verdiyi münasib ərazidə müstəqil HAES-in inşası.

Belə ki, SES-HAES-lər çoxsululuq dövründə 24 saat generasiya rejimində işlədikləri periodda akkumulyasiya rejimindən istifadə edilməsə də, son illərdə ölkəmizdə çayların azsululuq dövründə, yəni su anbarını normal səviyyəyə qədər doldurmaq mümkün olmayan illərdə çaylardan su anbarına daxil olan suya toxunmadan, payız-qış mövsümünə kimi anbara lazımı su ehtiyatı toplamaq məqsədilə aqreqlər akkumulyasiya-generasiya rejimində fəaliyyət göstərmək imkanına malikdirlər. Beləliklə, ilin azsululuq dövrü ərzində HAES-lərdən nasos-turbin rejimində intensiv istifadə etməklə anbarlarda yaradılacaq su ehtiyatlarından elektrik enerjisinə ehtiyacın artdığı payız-qış mövsümündə energetika məqsədləri üçün, suvarma dövründə isə kənd təsərrüfatında əkin sahələrinin sudan məhdudiyətsiz istifadəsinə imkan yaratmış olur.

Azərbaycanda çayların ümumi sayı 8359-a bərabərdir. Onlardan 8188-nin uzunluğu 26-50 km, 40-nin uzunluğu 51-100 km, 22-nin uzunluğu 101-500 km, 2-nin uzunluğu isə 500 km-dən çoxdur. Uzunluğu 100 km-dan çox olan çayların 11-i tranzit çaylardır. Göründüyü kimi, Respublikada kifayət qədər çaylar mövcuddur və bu çayların hidroenergetika potensialından istifadə edilməsi böyük əhəmiyyət kəsb edir. Kür çayı Azərbaycanda elektrik enerjisi verə bilən ən böyük çaydır ki, bu çay qolları ilə birlikdə Cənubi Qafqazın hidroresurslarının potensial ehtiyatının 40%-ni, texniki imkanına görə 19%-ni və iqtisadi cəhətdən effektiv olan hidroresursların isə 18%-ni təşkil edir. Hidroelektrik stansiyalar axan suyun kinetik enerjisini elektrik enerjiyə çevirməyə xidmət edən qurğular kompleksindən ibarətdir.

Bir çox hallarda, nasosla işləyən elektrik stansiyasının tikintisini nəzərdən keçirərkən, onun fəvqəladə ehtiyatda istifadəsinin mümkünlüyü həlledici amildir.

Belə ki, enerji sistemində fəvqəladə hadisə baş verdikdə, böyük generasiya mənbəyi sıradan çıxdıqda, işləyən nasosla işləyən anbar elektrik stansiyasını tez bir zamanda söndürmək mümkündür. Bu, məsələn, metallurjiya zavodu kimi bir istehlakçının söndürülməsindən daha az zərərə səbəb olacaqdır. Bundan əlavə, bir neçə dəqiqə ərzində SES aqreqləri turbinli iş rejiminə keçə bilər və bununla da enerji təchizatı kəsilməyəcək. Bunun üçün nasosla işləyən elektrik stansiyasının yuxarı hovuzlarında 1,5-3 saat ərzində təcili qısamüddətli istifadə üçün nəzərdə tutulmuş əlavə su təchizatı tələb olunur. Həmçinin nasoslu anbarların “isti gözləmə rejimində”, yəni fırlanma rejimində işləməsi nəzərdə tutulur. Sinxron kompensator rejimində şəbəkəyə qoşulmuş qurğuların (Elektrik qurğusu – elektrik enerjisinin istehsalı, ötürülməsi, paylanması və digər enerji növünə çevrilməsi üçün nəzərdə tutulmuş maşın, aparat, xətt və köməkçi avadanlıqlar) eyni zamanda, qəza baş verdikdə, bir neçə on saniyə ərzində nasosla işləyən elektrik stansiyası tam gücü ilə işə düşür, enerji sisteminin itirdiyi enerjini kompensasiya edir və qəzanın nəticələrini aradan qaldırmağa imkan verir. Pompalı (hidroakkumulasiya) anbar elektrik stansiyasının belə istifadəsi böyük əhəmiyyət kəsb edir, çünki başqa ehtiyat elektrik stansiyalarının yaradılmasına ehtiyac yoxdur.

Adi sinxron maşınlardan fərqli olaraq, AAM-in rotoru bir-birindən 90° bucaq altında sürüşdürülmüş iki simmetrik üçfazlı təsirləndirici dolaqlara malikdir. Bu dolaqlara statik tezlik çeviriciləri vasitəsilə verilən gərginliyin amplituda qiymətini və faza sürüşməsinə dəyişməklə, dolaqların yaratdığı ümumi maqnit sahəsini həm qiymətcə, həm də onun maqnit oxunu rotora görə müəyyən bucaq qədər dəyişməklə yanaşı maqnit selini rotora görə fırlatmaq da mümkün olur. Əgər rotor dolağına verilən gərginliyin tezliyi rotorun fırlanma tezliyini sinxron sürətə qədər tamamlarsa, onda bu maqnit sahəsinin statorda yaratdığı gərginliyin tezliyi şəbəkə tezliyinə bərabər olacaqdır. Bu xüsusiyyət HA-nın nasos rejimində rotorun dövrlər sayının dəyişəcəyi hallarda ona verilən gərginliyin tezliyini tənzimləməklə AAM-in elektrik hərəkətverici qüvvəsini (E) şəbəkə gərginliyinin tezliyi ilə eyniləşdirmək (sinxronlaşdırmaq) mümkün olur. Beləliklə, su anbarında səviyyənin dəyişməsi ilə əlaqədar suyun təzyiq və həcmünün müxtəlif qiymətlərində HA-nın nasos rejimində AAM-in təsirləndirici dolaqlarına verilən gərginliyin tezliyini, amplituda qiymətini və bucaq sürüşməsinə dəyişməklə adi sinxron maşınlarla müqayisədə rotorun sürətinin dəyişməsinə baxmayaraq daha yüksək FİƏ almaq mümkündür. AAM-də sürətin dəyişdirilməsinin mümkünlüyü FİƏ-ni 5% artırır və su təzyiqinin dəyişməsi ilə əlaqədar sürəti dəyişməyə imkan verir ki, bu da əlavə elektrik enerjisi istehsalına və ya qənaətinə imkan verir və turbində yaranan dağıdıcı təsirin (kavitasiyanın) azalmasına hesabına avadanlığın aşınmasının qarşısı da xeyli alınmış olur.

Konsentrasiya edilmiş günəş elektrik stansiyası kimi tanınan günəş şüalarını qəbuledici adlanan dəqiq bir nöqtədə cəmləşdirən güzgülər var ki, orada günəş istiliyini saxlayan və daşıyan istilik daşıyan maye var. İstilik qəbuledici mayeni buxara çevirir və bu, turbinə enerji vermək üçün boru sistemi vasitəsilə ötürülür. Turbinin istehsal etdiyi mexaniki enerji daha sonra onu

elektrik enerjisinə çevirən alternatora ötürülür. Günəş radiyasiyası elektrik stansiyasının fotovoltaiq massivindəki bütün günəş panelləri tərəfindən tutulur. İnverter günəş panelləri tərəfindən istehsal olunan davamlı cərəyanı alternativ cərəyana çevirir ki, transformator tərəfindən orta gərginlikli cərəyana çevrilsin. Nəzarət sistemi elektrik stansiyasının işinə nəzarət edir və yaranan yaşıl enerjini başqaları üçün əlçatan etmək üçün onu elektrik şəbəkəsinə qoşur.

Külək Elektrik Stansiyaları (KSES - külək enerjisini elektrik enerjisinə çevirən stansiya) sort və təbii şəraitdə uzaq ərazilərdə əhalinin həyat şəraitinin və təhlükəsizliyinin səviyyəsinin artırılmasına şərait yaradır. KSES-lər enerji istehsal edən müəssisələrdə fəvqəladə hallar zamanı strateji vacib obyektlər üçün ehtiyat enerji mənbəyi qismində çıxış edir. İri enerji sistemlərin gözlənilməz qəza açılmaları zamanı KSES-lər əhalinin elektrik enerjisi və istiliklə təchizatının təhlükəsizliyini artırır. KSES-lərin dağılmasının əsas səbəbi isə artıq suyun bəndin üzərindən keçməsi, hidro-mexaniki avadanlığın imtinası, xidməti heyətin səhvləri, hidrometeoroloji müşahidələrin verilənlərinin çatışmazlığıdır. KSES-lərin zədələnməsindən dəyən zərər iri enerji obyektləri ilə müqayisədə olduqca azdır. KSES-lər seysmikliyi artırmır, zəlzələ zamanı daha təhlükəsizdir. KSES-lərin avadanlıqlarının həm özlərinin, həm də bütövlükdə onların təbii sistemlər üçün nisbətən təhlükəsizliyi, ucuz və qısa tikinti müddətinə malik olması, texniki cəhətdən əlçatan olması, YUNESKO-nun hidrologiya, ətraf mühitin qorunması, enerji resursların istismarı üzrə yeni üsulların işlənməsi və enerji obyektlərinin qorunması üzrə məqsədləri ilə uzlaşır. KSES-lər paylanmış enerji istehlakçıları olan izoleolunmuş rayonların elektrifikasiyasına imkan verir. Birləşmiş enerji sistemlərinin tərkibində etibarlı maneəvli enerji mənbəyi qismində səmərəlidir. KSES-lər təsərrüfatın müxtəlif sahələrini su resursu ilə təmin edir. Tikinti və istismar zamanı böyük kapital qoyuluşu tələb etmir. İnvestorların axtarış-tapılmasını asanlaşdırır. Qısamüddətli tikinti, qurğuların hissələrinin unifikasiya edilməsi və nümunəvi layihələr zamanı öz xərcini tez ödəməyə zəmanət verir. Hidroqovşağın mərhələli tikintisi və generasiya gücünün tədricən artırılması zamanı kapital qoyuluşunun mərhələlərlə bölünməsinə təmin edir. Konstruksiyaların etibarlılığı, istismarın sadə və xərclərinin az olması KSES-lərin tikilməsini regionların və yerli enerji sistemlərin əsas məsələlərinə çevirir. Onların tikilməsi istismar edilməsinin maliyyələşdirilməsinin enerji istehlakçılarının və yerli investorların hesabına aparılmasına imkan verir. İrimiqyaslı energetikaya əlavə olunmaqda kiçik energetika enerji təchizatının etibarlılığını artırır və çayların hidroenergetik potensialından daha səmərəli istifadə etməyə şərait yaradır. Üzvi yanacaqda işləyən elektrik stansiyasını əvəz etdikdə, hava mühiti sağlamlaşır və atmosferə atılan qaz-xanxana qazlarını azaldır. Optimalıq meyarına cavab verir, ətraf mühitə minimal təsir etməklə insanların tələbatını ödəyir və səth axınlarının dayanıqlı torpaqaltı axınlara çevrilməsinə yardımçı olur. Sahillərin yuyulmasının azalma tendensiyası müşahidə edilir. Milli iqtisadiyyatın və ənənəvi fəaliyyət sahələrinin yenidən yaradılmasına və yüksəlişinə görə şərait yaradır. Yeni yaşayış sahələrinin elektrik enerjisi ilə təminatı zamanı

ekoloji nöqteyi-nəzərdən təhlükəsiz və səmərəlidir. KSES-lərin su anbarları balıqçılıqda, istirahət, kurort zonaları və ovçuluq təsərrüfatının təşkili zaman intensiv surətdə istifadə edilir. Fövqəladə hallar zamanı strateji vacib obyektlər üçün ehtiyat enerji mənbəyi qismində çıxış edir. İri enerji sistemlərin gözlənilməz qəza açılmaları zamanı KSES-lər əhalinin elektrik enerjisi və istiliklə təchizatının təhlükəsizliyini artırır. Eyni zamanda, nisbətən aşağı gücə malik mərkəzləşdirilmiş şəkildə idarə olunmayan bərpa olunan enerji mənbələri ayrı bir ərazinin enerji istehlakında yalançı azalma effekti yaradır. Onların yaratdığı enerji daşıyıcılarının (günəş, külək) cərəyan enerji intensivliyinin gözlənilməzliyi ES-nın etibarlılıq göstəricilərinə və nəticədə tələb olunan mərkəzləşdirilmiş enerji ehtiyatının miqdarına təsir göstərir.

NƏTİCƏ

BOEM-in bəşəri təsiri nəticəsində Energetika sisteminin etibarlı, dayanıqlı, təhlükəsiz və səmərəli fəaliyyətinin təmin edilməsi milli təhlükəsizliyin tərkib hissəsi kimi həmişə dövlətin diqqət mərkəzində olmalıdır. Son illərdə karbohidrogen mənbələri ilə əlaqədar

dünyada yaranan münaqişələrin həlli və siyasi stabilliyin möhkəmləndirilməsi, enerji resurslarının xaricdən idxalının azaldılması və enerji təhlükəsizliyinin artırılması məqsədilə BOEM-dən istifadə müstəsna əhəmiyyət kəsb edir. Məhdud ölkələrin ərazilərində monopoliya şəraitində mövcud olan karbohidrogen ehtiyatlarından fərqli olaraq, BOEM yer kürəsində demək olar ki, bərabər surətdə paylanmışdır. Gələcəkdə respublikanın energetika sistemində aparılacaq struktur islahatları paylanmış generasiya qurğularının, xüsusən BOEM-in inkişafına güclü təkan verəcəkdir. BOEM-də enerji istehsalının getdikcə ucuzlaşması, ötürücü şəbəkə itkilərinin olmaması, təchizatçıya yaxınlığı səbəbindən daha etibarlı olması bu enerjinin geniş və üstün inkişafına əlverişli şərait yaradacaqdır. Bərpa olunan enerji mənbələrindən (BOEM) istifadəyə əsaslanan elektrik enerjisi istehsalı texnologiyalarının inkişafı elektrik enerjisi sistemlərinin (EES) strukturunu və idarəetmə prinsiplərini əhəmiyyətli dərəcədə dəyişir. Bərpa olunan enerjinin aşağı qiyməti onların insan fəaliyyətinin demək olar ki, bütün sahələrində bir neçə kVt-dan yüzlərlə MVt-a qədər elektrik stansiyalarının elektrik enerjisinin geniş diapazonunda geniş tətbiqinə kömək edir.

- [1] *В.Ю. Синюгин, В.Г. Маргук.* Гидроаккумулирующие электростанции в современной электроэнергетике, Москва, изд. НЦ ЭНАС, 2008.
- [2] Международное Энергетическое Агентство, диалог по энергетической политике «Системная интеграция возобновляемых источников энергии», Астана, 3-5 июля 2012 г.

- [3] *Т. Cəfərov.* “Bərpa Olunan Enerji Mənbələrinin Energetika Sistemində inteqrasiyasında Hidroakkumulyasiya Elektrik Stansiyalarının rolu” Bakı 2013.
- [4] *A.M. Kərimov, R.X. Məmmədov.* Energetika və Enerji resursları, Bakı - “Elm” 2009, səh. 140.
- [5] *N.A. Yusifbəyli, V.X. Nəsimov, R.R. Əlizadə.* Elektroenergetikanın inkişafının bəzi məsələləri “Az.ET və LAEİ” Elmi Əsərlər Toplusu. Bakı-Elm 2010, ISB 5-8066 1696-2, s.17-31.

U.I. Ashurova

POSSIBILITIES OF HYDROACCUMULATION IN POWER PLANTS OF RENEWABLE ENERGY SOURCES

Hydroaccumulation power plants, as already mentioned, are a combination of a pumping station and a hydroelectric power station. The idea of creating a potential energy reserve by increasing the volume of water to a certain height and then using the energy of this volume in hydroturbines has a history of more than a century. "To ensure energy security, prosperity and meet climate goals, we must maximize the enormous potential of renewable energy sources and enable us to join the continent's Solar Terawatt Journey by 2030."The electric power industry is the basis of the national economy and is of exceptional importance for the life of modern society.

У.И. Ашурова

ВОЗМОЖНОСТИ ГИДРОАККУМУЛЯЦИИ В ЭЛЕКТРОСТАНЦИЯХ ВОЗОБНОВЛЯЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ ЭНЕРГИИ

Гидроаккумулирующие электростанции, как уже было сказано, представляют собой сочетание насосной станции и гидроэлектростанции. Идея создания запаса потенциальной энергии путем нагнетания объема воды на определенную высоту и последующего использования энергии этого объема в гидротурбинах имеет более чем столетнюю историю.

«Для обеспечения энергетической безопасности, процветания и достижения климатических целей мы должны максимально использовать огромный потенциал возобновляемых источников энергии и предоставить возможность присоединиться к Солнечному тераваттному путешествию континента к 2030 году»

QAZ TURBİN ELEKTRİK STANSİYALARININ FAYDALIĞININ ARTIRILMASI

ŞİXƏLİYEVƏ SƏADƏT

*Mingəçevir Dövlət Universiteti, Azərbaycan**saadaasmar@mail.ru, 051 758 57 83*

Təqdim olunan işdə məqsəd qaz turbin qurğusu ilə elektrik stansiyasının energetik səmərəliliyinin artırılmasının texniki və texnoloji həllərini nəzərdən keçirməkdir. Burada ətraf mühitin yüksək hərərətində mühərriklərin qaz dinamik parametrlərini aşağı hərərət səviyyəsindəki kimi saxlamaq üçün üsullar təqdim olunur. Kompresorun girişində dövrü havanın duzlardan təmizlənmiş suvarma su vasitəsilə soyudulmasının texniki həlli, və ya absorpsiyalı brom-litium soyuducu qurğuların istifadəsi həlli təklif olunur. Kombinə edilmiş dövrəli buxar-qaz qurğuların istifadəsi qaz turbinli qurğularının işlənmiş qazlarının itirilmiş potensialının hesabına əlavə elektrik enerjisi istehsal etməyə imkan verəcəkdir.

Açar sözlər: istilik səmərəliliyinin artırılması, qaz turbin elektrik stansiyası, kompressor, enerji sərfiyyatı, soyutma sistemi
UOT 621. 314

GİRİŞ

Bildiyimiz kimi, Azərbaycanın qurucusu və hər-tərəfli inkişaf strategiyasının müəllifi Ulu Öndər Heydər Əliyev energetika sahəsində misilsiz işlər görüb. Buna misal olaraq Cənubi Qafqazda ən böyük gücə malik Azərbaycan İstilik Elektrik Stansiyasının tikilməsi idi. Bu gün Ulu Öndərin qoyduğu inkişaf strategiyasının layiqli davamçısı Azərbaycan Respublikasının Ali Baş komandanı İlham Əliyevdir. Yeni gücə malik Qaz turbinli İstilik Elektrik Stansiyasının qurulmasıdır.

Neft və qaz yataqlarında eyni keçən neft qazının (NQ) aşağı təzyiqdə rəşional istifadəsi yatağın səmərəli işlənməsi üçün prioritet vəzifələrdən biridir. NQ-ın utillizasiyası üçün qaz turbinli elektrik stansiyalarının (QTES) istifadə olunur. Belə olduqda, stansiyada istehsal olunan elektrik enerjisi öz xüsusi sərfiyyatını təmin edir və obyektə xarici enerji sistemindən müstəqil edir, bu da ucqar rayonlar üçün çox faydalı olur.

QTES-rin istismarı ikinci dərəcəli enerji ehtiyatları və işlənməmiş zəhərli qazların emissiyalarının formalaşması ilə əlaqələndirilir, buna görə də, elektrik generatorlarının rəşional yüklənməsini təmin etmək və qaz turbin aqreqatlarının (QTA) texnoloji sistemlərinin təkmilləşdirilməsi problemi var [3].

Generasiya edən qaz turbinlərinin faydalı iş əmsalının pasport dəyəri (səmərəlilik əmsalı) 38%-i keçmir və əslində iş şəraitində daha da aşağıdır ki, bu da tulla-nan qazların hesabına istilik enerjisinin itirilməsi ilə əlaqəlidir. Qaz turbinlərinin istilik səmərəliliyini artırmaq işlənməmiş qazların istiliyindən rəşional istifadə sa-yəsində mümkündür.

200–300°C temperaturda atmosferə baca vasitəsilə buraxılan həddindən artıq istiliyin bərpası, səmərəliliyi artırmaq üçün bir yoldur, həm də istehsalın dayanıqlığının artırılması yoludur. Aşağıda qeyd olunan ədəbiyyatda mərkəzdənqaçma kompressorlarını idarə etmək üçün qaz turbinlərinin səmərəliliyinin artırılmasına dair elmi tədqiqatlar təqdim edilmişdir. Təlimatda enerjiyə qənaət edən texnologiyaların tətbiqi üzrə dünya təcrübəsi, neft və qaz sənayesində enerjiyə qənaət edən texnologiyalar haqqında qeyd edilmişdir [2-5].

MƏSƏLƏNİN TƏHLİLİ

QTQ-nin rəşional istifadə yollarını təhlil edərək qaz turbininin işlənməmiş qazlarının istiliyi nəinki nəzərə

alınmalıdır, sistemin enerji ehtiyaclarını, eyni zamanda sistemin xaricindəki tələbləri də səmərəli təmin edəcək ətraf mühitlə inteqrasiya, iş şəraitindəki ekoloji komponenti yaxşılaşdırmaq.

Gedən qazların istiliyindən istifadə etməyin yollarından biri buxar-qaz turbinli kombinə edilmiş dövrəli qurğuların istifadəsidir.

Qərb ölkələrində BQQ-rin payı qoyulmuş gücün orta hesabla 25-30%-ni təşkil edir. Eyni zamanda təbii qazın əhəmiyyətli payı olan ölkələrin elektrik enerjisi istehsal strukturunda BQQ-lərin payı davamlı artır. Ümumilikdə demək olar ki, bütün dünyada istismara verilmiş elektrik stansiyaların əsasında 70% BQQ-lər fəaliyyət göstərir. Ən son yüksək texniki səviyyəyə nail olmaqda mühüm rol QTQ və BQQ - qaz turbinlərinin əsas xarici firma istehsalçıların geniş texniki və sənaye əməkdaşlığının həyata keçirilməsi oynayır [9].

Generator QTQ-nin səmərəliliyini və F.İ.Ə-ni artırmaq üçün daha bir yol absorpsiyalı bromid-litium qurğusunun (ABLQ) istifadəsidir. Yay zamanı qaz turbinindəki sovurulan havanın temperaturunun artması nəticəsində istehsal olunan elektrik enerjisinin həcmi azalır, yanacaq qazının sərfiyyatının həcmi isə artır. Kompresor girişində havanın müxtəlif texniki soyutma sxemləri mövcuddur, bunların arasında ABLQ-nin istifadəsi ən perspektivlidir. ABLQ qaz turbininin işlənməmiş qazlarının istilik enerjisi hesabına işləyən soyuducu qurğudur. ABLQ-də soyuducu kimi sudan, absorber kimi isə bromid-litium konsentrat məhlulundan istifadə olunur.

Qaz turbinində açıq havanın yüksək temperaturunda istehsal olunan elektrik enerjisinin azaldılması problemini həll etmək üçün, soyuq suyun ABLQ-dən +5...+10°C temperaturda keçəcəyi bir istilik mübadilə qurğusunun quraşdırılması təklif olunur. ABLQ tərəfindən yaradılan soyuq, qaz turbininin girişində tedarük havasını +15... +20°C soyutmağa xidmət edir.

ABLQ kimi birbaşa işlənməmiş tullantı qazları və isti su/buxar istilik qazanlarından istifadə edilə bilər. Beləliklə, soyuq əsasən tullantı istilik mənbələri hesabına əmələ gəlir [1].

Təsiri aşağıdakı kimidir. QTU-lar daimi hava axını ilə normal işləyir. Turbinə verilən havanın temperaturun 40 ilə 15°C arasında düşməsi QTU gücünün 30%

azalmasının qarşısını alır, bu da turbinin qəbuluna yüksək təzyiqlə hava verildikdə baş verəcəkdir. Verilən havanın temperaturundan asılı olaraq bir qaz turbininin elektrik və istilik gücünün dəyişməsinin qrafiki şəkil 1-də göstərilmişdir.

Mövcud gücü yüksək səviyyədə saxlamaq üçün iki istiqamət var:

- davamlı və ya dolaylı soyutma sistemləri;
- buxarlandırıcı və ya birbaşa soyutma sistemləri.

Dolaylı soyutma sistemlərində havanın soyudulması kompressorun yuxarı axınında yerləşən səthi istilik dəyişdiricisi vasitəsilə həyata keçirilir. Bu istilik dəyişdiricisinə su dövrü soyuducudan, və ya maye ilə soyutma mənbəyinin yığıma sistemindən gələ bilər. Bu cür sistemlər əhəmiyyətli investisiya xərcləri və yer tələb edir, lakin onlarda havanın soyuma səviyyəsi havanın nisbi rütubətindən asılı deyil [8].

Bunun əksinə olaraq, birbaşa soyutma sistemləri aşağı quraşdırma xərcləri ilə xarakterizə olunur, ölçü tələbləri çox məhduddur və işləməsi üçün lazım olan enerji əhəmiyyətsizdir. Onların əsas məhdudiyyəti havanın temperaturunun yaş lampa temperaturundan aşağı soyudulmasıdır. Əslində bu sistemlər yüksək təzyiq altında (7-dən 20 MPa-a qədər) demineralizasiya

edilmiş suyu hava axınına çiləmə üsulu ilə havanı səriləşdirir [6-7].

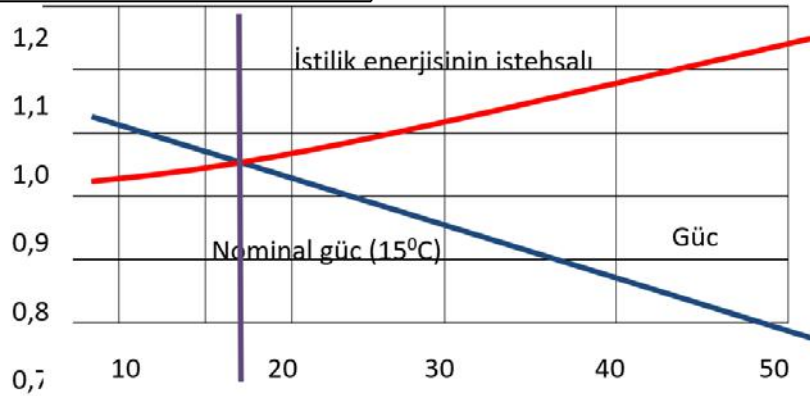
Birbaşa soyutma sistemində (buxarlandırıcı soyuducu, və ya giriş nəmləndiricisi) isti hava axını su ilə birbaşa təmasda olur. Axırncı istiliyi suya ötürür, nəticədə su daimi istilik transformasiyası səbəbindən buxarlanır və soyuyur (şəkil 2).

Nəmləndirildikdə, soyutmaya əlavə rütubət olaraq nəticədə havanın sıxlığı artır, çox yüksək bir doymaya yaxın səviyyəyə çatır. Sözügedən sistem, optimal istehsalı qoruyaraq yay mövsümündə aqreqatın gücünü mümkün qədər məhdudlaşdırmağa, və ya onu istisna etməyə imkan verir.

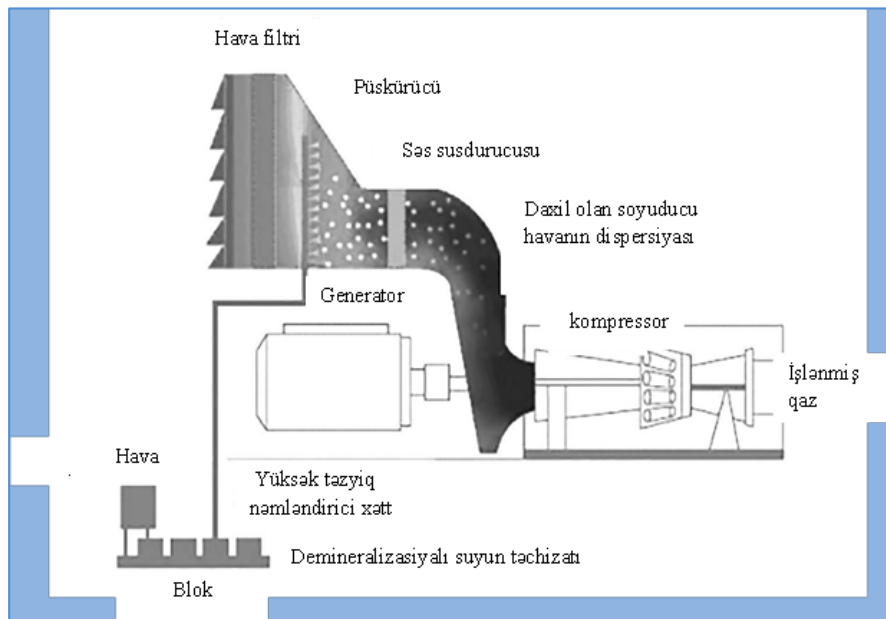
Bu ehtimal kəşfiyyat və hasilat müəssisələrində aparılan enerji auditi zamanı da qeyd olunub.

Tədqiqatımızın obyektı neft-qaz yataqlarından birində işləyən qaz-turbin elektrik stansiyası, o cümlədən gücü 30 MVt olan RB-211 Rolls Royce tipli qaz turbin aqreqatları ilə idarə olunan dörd elektrik generator dəsti idi. Hər bir turbogenerator emissiyaların azaldılması sistemi ilə təchiz edilmişdir (Quru Aşağı Emissiya).

Bu o deməkdir ki, hər bir turbin giriş hava filtri qurğusu, baca və yağ soyuducusu ilə təchiz edilmişdir.



Şəkil 1. Qaz turbinin elektrik və istilik gücünün ox üzrə kompressorun girişindəki hava temperaturundan asılı olaraq dəyişməsi.



Şəkil 2. Kompresorun girişində havanı nəmləndirən turbogeneratorun sxemi.

Qaz turbinli mühərrikin səmərəliliyinin təyini üsulu

Bu üsul cari rejimlərdə turbogeneratorların işinin istilik parametrlərinin müəyyən edilməsini nəzərdə tutur. Göstəriciləri hesablamaq üçün aqreqların səmərəliliyindən, standart idarəetmə cihazlarından istifadə etməklə işin parametrlərindən, həmçinin əlavə ölçmələrdən istifadə olunur.

Bölmələrin səmərəliliyini qiymətləndirmək üçün mövcud iş rejimlərində qaz analizatorundan istifadə edərək işlənmiş qazların tərkibini ölçmək planlaşdırılır. Ölçmələr apararkən aqreqların iş rejiminə nəzarət edilir. Stasionarlıq rejimi standart parametrlərə nəzarət cihazları tərəfindən təmin edilir.

Parametrlərin sabitliyinin təmin edilməsi nəticələrin etibarlılığı üçün ilkin şərt olmalıdır. Nəzarət olunan əsas parametrlər: yüksək təzyiqli turbinin fırlanma tezliyi, elektrik generatorunun fırlanma tezliyi, elektrik yükü. Bölmələrin iş rejiminin stasionarlığına olan tələb, standart avtomatlaşdırma sistemindən parametrlərin eyni vaxtda çıxarılması ilə işlənmiş qazların tərkibini ölçmək ehtiyacı ilə əlaqələndirilir.

Alətlər vasitəsilə müayinələrin aparılması proqramı QBA-nın parametrlərinə avtomatlaşdırılmış nəzarət sistemindən məlumatların istifadəsini nəzərdə tutur.

Qaz turbininin istismarının enerji səmərəliliyini müəyyən etmək üçün faydalı iş əmsalı və itkilərin balansı metodundan istifadə edilmişdir. Qaz turbin qurğusunun effektiv səmərəliliyi aşağıdakı düsturla müəyyən edilir:

$$\eta_{QTO} = 1 - \delta N_{baca} - \delta N_{natam} - \delta N \quad (1)$$

burada δN_{baca} , δN_{natam} baca qazları ilə nisbi itkilər və yanacağın natamam yanmasından olan itkilər; δN – digər itkilər (kompresor və turbin yastıqlarının yağ soyutma sistemindəki itkilər, yanma kamerasındakı itkilər).

Qaz turbinli mühərrikin effektiv gücü aşağıdakı düsturla müəyyən edilir:

$$N_e = N_e / \eta_{ümumi} \quad (2)$$

burada N_e - generator terminallarında ümumi elektrik enerjisi, kVt; $\eta_{ümumi} = \eta_y \cdot \eta_z$ – ötürücü sürət qutusunun ümumi f.i.ə.; η_y - yastığın f.i.ə.; η_z – ötürmə f.i.ə..

NƏTİCƏ

Aqreqların işinin enerji səmərəliliyinin (f.i.ə.) artması mühərriklərin işlənmiş qazlarının istiliyindən səmərəli istifadə sayəsində mümkündür.

Baca qazlarının istilik gücü hava buxarlandırıcı soyuducu ABLQ və ya BQQ qurğusunun istifadəsi üçün enerjiyə qənaət tədbirlərinin hər hansı birinin həyata keçirilməsi üçün kifayətdir.

Hava buxarlandırıcı soyuducunun tətbiqi, və ya ABLQ mövcud gücü 9% artıracaq və bunun hesabına yanacağına qənaətlə nəticələnlə bəzən qaz və müəssisənin iqtisadi göstəriciləri yaxşılaşar. Görülən tədbirlərin nəticələri effektiv olmasını sübut edir, ancaq özünü ödəmə müddəti uzun olacaq, təxminən 13-15 il.

-
- [1] *О.Е. Аксютин, А.Г. Иииков, Г.А. Хворов.* Повышение энергоэффективности магистрального транспорта газа в ПАО «Газпром» на основе внедрения высокоэффективных технологий утилизации тепловой энергии отходящих газов газотурбинных установок газоперерабатывающих агрегатов. Газовая промышленность, 2017, № 1, с. 1(570), стр. 64–69.
- [2] *И.Р. Байков, С.В. Кумаев, И.А. Шаммазов.* Методы повышения энергетической эффективности магистрального транспорта газа. СПб.: Недра, 2008. 440 с.
- [3] *И.Р. Байков, М.И. Кузнецова, С.В. Кумаев.* Повышение степени использования тепла выхлопных газов газотурбинных установок в магистральном транспорте газа. Нефтегазовое дело, 2016, т. 1, с. 14, нет. 1, стр. 106–110.
- [4] *А.Ф. Калинин.* Повышение эффективности газотурбинного силового привода на магистральных газопроводах. Известия высших учебных заведений. Нефть и газ, 2002, №1. 6 (36), стр. 86–92.
- [5] *С.В. Кумаев.* Научно-практические основы обеспечения энергетической эффективности магистрального транспорта газа. Дисс. докт. техн. Наук Научно-практические основы обеспечения энергоэффективности магистрального транспорта газа. Доктор тех. науч. дисс. Уфа, 2011. 280 с.
- [6] *С.В. Кумаев.* Энергосбережение при эксплуатации приводных газотурбинных агрегатов на газотурбинных электростанциях. Транспорт и хранение нефтепродуктов и углеводородного сырья. 6, стр. 6–9.
- [7] *В.С. Кузьмичев, Х.Х. Омар, А.Ю. Ткаченко.* Способ повышения эффективности газотурбинных двигателей наземного применения за счет рекуперации тепла. Вестник Московского авиационного института, 2018, т. 1, с. 25, нет. 4, стр. 133–141.
- [8] *Б.П. Поршаков.* Эффективность использования газотурбинных установок на магистральных газопроводах. Труды РГУ нефти и газа им. И. М. Губкина, 2009, № 1, с. 4 (257), стр. 15–24.
- [9] *A.A Vasserman, M.A. Shutenko.* Methods of increasing thermal efficiency of steam and gas turbine plants. Journal of Physics: Conference Series, 2017, pp 1-10.

Shixaliyeva Saadat

**INCREASING THE EFFICIENCY OF GAS TURBINE POWER PLANTS
SUMMARY**

The purpose of this article is to review technical and technological solutions to improve the energy efficiency of a power plant with a gas turbine plant. Methods for maintaining the gas-dynamic parameters of engines at low temperatures as at high ambient temperatures are presented. A technical solution for cooling the circulating air at the compressor inlet with demineralized irrigation water or the use of absorption bromine-lithium cooling devices is proposed. The use of combined cycle plants will make it possible to produce additional electricity due to the lost potential of exhaust gases from gas turbine plants.

Шихалиева Саадат

**ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ГАЗОТУРБИННЫХ ЭЛЕКТРОСТАНЦИЙ
АННОТАЦИЯ**

Целью представленной статьи является обзор технических и технологических решений по повышению энергоэффективности электростанции с газотурбинной установкой. Представлены способы сохранения газодинамических параметров двигателей при низкой температуре как при высокой температуре окружающего воздуха. Предложено техническое решение охлаждения циркулирующего воздуха на входе в компрессор обессоленной поливной водой или применением абсорбционных бром-литиевых охлаждающих устройств. Использование парогазовых установок позволит производить дополнительную электроэнергию за счет потерянного потенциала выхлопных газов газотурбинных установок.

YUPİTERİN DİSKİNDƏ BÖYÜK QIRMIZI LƏKƏNİN ƏTRAF MÜHİTLƏ QARŞILIQLI DİNAMİKASI

Ə.Ə. HÜMBƏTOVA

Şamaxı Astrofizika Rəsədxanası

AZ-5626, Azərbaycan Respublikası, Şamaxı rayonu, Y.Məmmədaliyev qəsəbəsi

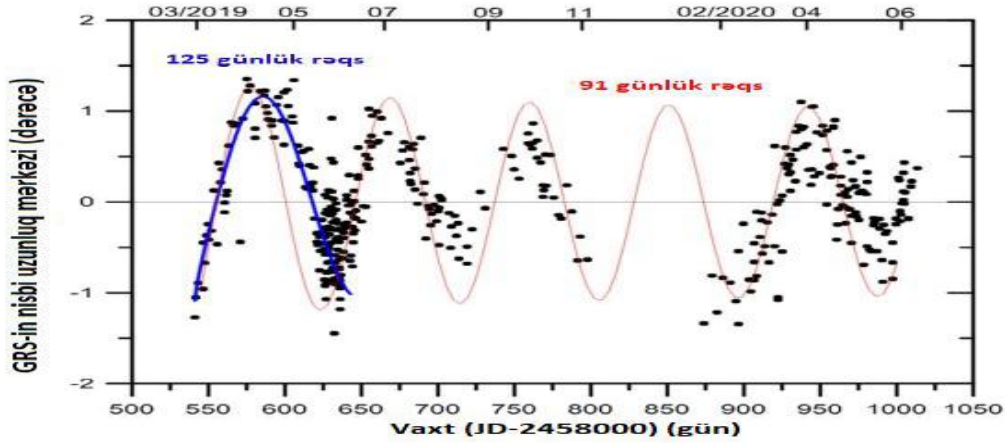
e-mail emineenver2@gmail.com

Nəhəng planetlərin ən nəhəngi olan Yupiter planetinin atmosferində Böyük Qırmızı Ləkə adlanan bir detal 350 ildən çoxdur ki, müşahidə olunur. Planetin cənub tropik zonasında ($\varphi = -22.5^\circ$ enliyində) yerləşən bu oval şəkilli atmosfer törəməsi öz ölçülərini və parlaqlığını zaman keçdikcə dəyişir. Böyük Qırmızı Ləkə parlaqlığını dəyişməklə bərabər onun həndəsi ölçüləri də dəyişir; Ləkənin eni 14 min km, uzunluğu isə bir əsr ərzində 30 min km-dən 40 min km-ə qədər dəyişmişdir. Buradan aydın olur ki, Yupiterdəki Böyük Qırmızı Ləkədə üç Yer ölçülü kürə yerləşdirmək olar.

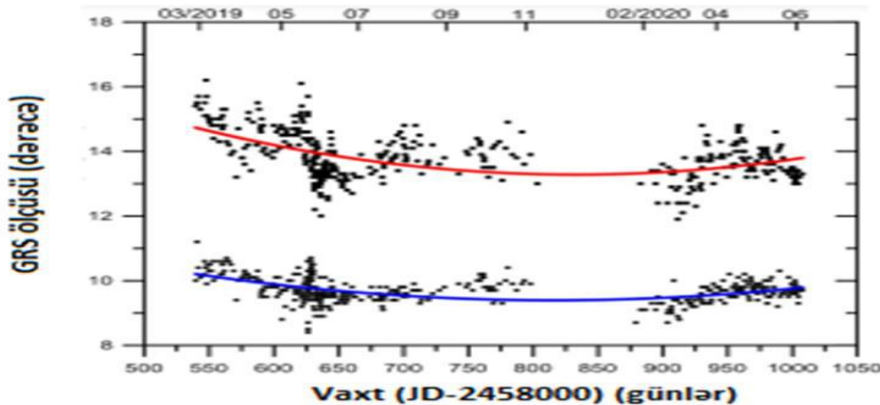
Açar sözlər : Yupiter, Böyük Qırmızı Ləkə, AB Ağ ləkə, dinamika.

Qırmızı ovalın mərkəzi 2019-cu il ərzində III Sistemdə $0,33$ dərəcə/gün uzunluq üzrə orta sürüşmə ilə, $u = -4,5 \pm 0,2 \text{ ms}^{-1}$ zona sürətinə ekvivalent, enlik üzrə heç bir dəyişiklik olmadan hərəkət etdi. Bununla belə, uzunluqda məşhur 91 günlük dövrlə müntəzəm rəqs davam etdi, lakin 620-640 günlər ərzində bu rəqs 125 günə qədər artdı (2019-cu ilin may ayının ortalarından iyunun əvvəlinə qədər). [3, 4] Həmçinin bu rəqslərdə uzun müddət heç bir faza sürüşməsi göstərilməyə

də amplituda A 1° -dən 1.2° -ə qədər dəyişdi (şəkil). Bu hadisəyə ən inandırıcı izahat, AB qarşılıqlı təsirlərinin 91 günlük dövrlə rəqs üçün olan fazanı müvəqqəti olaraq dəyişdirməsidir. Lakin bu zaman maksimum sürət qorunub saxlanıldı $v_{max} = A\omega 0.9 \text{ ms}^{-1}$ (A 1° -dən 1.2° -ə qədər, tezlik $\omega = 2\pi/\tau$ və τ rəqs dövrü intensiv qarşılıqlı təsirlər zamanı 91-dan 125 günə qədər dəyişir).



Şəkil 1. BQL mərkəzinin orta uzunluğundakı rəqslər onun orta sürüşməsinə görə dəyişir həmçinin, həmin rəqslər müxtəlif dövr və amplitudalı sinusoidal funksiya uyğun gəlir. Aşağıdakı x oxu vaxtı Julian tarixini göstərir. Yuxarıda müvafiq ay və il göstərilir.



Şəkil 2. Müşahidə dövründə BQL qırmızı oval sahəsinin zona uzunluğu (əsas ox) və meridional eni (kiçik ox).

YUPİTERİN DİSKİNDƏ BÖYÜK QIRMIZI LƏKƏNİN ƏTRAF MÜHİTLƏ QARSILIQLI DİNAMİKASI

Qırmızı ovalın forması və ölçüsü qarşılıqlı əlaqə zamanı nəzərə çarpacaq dərəcədə dəyişikliklərə məruz qalmışdır. Şərq-qərb uzunluğu, 2019-cu ilin mart ayının əvvəlində 15,5°-dən (18,040 km) 2020-ci ilin mayında 13,7°-yə qədər (15,950 km) azalıb. Böyük rəqslər zona uzunluğunun minimum 13°-yə (15,130 km) çatması və intensiv lopa əmələ gəlməsi dövründə baş verib. Sürətləri müəyyən etmək üçün 2019-cu ilin aprel-iyun və 2020-ci ilin aprel aylarında baş verən Yerüstü alınan şəkillərin köməyiylə ~1-3 gün fasilələrlə qırmızı

ovalın daxilində kəskin seçilən xüsusiyyətlərin hərəkətləri izlənməmişdir.

Ölçülərin qeydiyyatında tipik səhvlər şəklən keyfiyyətindən asılı olaraq $\pm 0,5^\circ$ ilə $\pm 1^\circ$ arasında dəyişir. Qırmızı və mavi əyriyə ikinci dərəcəli polinom, və ya çoxhədli uyğunluqları göstərir. [6, 7] 2009-2020-ci illər ərzində aparılan müşahidələrin nəticəsi, Yupiterin diskindəki Böyük Qırmızı Ləkənin ölçülərinin azalmasının davam etdiyini göstərdi. Ölçülərin azalmasını aşağıdakı cədvəl 1-də aydın şəkildə görürük.

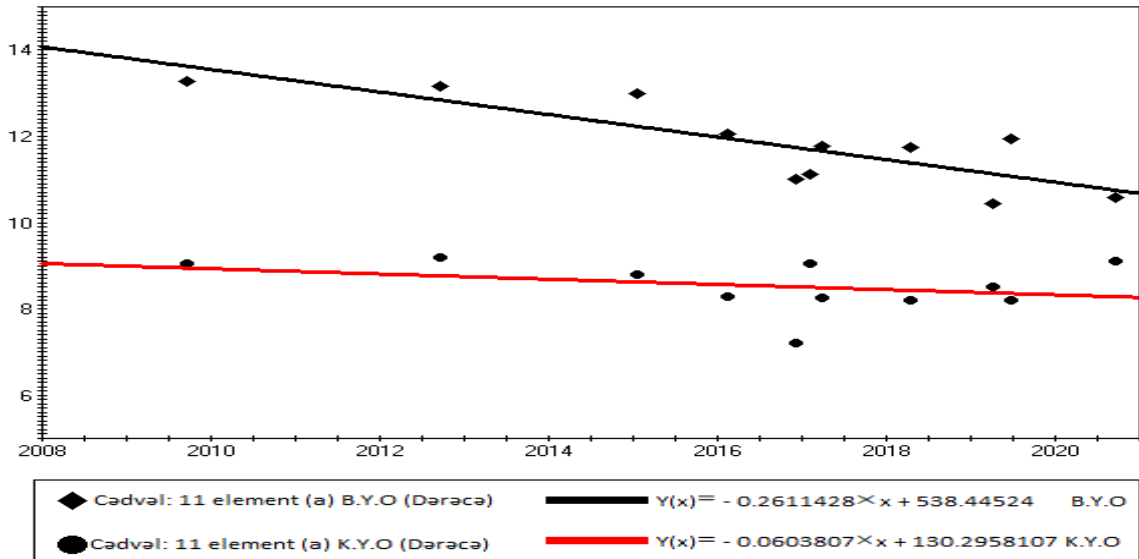
Cədvəl 1.

Böyük Qırmızı Ləkə ətrafındakı yüksək sürətli halqaya aid sürət sahəsinin parametrləri

UT tarixi (seriyanın orta nöqtəsi)	Kəsrlil il	Əsas en(dərəcə)	Əsas en (10 ³ km)	Kiçik en (dərəcə)	Kiçik en (10 ³ km)	Aspekt nisbəti	Orta sürət (V elips (ms ⁻¹))	Orta sürət (V dairə (ms ⁻¹))
2009-09-22 16:37	2009.72	13.27±0.48	15.59±0.56	9.05±0.48	11.21±0.60	1.39±0.09	92±14	103±12
2012-09-20 15:42	2012.72	13.17±0.66	15.44±0.77	9.20±0.74	11.40±0.91	1.35±0.13	89±24	102±17
2015-01-19 13:53	2015.05	12.99±0.92	15.23±1.08	8.80±0.86	10.90±1.07	1.40±0.17	84±19	97±17
2016-02-09 16:03	2016.11	12.05±0.76	14.17±0.89	8.30±0.72	10.28±0.89	1.38±0.15	92±13	102±11
2016-12-11 19:42	2016.94	11.11±0.82	13.11±0.97	7.20±0.49	8.93±0.61	1.47±0.15	95±18	100±14
2017-02-01 22:50	2017.09	11.12±0.84	13.02±0.99	9.05±0.76	11.21±0.94	1.16±0.13	97±17	107±16
2017-04-03 08:08	2017.25	11.77±0.70	13.88±0.83	8.25±0.50	10.23±0.62	1.36±0.12	97±13	105±8
2018-04-17 07:49	2018.29	11.74±0.51	13.82±0.59	8.20±0.43	10.16±0.54	1.36±0.09	95±17	105±15
2019-04-09 18:44	2019.27	10.43±0.66	12.21±0.78	8.50±0.71	10.52±0.88	1.16±0.12	100±12	108±11
2019-06-26 12:46	2019.48	11.93±1.02	13.96±1.19	8.20±0.81	10.15±1.01	1.37±0.18	96±17	107±11
2020-09-20 08:15	2020.72	10.59±0.49	12.41±0.57	9.10±0.67	11.27±0.83	1.10±0.10	99±12	106±9

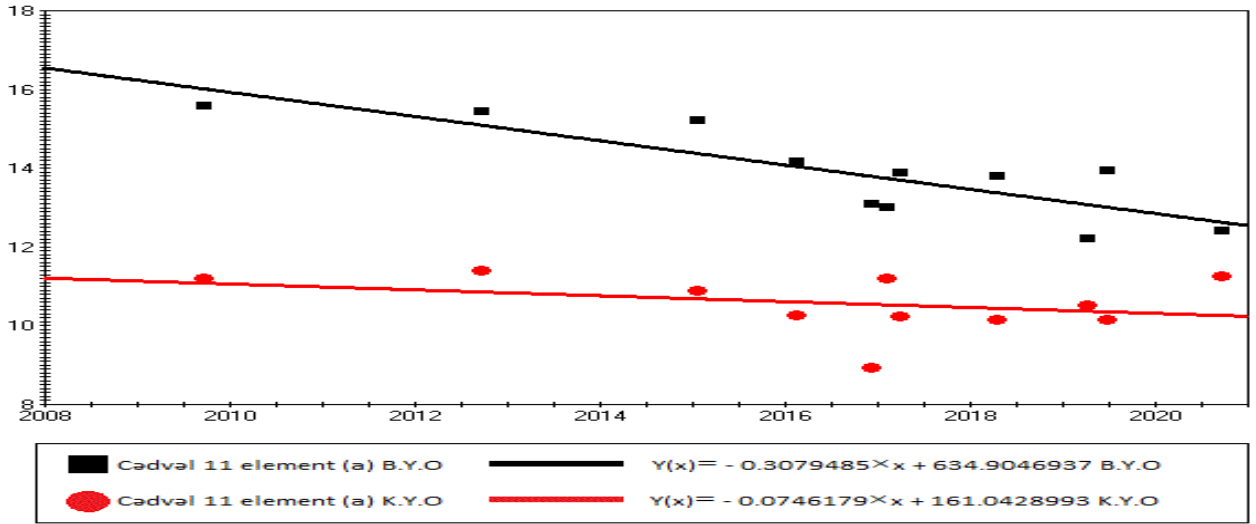
Bu nəticədən istifadə edərək aşağıxətli qrafikləri qura bildik (şəkil 1 və şəkil 2). Qrafikdə asılılığın xətti olduğunu görür və Yupiterin Böyük Qırmızı Ləkəsinin bundan sonra daha nə qədər yaşaya biləcəyini tap

bilirik (gözlənilməz hadisələr yaşanmadığı və hadisələrin bu istiqamətdə inkişaf etdiyini nəzərə alaraq). Böyük Qırmızı Ləkənin böyük və kiçik yarımoxlarının qiyməti hələlik azalır və belə getsə, BQL-nin yoxa çıxması söylənilə bilər.



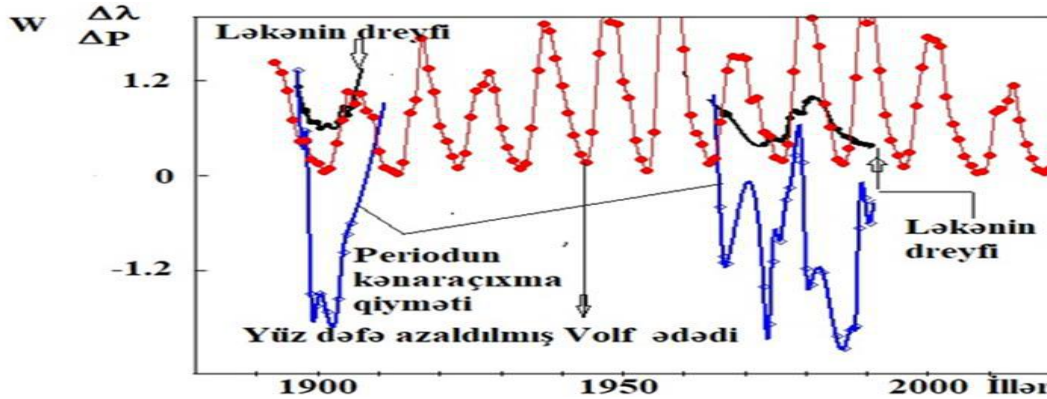
Şəkil 3. Yupiter diskinin (dərəcə) ölçülərinin azalma qrafiki

1. $Y(x) = -0.2611428 \times x + 538.44524$
 $-0.2611428 \times x = -538.44524$
 $x = 2601.88$
2. $Y(x) = -0.0603807 \times x + 130.2958107$
 $-0.0603807 \times x = -130.2958107$
 $x = 2157.904 \approx 2160$ il



Şəkil 4. Yupiter diskinin ölçülərinin (10^3 km) azalma qrafiki

1. $Y(x) = -0.3079485 \times x + 634.9246937$
 $-0.3079485 \times x = -634.9246937$
 $x = 2061.788 \approx 2060 \text{ il}$
2. $Y(x) = -0.0746179 \times x + 161.0428993$
 $-0.0746179 \times x = -161.0428993$
 $x = 2158.234 \approx 2160 \text{ il}$



Şəkil 5. 91 günlük dövrdən kənarçıxma, ləkənin dreyfi və Günəş fəallığının zamandan asılılıq qrafiki. Ləkənin dreyfi qara, Günəş fəallığının müəyyən edicisi kimi Volf ədədinin qiymət(mötərizədə 100 dəfə azdır) qırmızı və 91 günlük perioddan kənarçıxma isə göy rəngdə xətlə göstərilmişdir. Absis oxunda isə illər göstərilmişdir.

BQL-in dərəcə ölçüsünün azalmasına görə bu ləkənin yoxa çıxması və yaxud görünməz olması üçün təqribən 2160 il olması alındı. Planetin diskindəki bu böyük atmosfer törəməsinin km-lə verilmiş qiyməti də həmin nəticəni verdi: $\approx 2160 \text{ il}$.

Böyük Qırmızı Ləkə Günəş sistemində ən böyük bir burulğandır. Belə fırtınaların Günəş sisteminin digər cisimlərində müxtəlif gücdə olur: Mars fırtınası, Neptunda sürəti 1200km/saat sürətinə çatan küləklər, Saturnda bütün planeti əhatə edən geniş miqyaslı fırtına, Yer in atmosferində baş verən qasırğa və tornadolar bu qəbildəndir. Lakin vacib məsələ Yer in atmosferində baş baş verən bu qasırğa və tornadolar Yer in səthidə güclü dağıntılar yaradır və canlıların planetimizdə yaşamasını çətinləşdirir. Məhz bu səbəbdən də planetlərin atmosferində əmələ gələn müxtəlif dinamik məsələləri araşdırıb, onların yaranması momentində sıradan çıxarılması ilə bağlı suallara cavab axtar-

malıyıq. Ancaq belə hadisələrin yaranacağını əvvəlcədən bilmək zəruridir. Təhlil edilən müşahidələrin sayı çox az olmamalı, seçmə intervalları çox da qısa olmamalıdır. Müşahidələr göstərir ki, BQL ekvatorial oblasta paralel olaraq, geriye sürüşür və 30 ildə bir dövr edir. Yəni, ildə 12° geriye sürüşür. Bununla bərabər BQL öz xəyalən şaquli oxu ətrafında 4.5-6 sutka ərzində bir dövr edir. Yəni də sual meydana çıxır: BQL-in fırlanma oxu ətrafında dövr periodunun belə dəyişməsi, şəkildəyişmələri hələlik cavabsızdır.

Əsas nəticə olaraq 91 gün müddətində dövr bütün hesablamalarda baş verir. Əsrin əvvəlinə yaxın 116 günlük dövrlük 11 hesablamadan yalnız dördündə 90 gündükdən yüksək olmuşdur.

Şəkildən görüldüyü kimi, 1900-cu illər ətrafında hər üç qrafikin minimumu üst-üstə düşür, sonrakı halda az da olsa sürüşmə hiss olunur. Bu hadisə iki faktla əlaqədar ola bilər:

1. Günəşin fəallıq dərəcəsinin dəyişməsi ;

2. Planetin daxili enerji mənbəyinin dəyişməsi.

Bu və digər sualların ortaya çıxması müşahidə faktlarının az olması ilə bağlıdır. Amma qeyd etmək zəruridir ki, Yupiterdə və Böyük Qırmızı Ləkədə bütün şəkildəyişmələr onun sistemində baş verən hadisələrlə əlaqədardır.

NƏTİCƏ

Müəyyənləşdirildi ki, Yupiterin diskindəki Qırmızı Ləkə daimi dreyf hərəkəti edir və onu heç bir müntəzəm fırlanma sistemi ilə bağlamaq mümkün deyil: Ləkə planetin “ dərin qatında yox, atmosfer törəməsidir ” və səthi ilə əlaqədar deyil. BQL-in ölçüsü on doqquzuncu əsrin sonlarından bəri yavaş-yavaş kiçilir və 2019-cu ildə (antisiklon burulğan) AB-lərlə qarşılıqlı əlaqə nəticəsində gözlə görünən qırmızı ovalı indiyə qədər qeydə alınan ən kiçik ölçüyə enib. Bununla belə o, maksimal sürətlərini artırır, lakin burulğanını qoruyub saxlayır (yer əsaslı ölçmələrin dəqiqliyi daxilində). Alovlanma hadisələri çox güman ki, səthi olub, BQL-in tam dərinliyinə təsir göstərmir. Həqiqətən, 2019-cu ilin oktyabrına qədər görünən qırmızı oval demək olar ki, əvvəlki ölçüsünə qayıtdı .

2018-2020-ci illərdə Yupiterin BQL-i kiçik AB seriyaları ilə güclü qarşılıqlı əlaqədə olmuşdur. Burada baş verən hadisə isə üç səbəbə görə xüsusilə maraqlı idi. Birincisi, o dövrdə BQL(GRS) öz tarixində ən kiçik ölçüyə malik olmuşdu. İkincisi, burulğanlar orta ölçülü olub, BQL sahəsinin ~2,5%-5%-ni təşkil edirdi və həmçinin onlar çoxlu sayda olub, bir-birinin ardınca BQL ilə toqquşdular. Üçüncüsü isə, bu qarşılaşmalar əvvəllər nadir hallarda qeydə alınan güclü qarşılıqlı təsirlərə səbəb oldu. Onlar, qırmızı sahədən böyük parçalar ("lopa" adlanır) qopardılar və nəticədə BQL-nin qırmızı oval sahəsi əhəmiyyətli dərəcədə pozuldu. Əslində, kiçik oval törəmələr BQL-i enerji ilə qismən

qidalandıran mənbə də ola bilər. Nəticədə bu hadisə aşağıdakılara səbəb oldu:

- BQL maksimum tangensial sürətini 150 ms^{-1} -ə qədər artırdı.
- BQL girdabı (burulğanın səthi) dəyişmədi.
- AB-lər BQL-dən böyük parçalar qopardıqda və onun formasını pozduqda görünən qırmızı sahə azaldı.
- BQL-nin uzunluq üzrə sabit 91 günlük rəqsi hərəkəti dəyişən dövrülüyə məruz qaldı, dövrünü və amplitudasını artırdı.
- Yupiterdə və Böyük Qırmızı Ləkədə bütün şəkildəyişmələr onun sistemində baş verən hadisələrlə - planetin daxili enerjisin miqdarı ilə əlaqədardır.

Vizual və yaxın infraqırmızı dalğa uzunluqlarında BQL əks etdiriciliyinin radiasiya ötürülməsi təhlilindən biz göstərdik ki, qarşılıqlı təsirlər BQL-in yuxarı bulud zirvələrinə təsir edib. Dayaz su modeli və ümumi dövriyyə modelindən istifadə etməklə də bu qarşılıqlı təsirlərin dinamikasını, kəmiyyətə qiymətləndirməklə (ədədi) təsdiqləmək mümkündür.

BQL-in ölçüsü on doqquzuncu əsrin sonlarından bəri yavaş-yavaş kiçilir və 2019-cu ildə AB-lərlə qarşılıqlı əlaqə nəticəsində gözlə görünən qırmızı ovalı indiyə qədər qeydə alınan ən kiçik ölçüyə enib. Bununla belə o, maksimal sürətlərini artırır, lakin burulğanını qoruyub saxlayır (yer əsaslı ölçmələrin dəqiqliyi daxilində). Alovlanma hadisələri çox güman ki, səthi olub, BQL-in tam dərinliyinə təsir göstərmir. Həqiqətən, 2019-cu ilin oktyabrına qədər görünən qırmızı oval demək olar ki, əvvəlki ölçüsünə qayıtdı .

Təhlillər təsdiqləyir ki, AB-lərin qəbulu mütləq dağdıcı deyil. O, BQL küləyinin sürətini artırma bilər və bəlkə də daha uzun müddət ərzində onu sabit vəziyyətdə saxlaya bilər. BQL-in intensiv burulğanın daha böyük ölçüsü və dərinliyi qarşılıqlı təsir edən burulğanlarla müqayisədə, onun uzun ömrünə zəmanət verir.

-
- [1] P.V. Sada, R.F Beebe., B.J. Conrath., Comparison of the Structure and Dynamics of Jupiter's <https://doi.org/10.1006/icar.1996.0022>
- [2] J. Rogers. The Giant Planet Jupiter. //Cambridge University Press. 1995.
- [3] C. Foster, J. H Rogers, S.Mizumoto , A. Casely & M.Vedovato. 2020, Jupiter in 2019 Report no.10: The BQL in 2019 and its interaction with retrograding vortices as monitored by the amateur planetary imaging community. British Astronomical Association. Retrieved from <https://britastro.org/node/22552>
- [4] H. G. Solberg. 1969, A 3-month oscillation in the longitude of Jupiter's Red Spot. Planetary and Space Science, 17, 1573–1580. [https://doi.org/10.1016/0032-0633\(69\)90146-9](https://doi.org/10.1016/0032-0633(69)90146-9)
- [5] J. M. Trigo-Rodríguez, A.Sánchez-Lavega, J. M. Gómez, J.Lecacheux, F. Colas & I.Miyazaki. 2000, The 90-day oscillations of Jupiter's Great Red Spot revisited. Planetary and Space Science, 48, 331–339. [https://doi.org/10.1016/S0032-0633\(00\)00002-7](https://doi.org/10.1016/S0032-0633(00)00002-7)
- [6] A.Sánchez-Lavega, R. Hueso, G. Eichstädt, G. Orton, J.Rogers, C J. Hansen, et al. 2018, The rich dynamics of Jupiter's Great Red Spot from JunoCam – Juno images. The Astronomical Journal, 156 (9pp), 162. <https://doi.org/10.3847/1538-3881/aada81>
- [7] A. A.Simon, F. Tabataba-Vakili, R.Cosentino, R. F.Beebe, M. H. Wong, & G. S. Orton. 2018, Historical and Contemporary Trends in the Size, Drift, and Color of Jupiter's Great Red Spot. The Astronomical Journal, 155(4), 13. <https://doi.org/10.3847/1538-3881/aaae01>
- [8] De Pater I, M .H Wong, A. A. Simon, & P. S. Marcus. 2019, Jupiter's Great red spot is not disintegrating by flaking apart. San Francisco. American Geophysical Union Fall Meeting. Poster P13B-3502.
- [9] E.García-Melendo & A.Sánchez-Lavega. 2017, Shallow Water simulations of Saturn's Giant Storms at different latitudes. Icarus, 286, 241-260. <https://doi.org/10.1016/j.icarus.2016.10.006>.
- [10] T.E Dowling, A.S. Fisher, P.J Gierasch, J.Harrington, R.P. LeBeau, & C.M Santori. 1998,

- The explicit planetary isentropic-coordinate (EPIC) atmospheric model. *Icarus*, 132, 221–238. <https://doi.org/10.1006/icar.1998.5917>
- [11] A. Sánchez-Lavega, E. García-Melendo, J. Legarreta, R. Hueso, T. del Río-Gaztelurrutia et al. 2020, A complex storm system and a planetary-scale disturbance in Saturn's north polar atmosphere in 2018. *Nature Astronomy*, 4, 180–187. <https://doi.org/10.1038/s41550-019-0914-9>
- [12] A. Sánchez-Lavega. 2011, An introduction to planetary atmospheres. Florida. Taylor-Francis, CRC Press, p. 629.
- [13] J. L. Mitchell, R. F. Beebe, A. P. Ingersoll, & G. W. Garneau. 1981, Flow fields within Jupiter's great red spot and white oval BC. *Journal of Geophysical Research*, 86, 8751–8757. <https://doi.org/10.1029/JA086iA10p08751>
- [14] Evolution of the Horizontal Winds in Jupiter's Great Red Spot From One Jovian Year of HST/WFC3 Maps <https://doi.org/10.1029/2021GL093982>
- [15] The 90-day oscillation of the jovian Great Red Spot, *Journal of the British Astronomical Association*, vol.106, no.1, p.40-43. <http://adsabs.harvard.edu/abs/1996JBAA..106...40H>

A.A. Humbatova

THE GREAT RED SPOT ON JUPITER'S DISK DYNAMICS WITH THE ENVIRONMENT

A detail called the Great Red Spot has been observed in the atmosphere of Jupiter, for more than 350 years. Located in the southern tropical zone ($\varphi=2.5$ latitude) of the planet, this oval-shaped atmospheric derivative changes its size and brightness over time. The shape and size of the red oval underwent noticeable changes during the interaction. The width of the spot is 14,000 km, and its length has changed from 30,000 km to 40,000 km over a century. The Great Red Spot on Jupiter could accommodate three Earth-sized spheres.

A.A. Гумбатова

ДИНАМИКА БОЛЬШОГО КРАСНОГО ПЯТНА С ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДОЙ НА ДИСКЕ ЮПИТЕРА

Деталь под названием Большое Красное Пятно наблюдается в атмосфере крупнейшей из планет-гигантов Юпитера, уже более 350 лет. Эта атмосферная производная овальной формы расположена в южной тропической зоне ($\varphi=2.5$ широта) планеты, со временем меняет свой размер и яркость. По мере изменения яркости Большое Красное Пятно меняются и его геометрические размеры; ширина пятна составляет 14 000 км, а его длина за столетие изменилась от 30 000 км до 40 000 км. Отсюда ясно, что в Большом Красном Пятне на Юпитере могли бы поместиться три сферы размером с Землю.

KVANT TƏBƏQƏSİNDƏ CƏRƏYANIN DİSPERSİYASI

R.Q. AĞAYEVA

Azərbaycan Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu

AZ 1143, Bakı, H.Cavid pr., 131

rena.g.aghayeva@gmail.com

Kvantlayıcı maqnit sahəsində parabolik kvant təbəqəsi üçün cərəyanın dispersiyası hesablanmışdır. Hesablama koherent hallar təsvirində cırılmamış statistika üçün aparılmışdır. Alınan nəticələr, məsələn, sensorların həssaslığını artırmaq üçün istifadə edilə bilər.

Açar sözlər: dispersiya, kvant təbəqəsi, koherent hallar.

Elektronikada, xüsusən də yarımkeçirici elektronikada əldə edilən nailiyyətlər elektron cihazlarında küyün öyrənilməsinə böyük maraq yaratmışdır, çünki küy zəif siqnallarla işləyərkən bu cihazların həssaslığını məhdudlaşdırır. Küy fluktuasiyalar səbəbindən yaranır. Belə fluktuasiyalar adətən kiçik olur. Bununla belə, onlar dəqiq ölçmələrdə və rabitə texnologiyasında həlledici rol oynayır. Tarazlıq fluktuasiyaları ilə yanaşı, yalnız cərəyan axını zamanı aşkarlanan müxtəlif fluktuasiya mexanizmləri də var. Cərəyan kimi dalğalanmaların ən sadə ölçüsü cərəyan dispersiyadır. Bu məqalənin əsas məqsədi kvantlayıcı maqnit sahəsində yerləşdirilən kvant təbəqədə qeyri-dissipativ cərəyanın dispersiyasını hesablamaqdır.

Alınan nəticələr, məsələn, sensorların həssaslığını artırmaq üçün istifadə edilə bilər.

Bu tədqiqatda bütün hesablamalar koherent hallara [1] və cırılmamış statistika əsaslanır.

Tədqiq olunan kəmiyyətlərin kiçik bir diapazonda lakin yüksək dəqiqliklə ölçmə apararaq, sensorlarda bu işdə alınan (28) düsturunun nəzərə alınması vacibdir. Beləliklə, əldə edilən nəticə elektron cihazlarında küyü öyrənmək üçün istifadə edilə bilər.

[2]-də koherent hallar təsvirində sabit elektrik ($\vec{E} \parallel x$) və kvantlayıcı maqnit ($\vec{H} \parallel z$) sahələrində parabolik kvant təbəqəsi üçün qalvanomaqnit tenzorun qeyri-diaqonal komponenti hesablanmışdır.

[2] işində potensialı

$$U = m\omega_0^2 x^2 / 2 \quad (1)$$

olan kvant təbəqəsi məsələsinə baxılmışdır.

harada:

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2m} [\hat{p}_x^2 + m^2 \omega^2 (x - \hat{x}_0)^2] = \hbar \omega \left(\hat{A}^- \hat{A}^+ + \frac{1}{2} \right) \quad (6)$$

$$\hat{H}_2 = \left(\frac{\omega_0}{\omega} \right)^2 \frac{\hat{p}_y^2}{2m}, \quad \hat{H}_3 = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \quad (7)$$

$$\hat{x}_0 = - \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^2 \frac{\hat{p}_y}{m\omega_c}, \quad (8)$$

$$\hat{A}^\pm = e^{\mp i\omega t} \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi}} \left((x - \hat{x}_0) \mp \frac{i\hat{p}_x}{m\omega} \right), \quad (9)$$

Burada m – elektronun effektiv kütləsi, ω_0 – kvant təbəqəsində parabolik potensialı xarakterizə edir, x – adi kanonik koordinat.

[2]-də baxılan kvant təbəqəsində cərəyanın dispersiyasını (D) hesablamaq üçün

$$D = n \langle \hat{j}^2 \rangle - \langle \hat{j} \rangle^2 \quad (2)$$

düsturundan istifadə edəcəyik.

(2) düsturunda n – elektronların konsentrasiyası, \hat{j} – cərəyanın operatorudur.

Məlumdur ki, temperaturun (T) və kimyəvi potensialın sabitliyi şərtində və $E = E_x$ olduqda y oxu istiqamətində qeyri-dissipativ cərəyan yaranır.

[1]-də bu cərəyan koherent hallar təsvirində hesablanmışdır:

$$\langle \hat{j}_y \rangle = - \frac{e^2 \omega_c E}{m\omega^2} \quad (3)$$

Burada e – elektronun yükünün mütləq qiyməti, $\omega^2 = \omega_c^2 + \omega_0^2$, $\omega_c = \frac{eH}{mc}$ – tsiklotron tezliyi, c isə işığın vakuumdakı sürətidir.

$\langle \hat{j}_y^2 \rangle$ və $\langle \hat{j} \rangle$ orta qiymətlərini hesablamaq üçün vektor-potensialı $\vec{A} = (0, Hx, 0)$ kimi seçirik. Bu halda (1) parabolik potensiallı Hamiltonian aşağıdakı kimi olacaq (bax [3] d.(111.3)):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - eEx \quad (4)$$

Asanlıqla göstərmək olar ki, (4)-dəki Hamiltonian \hat{H}_0 aşağıdakı şəkildə yazmaq olar:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 \quad (5)$$

və $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ – impuls operatorunun komponentləridir. İndi

$$\langle \hat{j}_y^2 \rangle = S_p \hat{p} \quad (10)$$

kəmiyyətini hesablayaq.

(10) düsturunda \hat{v}_y – sürət operatorunun uyğun komponentidir.

Baxılan məsələnin sıxlıq matrisini aşağıdakı şəkildə yazaq:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \hat{\rho}_1 \quad (11)$$

burada:

$$\hat{\rho}_0 = Z_0^{-1} \exp(-\hat{H}_0 \gamma), \quad Z_0 = S_p \exp(-\hat{H}_0 \gamma) \quad (12)$$

$\hat{\rho}_0$ – tarazlıqdakı sıxlıq matrisidir, Z_0 – uyğun statistic cəm, $\gamma = (\kappa T)^{-1}$, k – Boltsman sabiti, T isə mütləq temperatur,

$$\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_0 \int_0^\gamma d\gamma' e^{\hat{H}_0 \gamma'} e E x e^{-\hat{H}_0 \gamma'} \quad (13)$$

isə sıxlıq matrisinə qeyri-tarazlıq əlavəsidir (bax: (2.172) [4]).

Sürət operatoru üçün məlum kvant-mexaniki ifadədən istifadə etməklə (səh.77[3]), (4) və (5) düsturlarını bu ifadədə yerinə yazmaqla, həmçinin \hat{H}_1, \hat{H}_3 -ün \hat{p}_y –dən asılı olmadığını və (16.5) düsturunu da nəzərə almaqla aşağıdakı ifadəni alarıq:

$$\hat{v}_y = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, y] = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_2, y] = \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2 \cdot \frac{\hat{p}_y}{m} \quad (14)$$

(11) və (14) düsturlarını (10)-da yerinə yazaraq alarıq ki,

$$\langle \hat{f}_y^2 \rangle = \frac{e^2}{m^2} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^4 S_p (\hat{\rho}_0 + \hat{\rho}_1) \hat{p}_y^2, \quad (15)$$

burada $\hat{p}_y = \hbar \hat{k}_y$, \hat{k}_y – dalğa vektoru operatorunun y-komponentidir.

[1]-dən məlumdur ki, \hat{H}_0 –a uyğun dalğa funksiyası

$$|\alpha, k_y, k_z \rangle = |\alpha \rangle |k_y \rangle |k_z \rangle, \quad |k_y \rangle = \exp(ik_y y), \quad |k_z \rangle = \exp(ik_z z) \quad (16)$$

şəklindədir.

$|\alpha \rangle$ – koherent hallarla bağlı bütün tələbləri ödəyir, məsələn,

$$\hat{A}^- |\alpha \rangle = \alpha |\alpha \rangle, \quad \langle \alpha | \hat{A}^+ = \alpha^* \langle \alpha | \quad (17)$$

Onda [5]-dəki (9.4.4.) düsturuna görə ixtiyari \hat{M} operatorunun şpuru

$$S_p \hat{M} = \frac{L_z}{2\pi} \int dk_z \frac{L_y}{2\pi} \int dk_y \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha \langle \alpha, k_y, k_z | \hat{M} | \alpha, k_y, k_z \rangle \quad (18)$$

olacaq.

(18) düsturunu $S_p \hat{\rho}_0 \hat{p}_y^2$ –na tətbiq edək. Operatorlardan onların məxsusi qiymətlərinə keçək və bu zaman (16) və (11) düsturlarını və bozon operatorları üçün [6]-dəki (3.83) eyniliklərini

$$\langle \alpha | \exp(v \hat{A}^+ \hat{A}^-) | \alpha \rangle = \exp[-(1 - e^v) |\alpha|^2], \quad (19)$$

[7]-dən (13.17)

$$\int (\alpha^*)^s \alpha^l \exp(-C |\alpha|^2) d^2 \alpha = \frac{\pi^{l!}}{c^{l+1}} \delta_{sl} \quad (Re C > 0) \quad (20)$$

və həmçinin [8]-dən səh. 344-dəki (12) düsturunu

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^t e^{-rx^2} dx = \begin{cases} \sqrt{\pi} r^{-\frac{1}{2}} & t = 0 \\ \frac{\sqrt{\pi}}{2} r^{-\frac{3}{2}} & t = 2 \end{cases} \quad (21)$$

nəzərə alarıq.

Onda

$$S_p \hat{\rho}_0 \hat{p}_y^2 = \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} k_y^2 \exp(-L k_y^2) dk_y / \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-L k_y^2) dk_y = \frac{\hbar^2}{2L}, \quad (22)$$

burada $L = \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2 \frac{\hbar^2 \gamma}{2m}$.

(13)-ü nəzərə alaraq $S_p \hat{\rho}_1 \hat{p}_y^2$ hesablayaq.

(9) köməyi ilə $x = \hat{A}^\pm$ ilə ifadə oluna bilər:

$$x = \hat{x}_0 + \sqrt{\frac{\pi}{2m\omega}} (e^{-i\omega t} \hat{A}^- + e^{i\omega t} \hat{A}^+) \quad (23)$$

Sonra, [6]-dan (3.46)-nı

$$e^{\nu \hat{A}^+ \hat{A}^-} \hat{A}^\pm e^{-\nu \hat{A}^+ \hat{A}^-} = \hat{A}^\pm e^{\pm \nu} \quad (24)$$

və (17), (19)-u tətbiq edirik, daha sonra \hat{A}^- və \hat{A}^+ -a uyğun gələn 2 hədd üzrə inteqrallasaq (bax (23)) məxsusi qiymətlərə keçid zamanı (20)-yə görə bu həddlər sıfıra bərabər olur. Onda alarıq

$$S_p \hat{\rho}_1 \hat{p}_y^2 = eE S_p \hat{\rho}_0 \int_0^\gamma d\gamma' e^{\hat{H}_0 \gamma'} \hat{x}_0 e^{-\hat{H}_0 \gamma'} \hat{p}_y^2. \quad (25)$$

(8)-dən görüldüyü kimi, \hat{x}_0 yalnız bir \hat{p}_y operatorundan asılıdır. Buna görə də, (25)-i aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$S_p \hat{\rho}_1 \hat{p}_y^2 = -\frac{eE}{m\omega_c} \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^2 S_p \hat{\rho}_0 \hat{p}_y^3 \quad (26)$$

$S_p \hat{\rho}_0 \hat{p}_y^3$ hesablanması $S_p \hat{\rho}_0 \hat{p}_y^2$ kimi eyni sxem üzrə aparılacaqdır.

Nəticədə, [8]-də səh.344-də (10) düsturdan istifadə edərək hesabladığımız $\int_{-\infty}^{+\infty} k_y^3 \exp(-L k_y^2) dk_y$ inteqralının $S_p \hat{\rho}_0 \hat{p}_y^3$ -un tərkibində olduğuna görə sıfır alırıq, yəni

$$\int_{-\infty}^{+\infty} k_y^t e^{-rk_y^2 - qk_y} dk_y = \left(\frac{i}{2}\right)^t \sqrt{\pi} r^{-(t+1)/2} \exp\left(\frac{q^2}{4r}\right) H_t\left(\frac{iq}{2\sqrt{r}}\right)$$

$q = 0$; $t = 3$ və $t = 0$ olanda, həmçinin [9]-dan 8.956.1 və 8.596.7-düsturlarından istifadə edərək:

Onda (26) sifra bərabər olur və (22)-ni nəzərə almaqla (15) ifadəsi

$$\langle \hat{j}_y^2 \rangle = \frac{e^2}{m\gamma} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2 \quad (27)$$

şəkildə olacaq.

(27)-ni, (3)-ü (2)-də yerinə yazaraq, kvant təbəqəsində cərəyanın dispersiyası üçün ifadə alırıq.

$$H_0(x) = 1, H_3(0) = 0.$$

$$D = \frac{ne^2}{m\omega^2} \left[\frac{\omega_0^2}{\gamma} - \frac{1}{m} \left(\frac{eE\omega_c}{\omega}\right)^2 \right] \quad (28)$$

Tədqiq olunan kəmiyyətlərin kiçik diapazonunda, lakin yüksək dəqiqliklə ölçmə aparən sensorlarda (28)-i nəzərə almaq lazımdır. Beləliklə, alınmış nəticə elektron cihazlarında küyü öyrənmək üçün istifadə edilə bilər.

-
- | | |
|--|--|
| <p>[1] <i>И.А.Малкин, В.И. Манько.</i> Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. М., Наука, 1979, с.320.</p> <p>[2] <i>Р.Q, Ағажева.</i> Fizika, 2017, с.ХХІІІ, №4, section: AZ, s.13-15.</p> <p>[3] <i>Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц.</i> Теоретическая физика т. III, Квантовая механика, 1974, 752 с.</p> <p>[4] <i>Р. Фейнман.</i> Статистическая механика. М., Мир, 1975, 407с.</p> <p>[5] <i>М. Лэкс.</i> Флуктуации и когерентные явления. М., Мир, 1974, 299с.</p> | <p>[6] <i>У. Люиселл.</i> Излучение и шумы в квантовой электронике. М., Наука, 1972, 400 с.</p> <p>[7] <i>Я. Перина.</i> Когерентность света. М., Мир, 1974, 367с.</p> <p>[8] <i>А.П. Прудников и др.</i> Интегралы и ряды. М., Наука, 1981, 800с.</p> <p>[9] <i>И.С. Градштейн, И.М. Рыжик.</i> Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., Наука1971,1108 с.</p> |
|--|--|

CİVƏ BUXARININ ELEKTRİK BOŞALMASI PLAZMASINDA İONLARIN PAYLANMASI

**T.X. HÜSEYNOV, B.B. DAVUDOV, E.A. RƏSULOV,
Ş.A. ALLAHVERDİYEV, E.Q. TAĞIYEVA**

Bakı Dövlət Universiteti

htarlan@mail.ru

Civə buxarının elektrik boşalması plazmasında ionların paylanması tədqiq edilmiş və məlum olmuşdur ki, ionların ən ehtimalı sürəti neytral atomların ən ehtimalı sürətlərinə bərabər olur. Plazmada ambipolyar sahənin mövcud olması, ionların sürətlərə görə paylanma funksiyasını təhrif edir və ona görə də onun təsirini nəzərə almaq lazımdır. Civə plazmasında ionların paylanma funksiyasının sıraya ayrılışında 0 – 6 tərtibli Lejandr əmsallarının təcrübi və nəzəri qiymətlərinin müqayisəsi, onların bir-birinə uyğun gəldiyini göstərir. Müsbət ionların enerjisi azaldıqca, plazmanın anizotropluğu aşağı düşür.

Açar sözlər: qaz boşalması, plazmanın anizotropluğu, ionların paylanma funksiyası, rezonans yüksüzləşmə, ambipolyar diffuziya.

PACS: 52.80.-s

Müasir dövrdə yüksək enerjili qurğularda tətbiq edilən ion cihazlarında işçi mühit olaraq, ya təsirsiz qazlardan və ya da təsirsiz qazlarla civə qarışığından geniş istifadə edilir. Tətbiq edilən cihazlarda yaranan elektrik boşalmalarında elementar proseslərin baş vermə mexanizmlərinin öyrənilməsi, onların idadə olunması baxımından öz aktuallığını saxlamaqdadır. Plazmada baş verən proseslərdən biri də yüklü zərrəciklərin yüksüzləşmə prosesidir. Yüklü zərrəciklərin sərbəst qaçış yolunun uzunluğu qabın radiusundan çox-çox kiçik olduğu halda təsirsiz qaz və ya civə buxarı plazması qeyri-bircins qızdıqda, ionların paylanma funksiyası buxarın sıxlığından və α_0 , β , γ əmsalları isə radiusdan asılı olur [1]. Ambipolyar sahə yüksəldikcə, ionların orta və orta kvadratik sürətləri də yüksəlir. Həmin hal ambipolyar sahədə ionların əlavə sürət qazanması ilə izah edilir.

Güclü elektrik sahəsinin yuxarı sərhəd qiymətlərində ionların dreyf sürəti üçün bizim aldığımız nəticələr [2,3]-də alınan nəticələrlə üst-üstə düşür. Aparılan tədqiqat işində də müəlliflər, $\sqrt{\frac{\beta}{\alpha_0}}$ ifadəsi sonsuzluğa yaxınlaşdıqda, ionların sürətlərə görə paylanma funksiyasının Maksvel paylanmasına çevrilməsini müşahidə etmiş və yüksüzləşmə nəticəsində yaranan ionların istilik sürətləri nəzərə alınmamışdır. Ona görə də, ionların sürətlərə görə paylanma funksiyası (İPF) üçün aldığımız nəticələr həmin müəlliflərin nəticələrinə uyğun gəlir və göstərilən həmin işdə plazmada rezonans yüksüzləşmə prosesinin İPF-a təsirini baxılmamışdır.

Məlumdur ki, ionların sürətlərə görə paylanma funksiyası [1]:

$$F_i(v_i) = \frac{2\sqrt{\alpha_0}\beta}{\sqrt{\pi}} v_i \exp(-\beta v_i^2) \int_{-\sqrt{\beta+\alpha_0}v_i}^{\sqrt{\beta-\alpha_0}v_i} \exp(t^2) \operatorname{erfc}(-t) dt \cdot \left\{ 1 + O\left(\frac{\alpha_0}{\beta}\right) \right\} \quad (1)$$

şəklindədir. İfadədən göründüyü kimi sürət moduluna görə ionların paylanma funksiyası α_0 və β parametrlərindən asılıdır. Odur ki, (1) tənliyi, dayanıqlı Maksvel paylanma tənliyindən fərqlənir.

İonların paylanma funksiyalarında həmin fərqlərin yaranmasına səbəb, tətbiq edilən fiziki modellərin müxtəlifliyidir. Müsbət ionların yüksüzləşmə prosesi nəticəsində yaranmasını nəzərə almadan qəbul edək ki, məsələnin şərtinə görə yaranan ionların sürəti, onların sərbəst qaçış yolunda elektrik sahəsindən qazandıqları orta sürətdən çox kiçikdir. Bu halda, yeni yaranan zəif elektronların konsentrasiyasının, ionlar dəstəsinin tərzliyi olduqda olduğu haldakı elektrik sahəsində sürətli ionla-

rın yaratdıqları konsentrasiyaya nisbətən çox böyük olması faktı nəzərə alınmır. Nəticədə, ən ehtimalı sürət, atomların, yeni yenice yaranan ionların temperaturu ilə təyin olunur (baxdığımız işdə alındığı kimi).

Otaq temperaturunda İPF-nin hesablanmış qiymətlərinə əsaslanaraq, yüksüzləşmə kəsiyinin ionların paylanma funksiyasına təsirini yoxlamaq üçün, civə buxarı plazmasında ionların dreyf sürətinin E/P_0 nisbətindən asılılığını araşdırmışıq. Aydın olmuşdur ki, ionların paylanma funksiyasının ifadəsi, $\sqrt{\frac{\alpha_0}{\beta}} \ll 1$ və $v_{iz} \leq 0$ şərtləri ödəndikdə [1]:

$$f_i(\vec{v}_i) = A \exp[-\beta v_i^2 + (\beta + \alpha_0)v_{iz}^2] \operatorname{erfc}(-\sqrt{\beta + \alpha_0}v_{iz}) \left\{ 1 + O\left(\frac{\alpha_0}{\beta}\right) \right\}. \quad (2)$$

şəklində verilir. Burada $A = \frac{\gamma\beta}{2\pi}$ – sabit vuruq, v_i – ion sürətinin modulu, $\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty \exp(-t^2) dx$. So-

nuncu (2) ifadəsindən istifadə edərək, Hg buxarı plazmasında Hg⁺ ionların dreyf sürətinin E/P_0 nisbətindən asılılığının nəzəri və təcrübi qiymətləri müqayisə edilir.

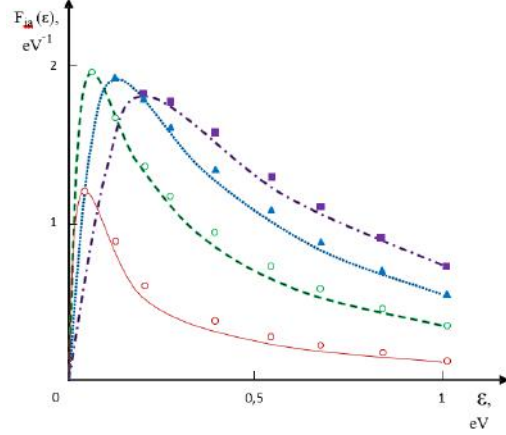
Müsbət ionların dreyf sürətini hesabladığımızda $\frac{\beta}{\alpha_0} \rightarrow 0$ şərtinin ciddi ödəndiyini qəbul edərək, hesablamalarda və digər hallarda $\int_0^\infty F_{i\varepsilon}(\varepsilon_i) d\varepsilon_i$ normallaşdırıcı vuruqdan istifadə etmişik. Yüksüzləşmə kəsiyinin sürətdən asılılığını nəzərə almaqla hesablamalar aparmışıq. Civə ionlarının kəsiyi üçün verilənləri [4]-dən götürmüşük. Tədqiqatdan alınan həm təcrübi, həm də nəzəri qiymətlər üst-üstə düşür. Bu isə təbiiq etdimiz ifadənin doğrulunu göstərir.

Aşağıda göstərilən şəkil 1 və 2-də 0 – 3 və 4 – 6 tərtibli Lejandr poliniumlarına görə sıraya ayrılmış İPF-nın əmsallarının hesablanmış və ölçülmüş enerji asılılıqları təsvir edilir. Tədqiqat işlərində hesablamalar, əlavə parametrlər daxil edilmədən aparılmış, atomun temperaturu 410 K götürülmüş və $\frac{E}{P} = 400 \frac{V}{cmTorr}$ parametrinin ölçülmüş qiymətlərindən istifadə edilmişdir. Neytral atom üçün seçilmiş bu temperaturun qiyməti, enerjiyə görə paylanma funksiyasının hesablanmış əyrisi təcrübi əyri ilə üst-üstə düşdüyü hala uyğun gəlir. Şəkil 1 və 2-ni müqayisə etsək, nəzəri və təcrübi əyriyə bir-birinə oxşar olduğunu görürük. Müsbət ionların enerjisi azaldıqca, plazmanın anizotropluğu aşağı düşür. Bununla yanaşı, göstərmək olar ki, 0,05 eV-dan kiçik qiymətlərdə də oxşarlıq saxlanılır. Müsbət ionların enerjisi artdıqca, yəni anizotropluq yüksəldikcə, paylanma funksiyalarında fərqlilik yaranır.

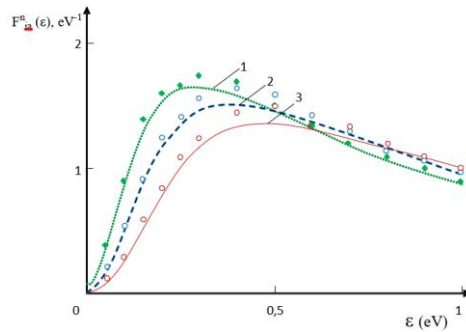
Nəhayət, civə buxarı plazmasında $\sqrt{\frac{E}{P} \left(\frac{V}{cmTorr} \right) \frac{1}{\sigma(10^{-15} cm^2)}} \gg 1$ (burada P – civə buxarının təzyiqidir) və $PR(Torr \cdot cm) \gg 10^{-3} \frac{T_a(K)}{\sigma_e(10^{-16} cm^2) \sqrt{\delta}}$ (burada σ_e – elektronların neytral atomlardan elastiki səpilməsinin kəsiyi, δ – plazmada elektronun neytral atomlarla elastiki toqquşmalarında itirdiyi orta nisbi enerjisidir) bərabərsizliklərinin eyni zamanda doğru olması üçün yuxarıda irəli sürdüyümüz nəzəriyyə ödənməli, $\frac{E}{P}$ nisbətinin kiçik qiymətlərində ambipolyar diffuziya prosesinin boşalmadakı rolu az olmalı, rezonans yüksüzləşmə kəsiyi yüksək olmalı və neytral

atomlarda elastiki səpilmə kəsiyi isə kiçik olmamalıdır.

Beləliklə, yuxarıdakı araşdırmaları yekunlaşdıraraq, deyə bilərik ki, güclü elektrik sahələrində civə buxarı boşalmasında boşalmanın simmetriya oxundan kənardakı ionların sürətlərə görə paylanma funksiyasını təyin etmək üçün ambipolyar sahənin təsirini mütləq nəzərə almaq lazımdır.



Şəkil 1. Lejandr əmsallarının ilk dörd əmsalına görə sıraya ayrılışında İPF-nın ionların enerjisindən asılılığı. Apparət funksiyasının eni $\Delta\varepsilon = 0.05V$. Nöqtələr – təcrübi, xətlər – nəzəri.



Şəkil 2. 4-6 Lejandr əmsalları üçün İPF-nın ionların enerjisindən asılılığı. 1) $n=4$; 2) $n=5$; 3) $n=6$. Nöqtələr – təcrübi, xətlər – nəzəri.

[1] T.X. Hüseynov. Güclü elektrik sahəsində civə plazmasının yüksüzləşmə halında ionların paylanması. Energetika problemləri. Bakı, 2021, №2, s.35-39.
[2] Мак-Даниель И., Мезон Э. Подвижность и диффузия ионов в газах. М.: Мир. 1976. с. 422.

[3] А.С. Мустафаев. Динамика электронных пучков в плазме. ЖТФ, 2001, т. 71, с. 111, 121.
[4] Б.М. Смирнов. Строение атома и процесс резонансной перезарядки. УФН, 2001, т. 171, № 3, с. 233-266.

T.Kh. GUSEINOV, B.B. DAVUDOV, E.A. RASULOV, Sh.A. ALLAKHVERDIEV, E.K. TAGIEVA

DISTRIBUTION OF IONS IN THE PLASMA OF ELECTRIC DISCHARGE IN MERCURY VAPOR

The distribution of ions in the plasma of an electric discharge in mercury vapor has been studied and it has been found that the most probable velocities of the ions are equal to the most probable velocities of neutral atoms. The presence of an ambipolar field in plasma distorts the ion velocity distribution function, so its effect must be taken into account. Comparison of the experimental and theoretical values of the Legendre coefficients of the order of 0-6 when expanded into a series of the ion distribution function in mercury plasma shows that they correspond to each other. As the energy of the positive ions decreases, the anisotropy of the plasma decreases.

Т.Х. ГУСЕЙНОВ, Б.Б. ДАВУДОВ, Э.А. РАСУЛОВ, Ш.А. АЛЛАХВЕРДИЕВ, Э.К. ТАГИЕВА

**РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ В ПЛАЗМЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО РАЗРЯДА
В ПАРАХ РТУТИ**

Исследовано распределение ионов в плазме электрического разряда в парах ртути и установлено, что наиболее вероятные скорости ионов равны наиболее вероятным скоростям нейтральных атомов. Наличие амбиполярного поля в плазме искажает функцию распределения ионов по скоростям, поэтому его влияние необходимо учитывать. Сравнение экспериментальных и теоретических значений коэффициентов Лежандра порядка 0-6 при разложении в ряд функции распределения ионов в ртутной плазме показывает, что они соответствуют друг другу. По мере уменьшения энергии положительных ионов анизотропия плазмы уменьшается.

DAVAMLIL DƏRMAN ÇATDIRILMASI ÜÇÜN NANOMƏSAMƏLİ QEYRİ-ÜZVİ MEMBRANLAR VƏ ÖRTÜKLƏR İMPLANTASIYA EDİLƏ BİLƏN VASİTƏLƏR KİMİ

Ş.O. EMİNOV, C.A. QULİYEV, A.X. KƏRİMOVA, S.H. ABDULLAYEVA

Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu,

AZ-1143, Bakı şəh., H.Cavid pr. 131

ayselkerimova00@mail.ru

Biz bu məqalədə implantlarda və ya implantasiya edilə bilən cihazlarda nanoməsəmli qeyri-üzvi örtüklərin xüsusiyyətlərinə baxmışıq. İllüstrativ nümunələrdə alüminium oksidi (Al_2O_3) və titan oksidi (TiO_2) ən çox istifadə edilən nanoməsəmli materiallar kimi vurğulanır. Bundan əlavə davamlı dərman çatdırılması sistemləri üçün kritik məsələlər və nanoməsəmli örtüklərin elüsyon profilləri nəzərdən keçirilmişdir. Əldə etdiyimiz məlumatlar göstərir ki, bu sistemlər davamlı dərman çatdırılması təbiiqləri üçün effektiv şəkildə istifadə edilə bilər. Onlar əsas biouyğunluq testlərindən keçir, dərman yükləmə tələblərinə və davamlı dərman daşınması profillərinə həftələr ərzində cavab verir və müasir implant texnologiyalarına tam uyğundur. Müxtəlif terapevtik vəziyyətlərdə implantların effektivliyini və uyğunlaşmasını yaxşılaşdırmaq üçün nanoməsəmli qeyri-üzvi örtüklər mükəmməl vasitə hesab olunur.

Açar sözlər: Al_2O_3 , TiO_2 , nanoməsəmə, nanoboru, oksid təbəqələr, nazik təbəqələr

PACs: 78.20.-e, 73.00.00, 621.378, 826 535.8

GİRİŞ

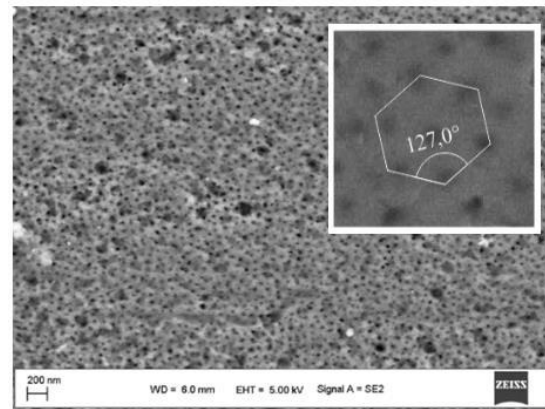
Biotibbi elmlərdə yeni nailiyyətlər, həmçinin qabaqcıl material və texnologiyaların paralel inkişafı, idarə olunan dərman daşınmasının tətbiqi hesabına sürətlə inkişaf edir [22,20]. İdarə olunan dərman daşınmasının məqsədi dərmanı insan bədəninin müəyyən sahələrinə təhlükəsiz və səmərəli şəkildə, lazımi miqdarda çatdırmaq və maksimum terapevtik effekt əldə etməkdir. İdarə olunan dərman daşınma ideyası ilk dəfə 1960-cı illərdə Folkman et al. [14] tərəfindən təklif edilmişdir [3]. Bu məqalədə biz dərman daşınması üçün ən məşhur qeyri-üzvi nanoməsəmli örtüklərdən olan nanoməsəmli alüminium və titan nanoborularını təhlil edirik.

1. NANOMƏSAMƏLİ MEMBRANLAR VƏ ÖRTÜKLƏR

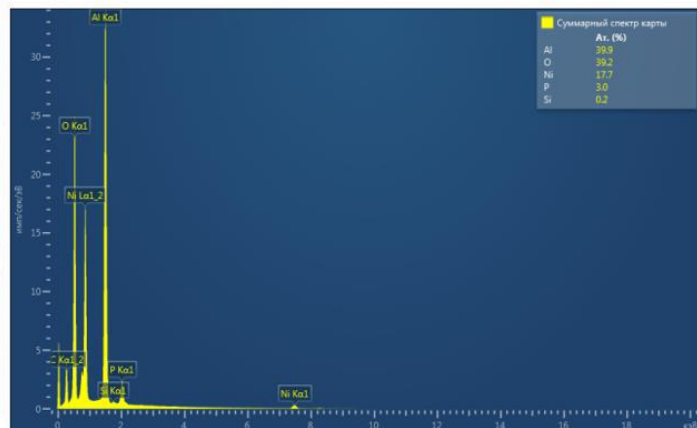
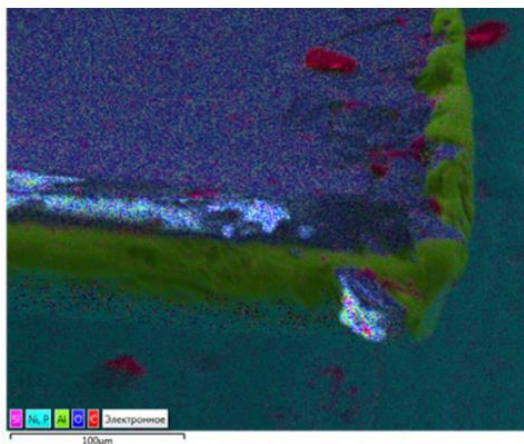
Nanoməsəmli materiallar dedikdə məsəmə ölçüsü təxminən 100 nm-dən az olan materiallar nəzərdə tutulur [5]. Yüksək səth sahəsinə malik nanoməsəmli altlıqlar və örtüklər son vaxtlar nanofabrikasiya, enerji yığıcı, inteqral sxemlər, bioloji və ya kimyəvi sensor-

lar və ortopedik implantlar kimi müxtəlif tətbiqlərdə istifadə olunur. Nanoməsəmli materialları istehsal edərkən onların məsəmə ölçüsü, paylanması və sıxlığı üzərində idarəsi, bundan əlavə, səthin kimyəvi xüsusiyyətləri də tətbiqə görə tənzimləyə bilər.

1.1. NANOMƏSAMƏLİ ALÜMİNİUM



Şəkil 1. Nanoməsəmli alüminium şablonunun SEM təsviri

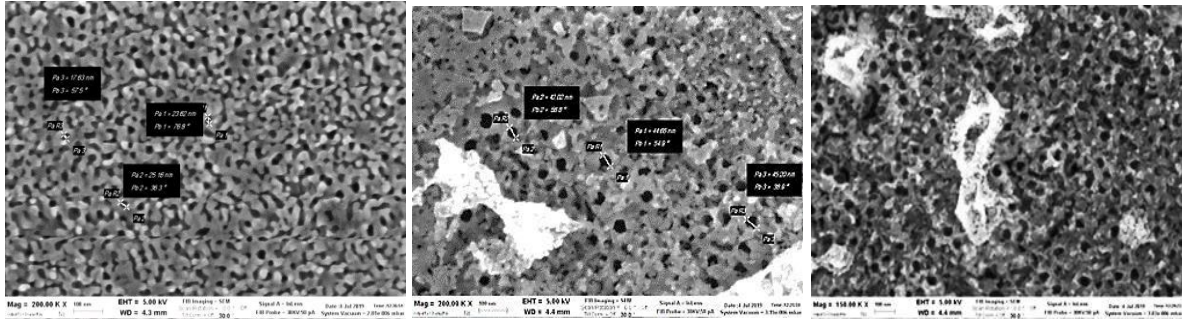


Şəkil 2. AAO nazik təbəqələrinin spektr məlumatlarının RDX görüntüsü.

Anodda oksidləşdirilmiş məsaməli alüminium oksidi elektrik cəhətdən dielektrik, optik cəhətdən şəffaf, kimyəvi cəhətdən sabit və biouyğun materialdır. Müxtəlif elektron, optoelektronik, sensor cihazlarda, həmçinin diş və ortopedik implantlarda geniş istifadə olunur. Məsaməli alüminium oksid nanotəbəqələrinin istehsalı ilə bağlı tədqiqatlar 1960-cı illərə [9] aid edilsə də, Məsuda və digərlərinin işindən sonra tədqiqat və istehsalatda daha geniş yayılmışdır [11]. Nanoməsaməli alüminium oksid şablonları çox geniş ölçü diapazonuna malikdir: məsamə diametri 5 nm ilə 100 nm [16] arasında dəyişir, məsaməduzuluşların qalınlığı isə 1 mkm-dən artıqdır [25]. Şəkil 1-də nanoməsaməli alüminium oksidi şablonunun SEM təsvirini göstərilmişdir. Şəkil 2-də AAO nazik təbəqəsinin çoxqatlı və spektr məlumatlarının EDX spektri (bütün strukturun 5% dəqiqliyi ilə) göstərilmişdir. Al, O və Ni, P və Si daxil olmaqla müəyyən aşqarları ölçülən atom tərkibinin dəyərləri şəkilədəki cədvəldə göstərilmişdir. Həm EDX spektrindən, həm də daxil edilmiş cədvəldən görüldüyü kimi, təbəqədə alüminiumun oksigenlə atom nisbəti adətən 1:1-dir (Al = 39,9%, O = 39,2 at%).

1.2 TİTAN NANOBORULARI

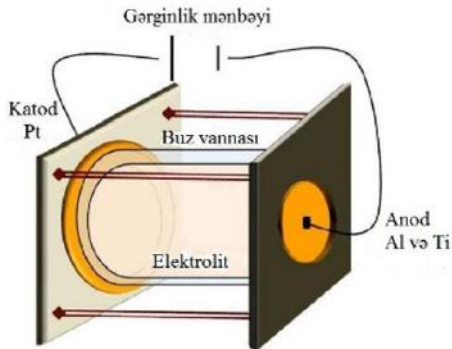
Titan və titan ərintiləri mexaniki gücü və biouyğunluğun unikalılığı səbəbindən ortopediya və diş implantları prosedurlarında geniş şəkildə istifadə edilmişdir. Titan oksigenə məruz qaldıqda onun səthində TiO₂ oksid təbəqəsi əmələ gəlir. Bununla belə, lokallaşdırılmış dərman çatdırılmasını asanlaşdırmaq üçün implant səthində idarə oluna bilən şəkildə TiO₂ təbəqəsini yaratmaq mümkündür. 1970-ci illərdən bəri ortopedik implantlarda Ti və TiO₂ təbəqələri geniş istifadə olunur. Hal-hazırda boru diametri təxminən 150 µm [23] aralığında və boru uzunluğu isə 200 µm [7] aralığında dəyişən titan nanoboru massivlərinə nail olmaq mümkündür. TiO₂ nanoborularının SEM şəklini şəkil 3-də görmək olar. Titan və titan ərintiləri insan orqanizmində ən çox istifadə edilən implant materiallarından biridir və bu implantlara ehtiyac hər il artmaqdadır.



Şəkil 3. Nanoborulu titan şablonunun 10 dəqiqəlik, 20 dəqiqəlik və 30 dəqiqəlik SEM təsvirləri

2.1. ALÜMİNİUM OKSİD ŞABLONLARI

İdarə oluna bilən məsamə ölçülərinə görə və səmərəli istehsal texnologiyasına görə alüminium oksid nanoşablonları həm süni tədqiqat sınaqlarında, həm də təbii olaraq bir çox dərman çatdırılmasında istifadə olunur. Onlar sistemli terapiyanın ciddi yan təsirlərə səbəb ola biləcəyi və dərmanın təkrar tətbiqinin riskli və ya sadəcə xoşagəlməz ola biləcəyi müxtəlif şərtlər üçün çox yaxşı dərman çatdırma cihazları kimi xidmət edir.



Şəkil 4. Nanoməsaməli alüminium və titan anodlaşdırılmasında istifadə edilən qurğu

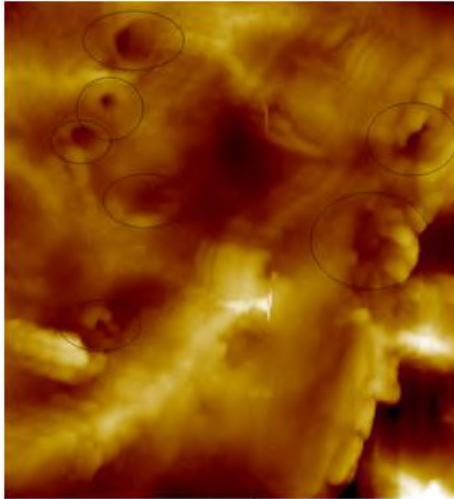
Anodda oksidləşdirilmiş alüminium nanoməsaməli şablon nümunələrinin istehsalı 1960-cı illərdən bəri geniş şəkildə öyrənilmiş və müxtəlif üsullarla hazırlanmışdır [10,15,26]. Oksidləşmiş alüminium təbəqəsinin ümumi istehsal üsulları adətən sulfat (H₂SO₄), oksalik (turşəng, C₂H₂O₄) və fosfor turşuları (H₃PO₄) və ya bu turşuların birləşmələrinin turşu mühitində oksidləşməsi zamanı başlayır (şəkil 4).

Turşu mühitində oksidləşdirmə zamanı metalda oksid təbəqəsi əmələ gəlir. Anodda oksidləşmə zamanı tətbiq olunan gərginlik məsamələrin yaranmasına və oksid təbəqəsinin böyüməsinə səbəb olur. Seçilmiş məhlulun növü və turşuluq dərəcəsi (pH) məsamələr arasında məsafələri təyin edərkən, anodda oksidləşmə zamanı tətbiq olunan gərginlik isə şablonların məsamə diametrini təyin edir [1,2]. Ümumiyyətlə, anodda oksidləşmə prosesinin müddəti nə qədər uzun olarsa, nəticədə alınan məsaməli oksid şablon model daha qalın olur. Bununla belə, turşu mühit də oksid təbəqəsinin həllinə səbəb olur; və nəticədə məsamələrin diametrinin genişlənməsi və dağılma nisbətləri bərabər olur. Oksid təbəqəsinin alınmasında digər mühüm amillərdən biri də elektrolitin temperaturudur. Aşağı temperatur oksidləşmə sürətini ləngidir, bu da məsamələrin daha nizamlı əmələ gəlməsinə səbəb olur [4]. Bu metodun universallığı ondan ibarətdir ki, alüminium istə-

nilən metal səthə tətbiq oluna bilər və sonra anodda oksidləşmə prosesi zamanı tamamilə nanoməsaməli alüminium oksidinə çevrilə bilər. Titan implantlarının səthlərinə elektron şüa tozlandırılması üsulundan istifadə etməklə alüminium çökdürülə bilər [8]. Ürək-damar stentləri kimi daha mürəkkəb səthlər üçün alüminiumun çökdürülməsi isə fiziki buxar çökmə prosesi istifadə edilə bilər [12].

2.2. TİTAN OKSİD ŞABLONLARI

TiO₂ nanoboru şablonları nanoməsaməli alüminium oksidinə bənzər anodda oksidləşmə üsulundan istifadə etməklə hazırlanır (şəkil 4). Müxtəlif boru diametrlərini əldə etmək üçün müxtəlif elektrolitlər istifadə olunur. TiO₂ nanoşablonlarının istehsalı üçün ən çox istifadə olunan elektrolitlər hidrofluorik turşu [16], üzvi elektrolitlər olan flüor ionu olan vannalar [23] və ya xlor əsaslı elektrolitlərdir [6]. Borunun ölçüsü və titan şablonunun uzunluğu, elektrolitin növü və pH-ı, həmçinin alüminium oksidinə istehsalına bənzər tətbiq olunan gərginliklə idarə oluna bilər. Bu üsulla əmələ gələn TiO₂ səthinin morfologiyası ondan ibarətdir ki, o, öz-özünə nizamlanmış nanoboru massivlərindən ibarətdir. Yaranan nanoborunun diametri, nanoborunun divar qalınlığı və ümumi titan təbəqəsinin qalınlığı eksperimental parametrlər vasitəsilə dəqiq idarə oluna bilər. Membranın mexaniki xassəsini yaxşılaşdırmaqla yanaşı, sintez edilmiş TiO₂ nanoboru massivlərini yüksək temperaturlarda termiki işlənmə etməklə TiO₂ anataz fazasını rutil fazaya çevirmək olur. Nanoborulu titan dioksidin AQM təsviri şəkil 5-də göstərilmişdir.



Şəkil 5. TiO₂ təbəqəsinin AQM təsviri.

BİOUYĞUNLUQ

İmmunitetin xarici infeksiya bakteriyalara qarşı qorunmasında, alüminium oksidi və səthi dəyişdirilmiş alüminium oksid nümunələri süni tədqiqat sınaqlarında məsaməli alüminium oksid kapsulları heç bir fərq göstərməmişdir [17], lakin təbii şərait tədqiqatları üçün bu kapsullar fərq göstərmişdir. Alüminium oksid şablonunun səthi, kristal qəfəsdəki defektlərlə yüklənir. Bu defektlər bioloji materialların səthə yapışmasına və nəticədə məsamələrin tıxanmasına və səthin çirklənməsinə səbəb olur. Bu defektlərin təsirini araşdırmaq üçün

nanoməsaməli alüminium oksidi şablonlarının səthi polietilen qlikolun (PEQ) kovalent rabitəsi ilə dəyişdirilir. Sulu məhlulda daimi hərəkətdə olan PEQ zəncirləri hər hansı biomolekulların səthə yaxınlaşmasının qarşısını alır [16]. İmplantasiyadan bir həftə sonra təbii şərait tədqiqatlarında PEQ ilə dəyişdirilmiş kapsulları əhatə edən toxumanın orta dərəcədə iltihabı, dəyişdirilməmiş kapsullarda isə daha çox iltihab müşahidə olunur.

Sümük implantlarının istifadəsi üçün alüminium oksidin osteoblast hüceyrələrinə təsirini öyrənmək də vacibdir. Nanoməsaməli matrislər şəklində olan alüminium oksidi 9 gündən sonra ilkin alüminium membran kütləsinin təxminən 0,03%-ni təşkil edən alüminium ionlarının sızması ilə insan osteoblast hüceyrələrinin hüceyrə fəaliyyətinə mənfi təsir göstərmir [18]. Alüminium oksidi osteoblast hüceyrələrinin böyüməsi, yayılması və səthə yapışması üçün uyğun bir səth təmin edir. Aparılan tədqiqatlar göstərmişdir ki, 4 saat hüceyrə yetişdirmədən sonar dənəcik ölçüsü 49 nm-dən az olan alüminium oksidinə osteoblastların yapışması, dənəcik ölçüsü 67 nm-dən çox olan alüminium oksidinə nisbətən 52% daha yüksəkdir [24]. Nanoməsaməli alüminium oksid şablonlarının başqa bir xüsusiyyəti odur ki, anodda oksidləşmə prosesi üçün fosfor turşusu istifadə edilərsə, nanoməsamələrin divarlarında qalıq fosfat ionları qalır. Bu şablonlardan ortopedik proseslər zamanı istifadə etdikdə, məsamələrdə qalıq fosfat ionlarının olması implantın mineralaşma və toxumaya uyğunlaşma proseslərini asanlaşdırır.



Şəkil 6. Nanoməsaməli alüminium kapsulun təsviri.

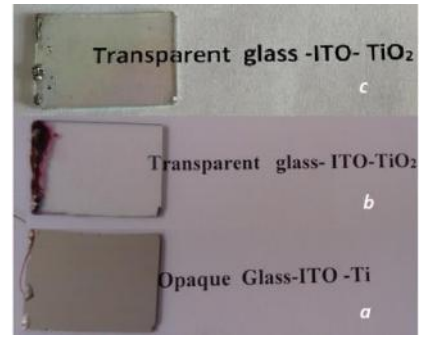
Məsaməli alüminium oksidi membranları yarım-keçirici filtrlər kimi. Məlumdur ki, tibbdə katalaza, vitamin C və endostatin daxil olmaqla oftalmik preparatlar üçün məsaməli alüminium oksidindən istifadə edilir. Təcrübələr nəticəsində məlum olmuşdur ki, H₂O₂-ni emal edən bir antioksidan ferment, katalaza nanoməsaməli alüminium oksidi vasitəsilə yeridildikdə, H₂O₂-nin fəaliyyəti bloklanır və hüceyrələr bir təbəqəyə qədər sağ qalır. Nanoməsaməli alüminium oksidi öz-özünə filtr kimi istifadə edildikdə emal zamanı kövrək ola bilər, lakin onun mexaniki möhkəmliyini artırmaq olar. Nanoməsaməli alüminium oksidi kapsullarının mexaniki möhkəmliyini alüminium borusunun içəridən xaricə doğru anodda oksidləşdirilməsi ilə əldə etmək olar (şəkil 6). Yaranan məsaməli alüminium oksidi boru membranı borunun hər iki ucunu möhürləməklə biofiltrasiya kapsuluna çevrilə bilər. Kapsullar müxtəlif molekulyar çəkirlərə malik iki fərqli model preparatı, flüoresan izotiosiyanat (FITC) və dekstran konjuqatları ilə doldurula bilər. Molekulyar daşınma membranının məsamə ölçüsünün müvafiq seçimi ilə idarə oluna bilər.

Belə ki, hissəcik ölçüsü nə qədər kiçik olsa, buraxılma sürəti də bir o qədər yüksəkdir. Həmçinin şəkərli diabetin müalicəsi üçün də alternativ enkapsulyasiya strategiyası kimi məsaməli alüminium oksid membranlarından istifadə imkanları araşdırılmışdır.

Restenoz problemini həll etmək üçün ürək-damar stentlərində də örtük kimi dərmanla örtülmüş məsaməli alüminium oksidindən istifadə olunur. İltihab meyarları baxımından keramika ilə örtülmüş stentlər örtülməmiş stentlərlə müqayisədə daha yumşaq damar reaksiyası göstərmişdir. Dərman yüklü stentlər, dərman yüklənməsindən asılı olmayaraq daha az iltihab göstəricisinə malikdir. Nəticədə, nanoməsaməli alüminium oksidinin ürək-damar stentləri üzərində dərman sızdıran örtük kimi uyğun olduğu öz təsdiqini tapmışdır.

Titan və titan ərintiləri mexaniki möhkəmlikli, aşağı sıxlıqlı, korroziyaya qarşı müqavimətli və sitotoksik təsirlərin olmaması səbəbindən ortopedik implantlarda istifadə edilən əsas materiallardan biridir [19, 21, 13]. Titan kifayət qədər reaktiv metaldir və oksigenə məruz qaldıqda dərhal oksid təbəqəsi əmələ gətirir. Bir çox tədqiqat göstərdi ki, TiO_2 nanoboru örtükləri adı titanla müqayisədə təkcə biouyğun deyil, hətta sümük böyüməsinə də köməklik edir. Anodda oksidləşdirilməmiş nümunələrlə müqayisədə anodda oksidləşdirilmiş titan nümunələri osteoblast (sümük toxumalarının cavan hüceyrələri) yapışmasının artmasını təmin edir.

Ortopedik implant əməliyyatlarından sonra yaranan kəskin və ya xroniki infeksiyaya davamlı dərman daşması kimi TiO_2 nanoboru şablonlarının təsiri öyrənilmişdir. İnfeksiya üçün hal-hazırda istifadə edilən üsullar venadaxili olaraq əməliyyatdan sonra nekrotik və ya avaskulyar toxuma səbəbindən sümük toxumasında infeksiya yerinə dərman çatdırılmasında tam effektivli deyil. Bakterial yapışmanın qarşısını almaq və həmçinin nanostrukturulu səthin osseointegrativ xüsusiyyətlərini qorumaq üçün, idarə oluna bilən antibiotik buraxılmasında TiO_2 şablonlarından istifadəsi araşdırılmışdır. Bakteriyalar səthə yapışa bilmədiyi halda onlar immunitet sistemi tərəfindən asanlıqla öldürülür. 4 saatlıq inkubasiyadan sonar, dərman çatdırılma nanoşablonlarının heç bir antibiotiki olmayan titan və ya TiO_2 nanoşablonları ilə müqayisəsində bakteriya toplusunun təxminən 70% azalması müşahidə olunur. Həmçinin antibiotikli və ya antibiotiksiz nanostrukturulu səthlərin 3 həftəlik inkubasiyadan sonra osteoblast hüceyrələrinin daha yaxşı yapışması və böyüməsi nümayiş etdirdiyini müşahidə edilir. Bu da nanoborulu səthlərin osteoblastların differensiasiyası və matris istehsalı üçün daha effektiv platformalar təklif etdiyini sübut edir.



Şəkil 7. Strukturun optik təsvirləri. (a) oksidləşmədən əvvəl, (b) oksidləşmədən sonra və (c) termiki işlənmədən sonra

Şəkil 7-də anodda oksidləşmədən əvvəl, sonra və eləcə də termiki işlənmədən sonrakı Ti-örtüklü şüşə/ITO strukturunun görünüşünün dəyişməsi göstərilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi anodda oksidləşmə prosesi zamanı ilkin qeyri-şəffaf Ti təbəqəsi (a) tədricən TiO_2 -yə çevrilir və şəffaf olur (b). $450^\circ C$ -də sonrakı termiki işlənmə zamanı nümunələrin optik ötürülməsi və şəffaflığı termiki işlənilməyənlərə nisbətən artır.

NƏTİCƏLƏR

Dərmanların sərbəst buraxılması üçün nanoməsaməli materialların istifadəsi, xüsusən polimer örtüklərlə müqayisədə yeni inkişaf mərhələsindədir. Bu materialların kliniki tətbiqi geniş vüsət alsada, onların tam potensialı şəkildə həyata keçirilməsində hələ də çoxlu araşdırmalara və sınaqlara ehtiyac var. Bu məqalədəki nümunələr hal-hazırda tədqiq olunan materialların və metodların yalnız bəzilərini əks etdirir. Müasir texnologiyaların daha da inkişafı nəticəsində "ağıllı" implantlar kimi bir çox yeni tətbiqlərin və ya cihazların ortaya çıxması nəzərdə tutulmuşdur. Bizim apardığımız araşdırmalar göstərir ki, nanoməsaməli örtüklər və ya cihazlar üzərində aparılan təcrübələr bu sistemlərin mütləq sadə xaric olunma prosesi üçün effektivdir. Onlar əsas biouyğunluq testlərindən keçir, dərman yükləmə tələblərinə və müasir implant texnologiyalarına uyğundur. Hal-hazırda qarşıda duran həll etməli olduğumuz, gələcək problemlərin əsasını nanoməsaməli örtüklərin tətbiqdən asılı olaraq dərman buraxılma sürəti və miqdarına nəzarəti təkmilləşdirməkdən ibarətdir. Apardığımız araşdırmaların effektivliyini qiymətləndirmək üçün bu təcrübələr süni sınaq tədqiqatlarından əlavə təbii sınaq şəraitlərində də tədqiqatlar aparılması planlaşdırılmışdır.

- [1] A.L. Friedman, D. Brittain, L. Menon. Roles of pH and acid type in the anodic growth of porous alumina, Journal of Chemical Physics, 127 (15), 2007, 154717.
- [2] A.P. Li, F. Muller, A. Birner, K. Nielsch, U. Gosele. Hexagonal pore arrays with a 50– 420 nminterpore distance formed by self-organization

- in anodic alumina, Journal of Applied Physics 84 11, 1998, 6023–6026.
- [3] A.S. Hoffman. The origins and evolution of “controlled” drug delivery systems, Journal of Controlled Release, 132, 3, 2008, 153–163.
- [4] B. Long, L. Wei Sang. Influence of anodizing conditions on the ordered pore formation in

- anodic alumina, *Journal of Physics. D. Applied Physics*, 20, 2000, 2527.
- [5] B. Roszek, W.H.d. Jong, R.E. Geertsma. Nanotechnology in medical applications: state-of-the-art in materials and devices, Department of Pharmaceutical Affairs and Medical Technology of the Dutch Ministry of Health, Welfare and Sports, 2005.
- [6] C. Richter, Z. Wu, E. Panaitescu, R.J. Willey, L. Menon. Ultra-high-aspect-ratio titania nanotubes, *Advanced Materials* 19, 7, 2007, 946–948.
- [7] C.A. Grimes. Synthesis and application of highly ordered arrays of TiO₂ nanotubes, *Journal of Materials Chemistry* 17,15, 2007, 1451–1457.
- [8] E.P. Briggs, A.R. Walpole, P.R. Wilshaw, M. Karlsson, E. Palsgard. Formation of highly adherent nano-porous alumina on Ti-based substrates: a novel bone implant coating, *Journal of Materials Science: Materials in Medicine* 15, 9, 2004, 1021–1029.
- [9] G.C. Wood, J.P.O. Sullivan, B. Vaszko. The direct observation of barrier layers in porous anodic oxide films, *Journal of The Electrochemical Society* 115, 6, 1968, 618–620.
- [10] H. Masuda, H. Asoh, M. Watanabe, K. Nishio, M. Nakao, T. Tamamura. Square and triangular nanohole array architectures in anodic alumina, *Advanced Materials* 13, 3, 2001, 189–192.
- [11] H. Masuda, K. Fukuda. Ordered metal nanohole arrays made by a two-step replication of honeycomb structures of anodic alumina, *Science* 268, 5216, 1995, 1466–1468.
- [12] H. Wieneke, O. Dirsch, T. Sawitowski, Y.L. Gu, H. Brauer, U. Dahmen, A. Fischer, S. Wnendt, R. Erbel. Synergistic effects of a novel nanoporous stent coating and tacrolimus on intima proliferation in rabbits, *Catheter Cardiovasc Interv*, 60, 3, 2003, 399–407.
- [13] H.L. Freese, M.G. Volas, C.R. Wood, M. Textor, in: K.H.J.C. Buschow, W. Robert, Merton C. Flemings, Bernhard Ilchner, Edward J. Kramer, Subhash Mahajan. Patrick Veyssière, Subhash Mahajan, Patrick Veyssière (Eds.), *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*, Informa Health Care, New York, 2003.
- [14] J. Folkman, D.M. Long Jr., R. Rosenbaum. Silicone rubber: a new diffusion property useful for general anesthesia, *Science* 154, 745, 1966, 148–149.
- [15] K. Nielsch, J. Choi, K. Schwirn, R.B. Wehrspohn, U. Gosele. Self-ordering regimes of porous alumina: the 10 porosity rule, *Nano Letters* 2, 7, 2002, 677–680.
- [16] K.C. Popat, G. Mor, C.A. Grimes, T.A. Desai. Surface modification of nanoporous alumina surfaces with poly(ethylene glycol), *Langmuir* 20, 19, 2004, 8035–8041.
- [17] K.E. La Flamme, K.C. Popat, L. Leoni, E. Markiewicz, T.J. La Tempa, B.B. Roman, C.A. Grimes, T.A. Desai. Biocompatibility of nanoporous aluminium membranes for immunoisolation, *Biomaterials* 28, 16, 2007, 2638–2645.
- [18] M. Karlsson, E. Pålsgård, P.R. Wilshaw, L. Di Silvio. Initial in vitro interaction of osteoblasts with nano-porous alumina, *Biomaterials* 24, 18, 2003, 3039–3046.
- [19] M. Long, H.J. Rack. Titanium alloys in total joint replacement—a materials science perspective, *Biomaterials* 19, 18, 1998, 1621–1639.
- [20] M. Staples, K. Daniel, M. Cima, R. Langer. Application of micro- and nanoelectromechanical devices to drug delivery, *Pharmaceutical Research* 23, 5, 2006, 847–863.
- [21] M.N. Helmus, D.F. Gibbons, D. Cebon. Biocompatibility: meeting a key functional requirement of next-generation medical devices, *Toxicologic Pathology* 36, 1, 2008, 70–80.
- [22] R. Langer, N.A. Peppas. Advances in biomaterials, drug delivery, and bionanotechnology, *AIChE Journal* 49, 2, 2003, 2990–3006.
- [23] S. Karthik, K.M. Gopal, E.P. Haripriya, Y. Sorachon, P. Maggie, K.V. Oomman, A.G. Craig. Highly-ordered TiO₂ nanotube arrays up to 220 µm in length: use in water photoelectrolysis and dye-sensitized solar cells, *Nanotechnology*, 6, 2007, 065707.
- [24] T.J. Webster, R.W. Siegel, R. Bizios. Osteoblast adhesion on nanophase ceramics, *Biomaterials*, 20, 13, 1999, 1221–1227.
- [25] W. Lee, R. Ji, U. Gosele, K. Nielsch. Fast fabrication of long-range ordered porous alumina membranes by hard anodization, *Nature Materials*, 5, 9, 2006, 741–747.
- [26] Y. Zhao, M. Chen, Y. Zhang, T. Xu, W. Liu. A facile approach to formation of through-hole porous anodic aluminum oxide film, *Materials Letters*, 59, 1, 2005, 40–43.

Sh.O. Eminov, J.A. Guliyev, A.Kh. Karimova, S.H. Abdullayeva

INORGANIC MEMBRANES AND COATINGS AS IMPLANTABLE DEVICES FOR SUSTAINED DRUG DELIVERY USING NANOPARTICLES

The characteristics of nanoporous inorganic coatings on implants or on implantable devices are reviewed. The commonly used nanoporous materials, such as aluminum oxide (Al₂O₃) and titanium oxide (TiO₂) are highlighted with illustrative examples. The critical issues for sustained release systems are examined and the elution profiles of nanoporous coatings are discussed. The available data shows that these systems can be used effectively for sustained release applications. They satisfy the basic biocompatibility tests, meet the requirements of drug loading and sustained release profiles extending to several weeks and also are compatible with current implant technologies. Nanoporous inorganic coatings are well suited to provide improved efficacy and integration of implants in a variety of therapeutic situations.

**НЕОРГАНИЧЕСКИЕ МЕМБРАНЫ И ПОКРЫТИЯ КАК ИМПЛАНТАЦИОННЫЕ
УСТРОЙСТВА ДЛЯ ПРОДОЛЖИТЕЛЬНОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАНОЧАСТИЦ**

Рассмотрены характеристики нанопористых неорганических покрытий на имплантатах или имплантируемых устройствах. Наиболее часто используемые нанопористые материалы, такие как оксид алюминия (Al_2O_3) и оксид титана (TiO_2) выделены иллюстративными примерами. Рассмотрены критические проблемы для систем с замедленным высвобождением и обсуждены профили элюирования нанопористых покрытий. Имеющиеся данные показывают, что эти системы можно эффективно использовать для приложений с устойчивым высвобождением. Они проходят основные тесты на биосовместимость, отвечают требованиям по загрузке препарата и профилям замедленного высвобождения в течение нескольких недель, а также совместимы с современными технологиями имплантации. Нанопористые неорганические покрытия хорошо подходят для повышения эффективности и интеграции имплантатов в различных терапевтических ситуациях.

$K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ KRİSTALINDA II \leftrightarrow III ÇEVİRMƏLƏRİ ZAMANI III VƏ II MODİFİKASIYA KRİSTALLARININ BÖYÜMƏ MORFOLOGİYASI

R.B. BAYRAMLI¹, V.İ. NƏSİROV², İ.M. MƏHƏRRƏMOV³, E.V. NƏSİROV⁴

Bakı Mühəndislik Universiteti¹

AZ-0101, Abşeron, H.Əliyev, 120

Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti²

AZ-1000, Bakı, Ü.Hacıbəyli, 68

Hərbi Elmi Tədqiqat İnstitutu³

H.Əliyev adına Azərbaycan Hərbi İnstitutu⁴

rabayramov@beu.edu.az.

İzotermik kristallaşma üsulu ilə suda məhluldan $K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ monokristalları yetişdirilmiş və II \leftrightarrow III çevrilmələri zamanı II və III modifikasiya kristallarının böyümə morfoloqiyası öyrənilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, tədqiq olunan kristallarda quruluş çevrilmələri enantiotrop olub, II və III-modifikasiyalar arasındakı tarazlıq temperaturu $T_0=457\pm 1$ K-dir.

Açar sözlər: polimorfizm, kristal, modifikasiya, monokristal
UOT: 548.55

GİRİŞ

Kalium nitratda quruluş çevrilmələrinin tədqiqi böyük elmi əhəmiyyəti ilə yanaşı, həm də geniş praktiki əhəmiyyətə malikdir. Belə ki, KNO_3 kristallarının I-romboedrik fazası polyar olub, müxtəlif çevirici cihazlar, yaddaş elementləri və istilik şüalanması ötürüçüləri kimi istifadə oluna bilər. Bundan əlavə belə tədqiqatların nəticələri nanoquruluşlu materialların alınması üsullarında da tətbiq oluna bilər [1].

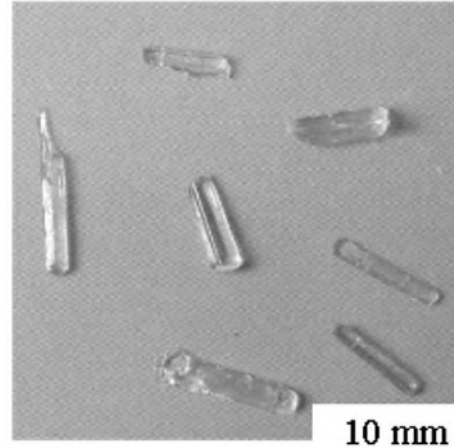
Təqdim olunan işdə KNO_3 kristalında K^+ ionlarının Cs^+ ionları ilə qismən əvəz olunması nəticəsində alınan $K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ monokristalında polimorf çevrilmələr zamanı qarşılıqlı çevrilən modifikasiya kristallarının böyümə morfoloqiyasının tədqiqinə həsr olunmuşdur.

Məlumdur ki, KNO_3 otaq temperaturunda rombik quruluşa malik olub, fəza qrupu $Pmcn$ -dir [2]. $T>403$ K temperaturda rombik qəfəs $R\bar{3}m$ simmetriyalı heksoqonal qəfəsə çevrilir [3]. Bu çevirmə enantiotropdur. Lakin yüksəktemperaturlu kristalı soyudan zaman yeni bir aralıq modifikasiya müşahidə olunur. [4]-də görə bu aralıq modifikasiyanın müşahidə olunması temperatur rejiminin seçilməsindən asılıdır.

$CsNO_3$ kristalında isə otaq temperaturundan ərimə temperaturuna kimi bir quruluş çevrilməsi baş verir. Otaq temperaturunda triqonal qəfəsli, $P3/m$ simmetriyalı qəfəs [5] $T>434$ K temperaturda $Pa3$ simmetriyalı kub qəfəsə çevrilir [6].

TƏCRÜBİ HİSSƏ VƏ NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

Tədqiq olunan nümunələr “ЧДА” markalı KNO_3 və “ХЧ” markalı $CsNO_3$ -ün suda məhlulundan izotermik kristallaşma üsulu ilə alınmışdır. Alınan kristallar müstəvi lövhə və iynə şəkilli olmuşdur (şəkil 1).



Şəkil 1. Suda məhluldan alınan $K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ monokristalları.

Rentgenoqrafik tədqiqatlar göstərmişdir ki, iynənin boyu [001] kristalloqrafik istiqamətdədir.

Hər şeydən əvvəl nümunənin otaq temperaturunda və $T>457$ K temperaturda laueqramları çəkilmiş və kristalda polimorf çevrilmənin baş verdiyi müşahidə olunmuşdur (şəkil 2). Şəkildən həmçinin görünür ki, otaq temperaturunda mükəmməl monokristal alınmış və polimorf çevrilmə də monokristal \rightarrow monokristal tipidir.

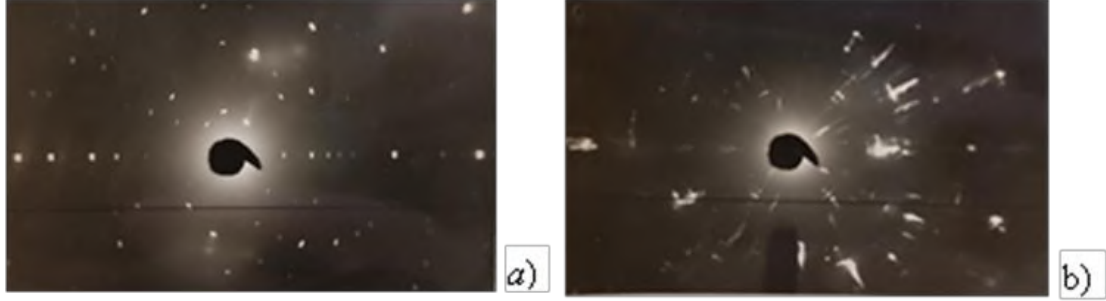
Morfoloji tədqiqatlar qızdırıcı ilə təmin olunmuş MİH-8 tipli polyarizasiya mikroskopunda aparılmışdır. Kristalın temperaturu sonluğu onun səthinə toxunan termocütlə ölçülmüşdür. Ölçmələrinin dəqiqliyi $100^{\circ}C$ -də $\pm 0,5^{\circ}$ olmuşdur. Müşahidələr “Levenhuk C310 NK” tipli kinokamera vasitəsi ilə kompyuterdə aparılmışdır.

Hər şeydən əvvəl, [7]-də verilən metodika üzrə tədqiq nümunədə II \leftrightarrow III çevrilmələri zamanı II və III

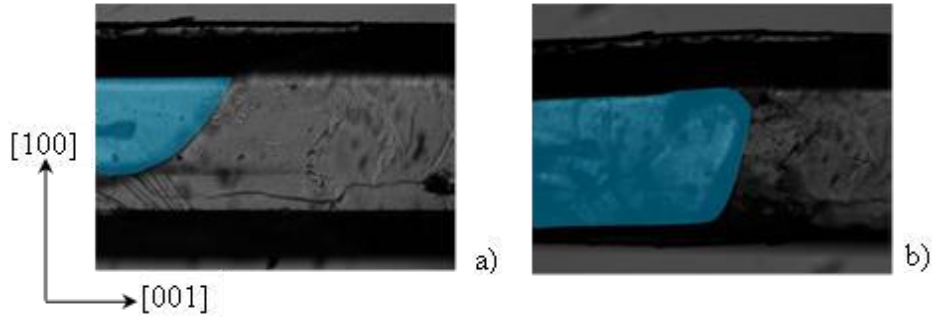
modifikasiyalari arasindaki tarazliq temperaturu təyin olunmuş və $T_0 = 457 \pm 1$ K alınmışdır.

Morfoloji tədqiqatlar göstərir ki, $K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ kristalında II→III çevrilməsi $T > 457$ K temperaturda ana kristal daxilində (II-dodifikasiya) yeni kristalın

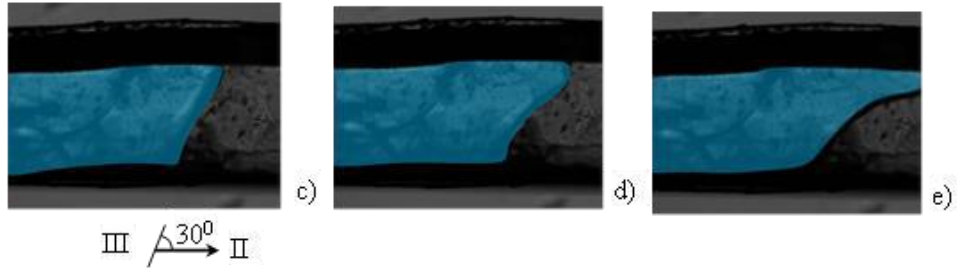
(III-modifikasiya) kristal rüşeyminin yaranması və böyüməsi ilə baş verir. Lakin müxtəlif kristallarda fərqli böyümə morfologiyası müşahidə olunur. Şəkil 3a-dan görüldüyü kimi tədqiq olunan nümunədə II→III çevrilməsində heç bir kristalloqrafik istiqamət üstünlük təşkil etmir.



Şəkil 2. $K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ kristalının otaq temperaturunda (a) və $T > 457$ K temperaturda çəkilmiş lauqramlar (b).



Şəkil 3. $K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ kristalında II→III çevrilməni əks etdirən mikrofotografiyalar. Böyütmə 90 dəfə.

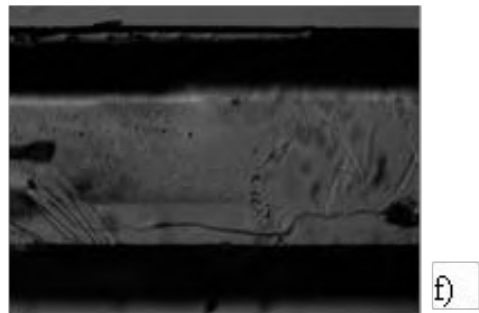


Şəkil 3. $K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ kristalında II→III çevrilməni əks etdirən mikrofotografiyalar. Böyütmə 90 dəfə.

III-modifikasiya kristalı böyüməsinin müəyyən mərhələsində proses təxminən xətti sərhədlə [001] istiqamətində davam edir. Sonrakı mərhələdə II→III çevrilmə prosesi iki modifikasiyanı ayıran sərhəddin [001] kristalloqrafik istiqaməti ilə $\sim 30^\circ$ bucaq əmələ gətirdiyi istiqamətdə gedir və tamamlanır (şəkil 3c, d, e). Sadəcə olaraq II→III çevrilmə prosesinin sonunda modifikasiyalari ayıran sərhəddin istiqaməti müəyyən dərəcədə dəyişir (şəkil 3, f).

$K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ kristalının bu nümunəsində aparılan tədqiqatlar göstərmişdir ki, tam II→III polimorf çevrilmədən sonra ana kristal kifayət qədər mükəmməlləşir və mikroskop altında görünən bir sıra defektlər sıradan çıxır (şəkil 3, f). Bundan əmin olmaq üçün

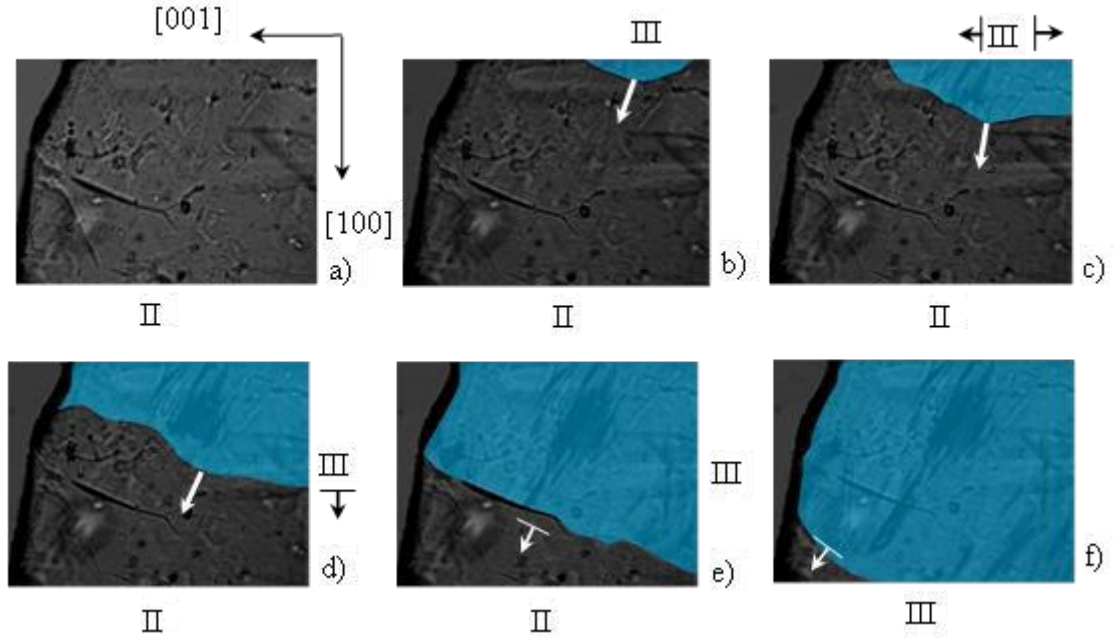
polimorf çevrilmədən əvvəlki kristalın fotosu ilə (şəkil 3, f), sonrakını müqayisə etmək (şəkil 3, e) kifayətdir.



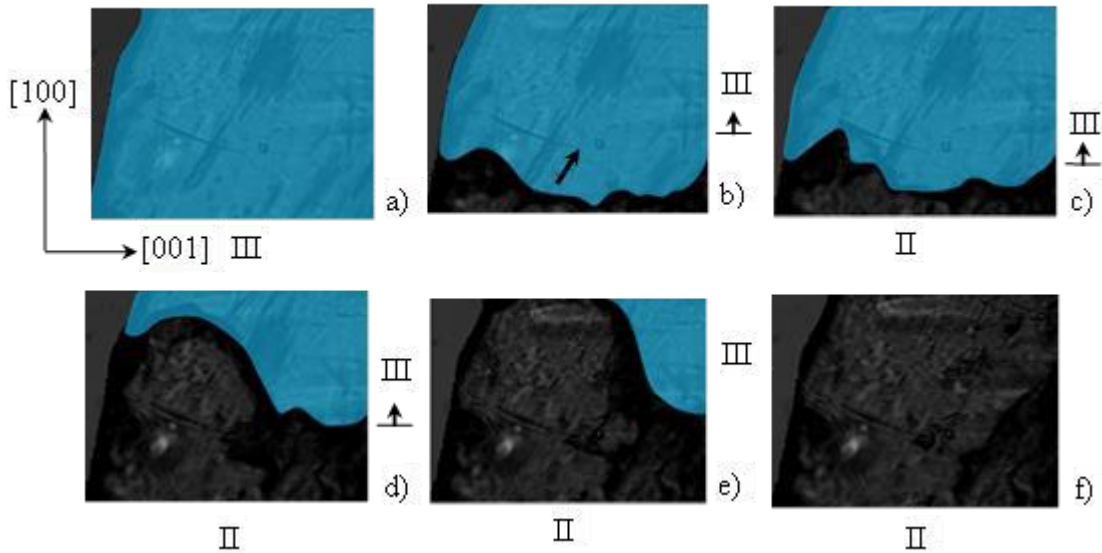
Şəkil 3. $K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ kristalında II→III çevrilmədən sonra ana kristalın mükəmməlləşməsinə əks etdirən mikrofotografiya. Böyütmə 90 dəfə.

Göründüyü kimi, KNO_3 kristalında K^+ ionlarının Cs^+ ionları ilə qismən əvəz olunması II \rightarrow III çevrilmənin morfoloqiyasına təsir göstərir. Bizcə qarşılıqlı çevrilən modifikasiyalı ayıran sərhəddin istiqamətinin dəyişməsi bu əvəz olunmanın kristalın elastiki xassələrinin təsiri ilə əlaqədardır. Bu məsələni aydınlaşdırmaq əlavə tədqiqatlar tələb edir. Tədqiq olunan nümunədə digər böyümə morfoloqiyasına da rast gəlinir.

Şəkil 4-də tədqiq olunan nümunədə II \rightarrow III çevrilmənin morfoloqiyasını əks etdirən mikrofotografiyalar verilmişdir. Şəkil 4, b-dən göründüyü kimi III modifikasiya kristalının rüşeyimi (şəkildə oxla göstərilmişdir) sərbəst surətdə yaranır və qeyri-düzxətli şəkildə böyüyür.



Şəkil 4. $K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ kristalında II \rightarrow III çevrilməni əks etdirən mikrofotografiyalar. Böyütmə 90 dəfə.



Şəkil 5. $K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ kristalında III \rightarrow II çevrilməni əks etdirən mikrofotografiyalar. Böyütmə 90 dəfə.

Məsələ burasındadır ki, əks proses də həmin qaydada baş verir. Daha doğrusu III \rightarrow II çevrilmə zamanı qarşılıqlı çevrilən III və II modifikasiyalı ayıran sərhəd düz xətlə deyil, ixtiyari formada hərəkət edir (bax. Şəkil 5, a, b, c, d, e, f)

Şəkil 4, a ilə şəkil 5, a-nın müqayisəsindən görünür ki, II \rightarrow III çevrilmə nəticəsində ana kristalda olan

defektlər aradan çıxıb və ana kristal mükəmməlləşmişdir.

Şəkil 4, a ilə şəkil 5, f-in müqayisəsindən görünür ki, tam III \rightarrow II çevrilməsindən sonra ana kristalın mikroskop altında görünən defektləri tam olmasa da, qismən bərpa olunmuşdur.

[8]-ə görə polimorf çevrilmələrin monokristal \rightarrow monokristal tipli olmasını aşkar edən ilk əlamət

qarşılıqlı çevrilən modifikasiyalari ayıran sərhəddin düzxətli olmasıdır. Lakin bizim təcrübələr göstərdi ki, bu sərhəd düzxətli olmasa da belə proses monokristal→monokristal tiplidir.

Bunu şəkil 2-də verdiyimiz laueqramlar təsdiq edir.

Digər tərəfdən həmin sərhəddin ixtiyari istiqamətlərdə hərəkəti ana kristalın yeni kristalın böyüməsinə təsir göstərməsinə dəlalət edir. Daha doğrusu bu göstərir ki, II↔III çevrilmələri zamanı II və III modifikasiya kristalları arasında kristalloqrafik istiqamət saxlanılmır. Lakin rentgenoqrafik tədqiqatlar göstərir ki, tədqiq olunan kristalda II↔III çevrilmələri zamanı II və III

modifikasiya kristalları arasında kristalloqrafik istiqamət əlaqələri saxlanılmır.

NƏTİCƏ

Beləliklə, KNO₃-də K⁺ ionlarının Cs⁺ ionları ilə qismən əvəz olunması çevrilmə temperaturunu ~50K artırır, II↔III çevrilmənin morfolojiyası KNO₃-dən fərqlənsə də, proses monokristal→monokristal tiplidir və bu çevrilmələr zamanı II və III modifikasiyalar arasında kristalloqrafik istiqamət əlaqələri saxlanılır.

-
- [1] *E.I. Бурмакин.* Твердые электролиты с проводимостью по катионам щелочных металлов. М.: Наука. 1992. с. 264.
- [2] *D.A. Edward.* A determination of the complete crystal structure of potassium nitrate, *Z. Krist.*, 80. 1943, p. 154-158.
- [3] *P.E. Tahvonen.* X-ray investigation of molecular rotation in potassium nitrate crystal, *Ann. Acad. Sci. Fennical*, ser. A, 44. 1947, p. 20-25.
- [4] *P.W. Bridgman.* The velocity of polymorphic change between solid, *Proc. Am. Acad. Arts. Sci.*, 52. 1916, p. 57-88.
- [5] *C. Finback, O. Hasse.* The rotation of anion polyhedra in cubic structures III nitrates. *Zs. Phys. Chem.*, B35. 1937, p. 25.
- [6] *U. Korhonen.* The Crystal Structure of CsNO₃, *Ann. Acad. Sci. Fennical.*, Ser.A, 1. 1953, p. 1-16.
- [7] *В.И. Насиров.* Полиморфизм в оптически прозрачных кристаллах. Баку, 1997, с.166.
- [8] *А.И. Кутайгородский, Ю.В. Мнюх, Ю.Г. Асадов.* Полиморфный переход монокристалл→монокристалл в парадихлорбензоле. Докл. АН СССР, 1963, т.48, №5, с.1065-1068.

R.B. Bayramli, V.I. Nasirov, E.V. Nasirov

MORPHOLOGY OF GROWTH OF CRYSTALS III AND II MODIFICATIONS AT TRANSFORMATIONS II↔III IN THE MONOCRYSTAL K_{0.94}CS_{0.06}NO₃

Monocrystals of K_{0.94}CS_{0.06}NO₃ were grown by an isothermal crystallization method, from an aqueous solution, and the growth morphology of crystals of III and II modifications during transformations II ↔ III was studied. It is established that the structural transformations in the crystal under investigation are enantiotropic and the equilibrium temperature between modifications II and III is T₀=457±1K.

Р.Б. Байрамлы, В.И. Насиров, Э.В. Насиров

МОРФОЛОГИЯ РОСТА КРИСТАЛЛОВ III И II МОДИФИКАЦИЙ ПРИ ПРЕВРАЩЕНИЯХ II↔III В МОНОКРИСТАЛЛЕ K_{0.94}CS_{0.06}NO₃

Методом изотермической кристаллизации из водного раствора выращены монокристаллы K_{0.94}CS_{0.06}NO₃, изучена морфология роста кристаллов III и II-модификаций при превращениях II↔III. Установлено, что структурные превращения в исследуемом кристалле энантиотропные, и температура равновесия между модификациями II и III равна T₀=457±1 K.

AĞIR İONLAR DƏSTƏSİNİN FOKUSLANDIRILMASI ZAMANI PLAZMA LİNZASINDA FƏZA YÜKÜNÜN FORMALAŞMASI

F.V. HƏSƏNLİ

Mingəçevir Dövlət Universiteti

farida.hasanli@mdu.edu.az

Məqalədə yüksək optik gücə malik plazma lensinin sferik aberasiyası nəzərdən keçirilib. Aberasiyanın əmələ gəlməsinin səbəbləri və aradan qaldırılması yolları müzakirə olunub. Ölçmələr yeni eksperimental vakuum qurğusunda aparılıb. Optimallaşdırılmış plazma lensi ion-optik tədqiqatlarda və plazma-şüa texnologiyasında istifadə oluna bilər.

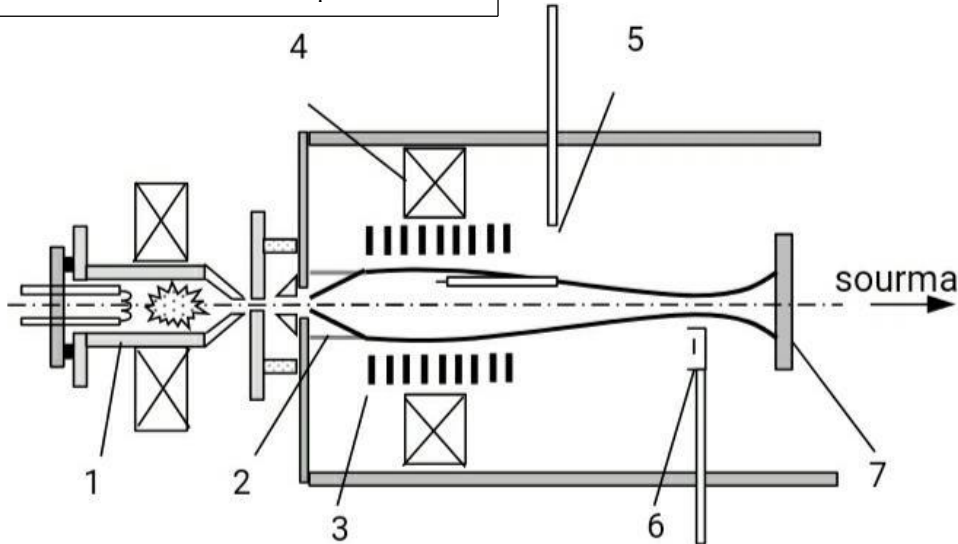
Açar sözlər: ion şüası, plazma optikası, ion-plazma texnologiyası.

İon dəstələrinin cərəyan sıxlığı kifayət qədər yüksək olmalıdır və bu isə ion dəstələrinin fokuslaşdırılması üçün effektiv ion optik sisteminin yaradılmasına zəruriyyət yaradır.[1,3]

Plazma linzaları digər linzalara nisbətən daha yüksək optik qüvvəyə malikdir. Plazma linzalarının alınması üçün elektrostatik linzaları maqnit linzası ilə birləşdirmək lazımdır. Bu zaman maqnit qüvvə xəttlərinin təsiri ilə elektrik sahəsi bütün ion dəstəsi boyunca paylanır. Klassik elektrostatik linzalar (immersion və təklənmiş) toplayıcı və səpici hissələrdən ibarətdir (Siladyi). İon toplayıcı linzalarda ion dəstəsi uzun müddət elektrik sahəsində yerləşir. Hissələrin optik qüvvələri müxtəlif işarəli olduğuna görə (toplayıcı və səpici) linzaların ümumi optik qüvvəsi böyük olmur [10].

İon dəstəsinin yaratdığı fəza yükü potensialın vakuum paylanmasına güclü təsir edir. Beləliklə, elektrik sahəsinin dəstənin mərkəz hissəsinə təsiri az olduğuna görə intensiv ion dəstələrinin elektrostatik linzalar vasitəsilə lazımı dərəcədə fokuslandırılmaq olmur.

Deyiləndən belə nəticəyə gəlmək olar ki, böyük optik qüvvəyə nail olmaq üçün linza toplayıcı olmalıdır. Bunun üçün əks işarəli fəza yükündən istifadə etmək olar.[6,7,9s] Yəni, müsbət ionlar dəstəsinin fokuslandırılması üçün linzanın daxilində elektronlar vasitəsilə fəza yükü yaradılmalıdır. Həcmində fəza yükü olan linzanın sxemi holoqrafiyanın müəllifi Denis Qabor tərəfindən verilmişdir (şək.1). Linza daxilində bircins olmayan maqnit sahəsi yaratmaqla linza daxilindən keçən silindrik formalı ion dəstələrinə təsir göstərmək olar. Maqnit sahəsində bir-birinin ardınca bir neçə silindrik formalı elektrodlar simmetrik yerləşdirilir və bu elektrodlara potensiallar verilir.[2,4] Mərkəzi elektroda ən yüksək potensial verilir, digər elektrodlara isə azalan gərginliklər verilir və nəhayət kənardakı son elektrodların potensialı sıfır olur. Beləliklə, linza nəticə etibarilə elektronlar üçün elektromaqnit tələsi rolunu oynayır.



Şəkil 1. Eksperimental qurğunun sxemi: 1-ion mənbəyi-duoplazmatron; 2-kompensator; 3-elektrodlar; 4-sabit maqnit; 5- elektrostatik zond; 6-diafraqma; 7-kollektor.

Plazmada nisbətən yüngül komponent olan elektronlar plazma dinamikasının əsas parametrlərinin formalaşmasını təmin edir. Buna görə plazmada elektron

komponentin hərəkətinin araşdırılması üçün hidrodinamik yaxınlaşmadan istifadə olunmuşdur.

$$m \frac{d\vec{v}_e}{dt} = -e \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}_e, \vec{B}] \right) + \vec{F}_{ee} + \vec{F}_{ei}, \quad (1)$$

(1) tənliyində,

$$F = -\frac{e}{c} [v_e, B] \quad (2)$$

həddi aşağı temperaturlu plazmada axan cərəyanın kiçik qiymətlərində elektronları maqnit sahəsində saxlayan qüvvədir.

Burada v_e - elektronun sürəti, E – elektrik sahəsinin intensivliyi, B - maqnit sahəsinin induksiya, F_{ee} və F_{ei} – hissəciklərin toqquşması nəticəsində yaranan qüvvələdir. Burada hesab olunur ki, hissəciklərin sürətlərinin paylanması klassik Maksvell paylanmasına yaxındır.

$$\vec{F}_{ee} = -\frac{\Delta P_e}{n}, \quad \vec{F}_{ei} = \frac{m(\vec{v}_e - \vec{v}_i)}{\tau_{ei}} = -\frac{ej}{\sigma}, \quad (3)$$

Burada P_e – elektron qazının təzyiqi, $\sigma = ne^2\tau_e/m$ – plazmanın keçiriciliyi, j - cərəyan sıxlığıdır. (1) tənliyini nəzərə alsaq, elektronun hərəkət tənliyi aşağıdakı kimi olar

$$\vec{E} - \frac{j}{\sigma} - \frac{m}{e} \frac{d\vec{v}_e}{dt} - \frac{1}{en} \nabla P_e - \frac{1}{c} [\vec{v}_e, \vec{B}] \quad (4)$$

(4) tənliyindən alınır ki, müəyyən şərtlər daxilində plazma optikasının əsas prinsipi-maqnit sahəsinin qüvvə xətləri ekvipotensiallığı təmin olunmalıdır. [5, 8] Başqa sözlə, elektronlar maqnit sahəsi boyunca yüksək yürüklüyə malik olduğundan, maqnit sahəsi istiqamətində potensiallar fərqi yarada bilməzlər. Maqnit sahəsinin eninə istiqamətində isə elektronların hərəkəti məhdud olduğundan, onlar elektromaqnit sahəsində qapalı dreyf hərəkəti edirlər [1].

Beləliklə maqnit sahəsi intensivliyinin qiyməti elə seçilməlidir ki, linzanın en ölçüsü elektronların Larmor radiusundan xeyli böyük, ionların Larmor radiusundan isə xeyli kiçik olsun:

$$L_e \ll L \ll L_i$$

Yəni, maqnit sahəsi ionlara əhəmiyyətli dərəcədə təsir etmir. (2) ifadəsindən görünür ki, plazmadan keçən kiçik cərəyan hallarında E və B vektorları qarşılıqlı perpendikulyar olduğundan maqnit qüvvə xəttləri ekvipotensial xəttlərdir.

$$\varphi = \varphi(\Psi)$$

Ψ – maqnit selini xarakterizə edən funksiyadır.

Yəni maqnit ekvipotensial səthləri boyunca elektronlar maneəsiz hərəkət edir, ona perpendikulyar

$$\mathbf{n} = n_1(\psi) \exp\left(\frac{e\phi}{kT_e}\right), \quad n_1(\psi) = n_0 \exp\left(-\frac{e\phi^*}{kT_e}\right). \quad (7)$$

Plazma həcmində fəza potensialının ölçülməsi xüsusi emissiya verən elektrodlar vasitəsilə həyata keçirilir. Plazma həcmində gedən proseslər anomal yüksək və yaxud turbulent keçiriciliyə gətirib çıxarmadıqda bu üsuldən istifadə etmək olar. Bu halda elektrodun yaxınlığında potensialın sıçrayışı kT_e/e tərtibində olacaq. Buna görə, plazma həcmindəki potensiallar fərqi kT_e/e -dən çox böyük olarsa, onların xüsusi elektrodlar vasitəsilə fiksə edilməsi daha əlverişli olur.

Elmi ədəbiyyatda Qabor linzasına “plazma linzası” da deyilir. Linzanın mühiti kvazineytral mühitə yaxın olduğu üçün intensiv ion dəstələri üçün belə termin

istiqamətdə isə kəsişən $E \perp B$ sahələrində

$$v_e \approx c \frac{E}{B}$$

sürəti ilə dreyf hərəkəti edirlər.

Baxdığımız hallarda elektronların temperaturu nəzərə alınmırdı, yəni $T_e=0$. Elektronların real temperaturunu nəzərə almaq üçün (1) tənliyini maqnit sahəsi istiqamətində proyeksiyalayaq və $P_e = nkT_e$ elektron təzyiqini nəzərə alaq:

$$\frac{kT_e}{en} \frac{dn}{dt} - e \frac{\partial \phi}{\partial \ell} = 0. \quad (5)$$

(5) ifadəsini maqnit sahəsinin ℓ qüvvə xətləri boyunca inteqrallasaq saxlanma qanunu tapırıq:

$$\phi - \frac{kT_e}{e} \ell n \frac{n}{n_0} = \phi^*(\psi), \quad (6)$$

Burada n_0 – ixtiyari sabit, ψ - maqnit selidir, $\phi^*(\psi)$ – maqnit qüvvə xətti boyunca sabit olan temperatura uyğun potensialdır.

Görünür ki, (6) tənliyi qüvvə xətləri boyunca Bolsman paylanmasını xarakterizə edir

qəbul olunandır. (1) tənliyindən başqa Puasson tənliyini də nəzərə alsaq, onda plazma linzasına “fəza yüklü linza” da demək olar. Belə linzanın fokus məsafəsi aşağıdakı düsturla ifadə olunur:

$$F = \frac{R U_s}{2 U_l} = \frac{R e U_s}{2 e U_l} = \frac{R W}{2 e U} \quad (8)$$

Burada R - linzanın radiusu, W - ion dəstəsinin enerjisi, e - elektronun yükü, U_s və U_l uyğun olaraq ionları sürətləndirən və linzaya verilən gərginlikdir. Gö-

ründüyü kimi, belə linzanın fokus məsafəsi xüsusi yük-dən asılı deyil, bu isə bütün elektrostatik linzalara aiddir.

Bildiyimiz kimi, plazma linzasında maqnit qüvvə xətləri ekvipotensialdır. Bunun üçün radiusu R olan və ondan I cərəyanı axan maqnit linzasının optik qüvvəsi ilə, U potensialı, lakin cərəyansız halqadan ibarət olan elektrostatik linzanın optik qüvvəsini müqayisə edək. Maqnit linzasının optik qüvvəsi belə təyin olunur

$$\frac{1}{F_B} = \frac{3\pi^2}{16} \frac{e^2}{Mc^2} \frac{I^2}{\epsilon c^2 R'} \quad (9)$$

Burada $\epsilon = Mv^2/2$ -ionların kinetik enerjisidir.

Həmin halqaya U potensialı verilsə, o, elektrostatik linzaya çevrilər və bu elektrostatik linzanın optik qüvvəsi aşağıdakı düsturla təyin olunur.

$$\frac{1}{F_E} = \frac{3e^2}{16\epsilon^2} \frac{\pi U^2}{8R}. \quad (10)$$

Göründüyü kimi, bu linzanın optik qüvvəsi potensialın kvadratından asılı olduğu üçün o, toplayıcı olmamışdır.

Elektrik və maqnit sahələrinin birgə təsiri altında maqnit qüvvə xətlərinin ekvipotensiallığı nəzərə alındıqda aşağı sürətli elektronlar mənbəyi elektrodlarda potensialın qararlaşmış paylanması təmin edir. Əgər kompensator linzanın içərisinə doğru hərəkət edərsə, ion dəstəsi elektrodla çatmaz və elektrodlarda potensial yaranmaz. Öz-özünə qararlaşmış rejimdə fokuslanmanın keyfiyyəti və fokus nöqtəsində ion dəstəsinin sıxlığı adi rejimə nisbətən daha böyük olur. Alınmış plazma linzasının fokus məsafəsi müsbət və ya mənfii olduğundan, linza həm toplayıcı, həm də səpici ola bilər və onun optik qüvvəsi vakuum linzasının optik qüvvəsindən müqayisə olunmayacaq dərəcədə böyük olur:

$$\frac{1}{F_{nl}} = \frac{2eU}{\epsilon R} \theta, \quad \theta \approx 1. \quad (11)$$

Bu düsturlara əsasən enerjiləri 10 keV olan arqon ionlarının eyni şəraitdə fokuslaşması zamanı hər üç linzanın fokus məsafəsini hesablasaq,

$$F_B \sim 10^4 \text{ sm}, F_E \sim 10^3 \text{ sm}, F_{pl} \sim 20 \text{ sm}$$

olar.

Yuxarıdakı düsturların əsasında hesablamalar göstərir ki, eyni fiziki şərtlər daxilində plazma linzasının

optik qüvvəsi elektrostatik linzasının optik qüvvəsindən 2 tərtib və maqnit linzasının optik qüvvəsindən 4 tərtib yüksəkdir.

Plazma linzasının daxilində elektrik sahəsi bütün oblastda fokuslayıcı olduğundan, onun optik qüvvəsi böyükdür. Müxtəlif müəlliflər tərəfindən aparılmış çoxsaylı təcrübələr (11) düsturunun doğruluğunu təsdiq edir.

İkinci ion-elektron emissiyası hadisəsi nəticəsində linzada elektronlar toplanır. Linzanın girişində yerləşdirilmiş və potensialı sıfır olan metal kompensator vasitəsilə elektronların toplanması idarə olunur. Dəstədən səpələnən ionlar kompensatorun daxili divarlarından zərbə nəticəsində elektronları çıxarır və bu elektronlar linzanın elektromaqnit tələsinə düşürlər. Bu zaman qaz ionları kompensatorun divarı ilə toqquşma nəticəsində divardan elektron alır və neytrallaşır. Qeyd etmək lazımdır ki, belə generasiya üsulu metal və yarımkeçirici mənbələrindən alınan ionlar dəstəsi üçün yarırsızdır, ona görə ki, bu ionlar kompensatorun divarlarına çökür və onun quruluşunu dəyişir. Beləliklə, metal və yarımkeçirici mənbələrdən alınan ion dəstəsinin fokuslandırılması üçün lazım olan fəza yüklərinin toplanması termoelektron emissiyasının vasitəsilə həyata keçirilir.

NƏTİCƏ

Plazma linzalarında baş verən proseslərin tədqiqi və onların fokuslanmış ion dəstəsinin dinamikasına təsirinin təcrübi olaraq öyrənilməsi, habelə impuls və stasionar rejimlərdə enerjisi 35 keV, cərəyan şiddəti isə 50 mA olan helium və azot qazı dəstələrinin qısa və uzun linzaların köməyi ilə fokuslanması və məsafəyə transfer edilməsi zamanı ortaya çıxan müxtəlif proseslərin həmin linzaların effektiv işləməsinə təsirinin öyrənilməsidir.

Plazma linzalarının statik, dinamik və rəqsi xarakteristikalarının kompleks öyrənilməsinin nəticələrini aşağıdakı kimi ümumiləşdirmək olar:

1. Linzanın izolyasiya olunmuş elektrodlarının üzərinə ion dəstəsindən kənarında olan hissəsinin düşməsi nəticəsində elektrodlar müsbət potensialla yüklənir və radial elektrik sahəsi yaranır. Bu hadisəyə özü qararlaşmış rejim deyilir. Bu zaman fokuslanma üçün lazım olan cərəyan sıxlığı artır və ion dəstəsi sürətlənir.

2. Sistemdə elektronlar soyuq kompensatorun divarlarından ion-elektron emissiyası nəticəsində qoparaq potensialın vakuum paylanması ilə dəyişir ki, maqnit sahəsinin qüvvə xətləri ekvipotensial olsunlar.

[1] *A.I. Морозов.* Введение в плазмодинамику. Москва, ФИЗМАТЛИТ, 2006, 576 с.
 [2] *И.С. Гасанов, И.М. Проценко.* Динамика формирования импульсного ионного пучка плазменной линзой. ЖТФ, т. 52, № 9, с 1783-1786, 1982.
 [3] *I.S. Hasanov, V.A. Orudjev, I.I. Gurbanov, E.M. Akbarov.* Space Charge Lenses for Intensive Ion Beams Formation. ACTA Physica Polonica A, vol. 135, No 4, p. 841-844, 2019.

[4] *И.С. Гасанов, А.А. Гончаров, И.М. Проценко.* Плазмооптические системы формирования и фокусировки ионных пучков. Препринт ИФ УН УССР, Киев, 1990, 39 с.
 [5] *A.A. Goncharov.* The electrostatic plasma lens. Review of Scientific Instruments 84, 021101 2013.
 [6] *И.С. Гасанов, М.Д. Габович, И.М. Проценко.* Извлечение ионов из дуоплазматрона через

- канал с радиусом порядка дебаевской длины. Письма в ЖТФ, 1980, т. 6, в. 24
- [7] *И.С. Гасанов, М.Д. Габович, И.М. Проценко.* Плазменные линзы для формирования ионных пучков. Препринт № 8ИФ АН УССР, 1982
- [8] *И.С. Гасанов, И.М. Проценко.* Колебания в плазменной линзе и их влияние на фокусированный ионный пучок. Письма в ЖТФ, 1983, т.9, в.20.
- [9] *И.С. Гасанов, М.Д. Габович, И.М. Проценко.* Об условиях существования больших электрических полей в плазменной линзе, Физика плазмы, т. 9, в. 6, 1983.
- [10] *И.С. Гасанов, И.М. Проценко.* Неустойчивости в плазменной линзе. Препринт №11ИФ АН УССР,1984.

XARİCİ ELEKTROMAQNİT SAHƏLƏRİNDƏ METALLARIN VƏ YARIMKEÇİRİCİLƏRİN SƏTHİNDƏ pH-HƏSSAS POLİELEKTROLİT TƏBƏQƏLƏRİNİN FİZİKİ-KİMYƏVİ XASSƏLƏRİNİN TƏDQIQI

TƏRANƏ FİRQƏT qızı YUSİBOVA,
RAYİHƏ ŞƏMSƏDDİN qızı AĞAYEVA,
AYGÜN AYDIN qızı ORUCOVA

Mingəçevir Dövlət Universiteti
AZ4500, Mingəçevir, Dilarə Əliyeva küç. 21
tarana.yusibova@mail.ru

Xarici elektromaqnit sahələrinin köməyi ilə nanosistemlərin idarə edilməsi onların xassələrinin uzaqdan dəyişdirilməsi imkanlarına görə maraq doğurur. Sulu məhlullarda yerli şüalanma zamanı yarımkeçiricilərin səthində pH qradientinin yaranmasının bu yaxınlarda göstərilən təsiri yarımkeçirici substratlardan və pH-həssas təbəqələrdən (məsələn, polielektrolitlərdən) ibarət olan işığa həssas strukturlarda yarımkeçirici/məhlul interfeysində pH-nın dəyişməsi işıqla aktivləşdirilir ki, bu da yarımkeçirici səthdə pH-həssas təbəqələri müxtəlif vəziyyətlərə keçirməyə imkan verir [1].

Açar sözlər: fotoelektrodların elektro və fotoelektrokimyəvi aktivlik, pH-həssas təbəqələr, yarımkeçiricilərin fotokorroziya, nanoaktuator.

İşığın bir stimulyator kimi istifadəsi materialın yüksək reaksiya sürətini təmin edir, məruz qalma parametrləri geniş diapazonda dəyişdirilə bilər (məsələn, radiasiyanın intensivliyi və dalğa uzunluğu) və işığın yaratdığı pH gradientlərinin istifadəsi bunu mümkün edir. İşığa həssas materialların sinfini genişləndirmək üçün onların funksional reaksiyasına səbəb olan uzaqdan təsir edə bilər. Bundan əlavə, sulu məhlullarda elektrodların qütbləşməsi nəticəsində yaranan elektrokimyəvi proton qradienti də maraq doğurur, bu halda cərəyanın böyüklüyünü tənzimləməklə yaranan qradientin böyüklüyünə nəzarət etmək olar. Elektrodların səthində pH-həssas təbəqələrin keçidinin öyrənilməsi həm özlüyündə, həm də şüalanma zamanı yarımkeçirici substratlarda baş verən proseslərin modeli kimi maraq doğurur. pH-ə həssas bir komponent olaraq, polielektrolitlər istifadə edilə bilər - protonlaşdırıla / deprotonlaşdırıla bilən yüklü qrupları daşıyan polimer molekulları. Çox sayda biomolekul da pH-həssas (lipidlər, peptidlər) kimi təsnif edilə bilər.

Xarici elektromaqnit sahələrinə məruz qaldıqda baş verən pH qradientlərində polielektrolit təbəqələrində proseslərin qanunauyğunluqlarını müəyyən etmək imkan verir. pH-həssas təbəqələrin morfolojiyasına və xassələrinə nəzarət etmək üçün işlənmiş yanasmalar artıq toxuma mühəndisliyində və adaptiv örtüklərin yaradılmasında, həmçinin materialların korroziya və fotokorroziyadan qorunmasında istifadə olunur.

Bu məqsədə çatmaq üçün aşağıdakı vəzifələri həll etmək olar:

1) Ultrabənövşəyi (TiO_2) və görünən (GaP) işığa həssas metal elektrodların və yarımkeçirici fotoelektrodların səthində poliyon birləşmələrin onların elektrokimyəvi və fotoelektrokimyəvi aktivliyinə və səthdə gedən proseslərin termodinamik xüsusiyyətlərinə təsirini öyrənmək.

2) Müxtəlif həndəsəli elektrik sahələrində elektrokimyəvi yolla və müxtəlif dalğa uzunluqlu şüalanmanın təsiri altında fotoelektrokimyəvi yolla yaradılmış proton qradientlərinin yayılmasına nəzarət etmək

yollarını müəyyən etmək, xarici sahələrin təsiri altında interfeyslərdə məhlullarda proton qradientlərinin qanunauyğunluqlarının əmələ gəlməsi imkanlarını araşdırmaq.

3) Protonasiya zamanı interfeyslərdə polielektrolitlərin və zwitterion lipidlərinin pH-həssas təbəqələrinin fiziki-kimyəvi xassələrində baş verən dəyişiklikləri xarakterizə etmək.

Yarımkeçiricilərin fotokorroziyadan qorunması vasitəsi kimi pH-bufer xüsusiyyətlərinə malik polielektrolitlərin birləşmələrinin effektivliyi göstərilir.

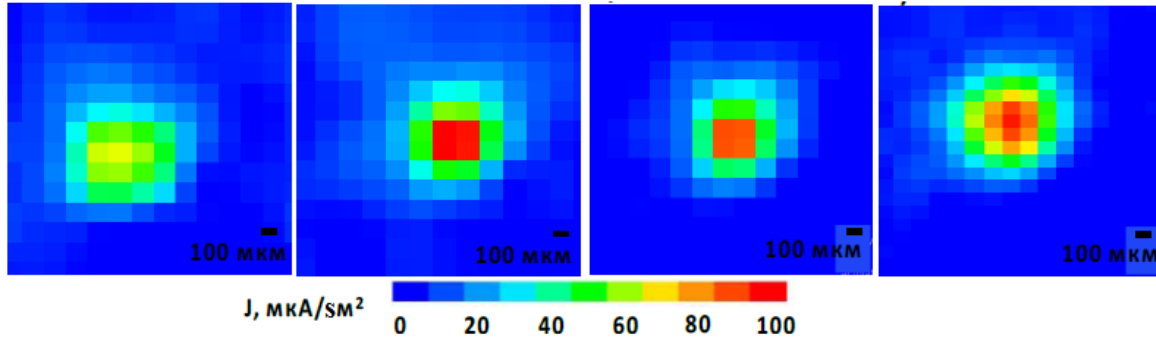
Yarımkeçirici materialların şüalanması nəticəsində yaranan proton qradientlərinə həssas adaptiv biointerfeyslərin yaradılması üsulları təklif edilmişdir. pH-həssas polielektrolit təbəqələrinin səthində böyüyən bakterial bioplyonkaların protonlaşma dərəcəsinə dəyişdirməklə onların böyüməsinə nəzarət etmək imkanları da sistemli şəkildə tədqiq edilmişdir. Nəticələri proqramlaşdırıla bilən işığa həssaslıq yaratmaq üçün qabaqcıl texnologiyalar və innovativ üsullar üçün platforma hazırlamaq üçün istifadə edilə bilər: 5 nanoaktuator, qiymətli fotovoltayk və günəş enerjisi materialları üçün korroziyaya qarşı örtüklər, biofilmin böyüməsinin proqramlaşdırılması.

Poliion birləşmələri xarici elektromaqnit sahələrinin təsiri altında elektrodların və fotoelektrodların səthində gedən proseslərin xüsusiyyətlərinə təsir göstərə bilər və arxitekturdan asılı olaraq elektrod və fotoelektrod aktivliyini həm zəiflədə, həm də gücləndirə bilər. Sulu məhlullarda xarici elektromaqnit sahəsinə (şüalanma) məruz qaldıqda meydana gələn pH qradientlərindən istifadə edərək fotoaktiv TiO_2 substratında lipid membranı və polielektrolit təbəqələri arasında elektrostatik qarşılıqlı təsirin gücünün tənzimlənməsi adsorbsiya proseslərinə nəzarət etməyə imkan verir. Fotoelektrod və məhlul arasındakı interfeysi təmin edir və lipid təbəqəsini substratdan geri desorbsiya edir və sorbsiya zamanı məhluldakı maddələri lipid təbəqəsi altında əhatə edir. Kompozisiyanın pH-bufer xassələri olan polielektrolitlərdən yığılması GaP fotokorroziyasına

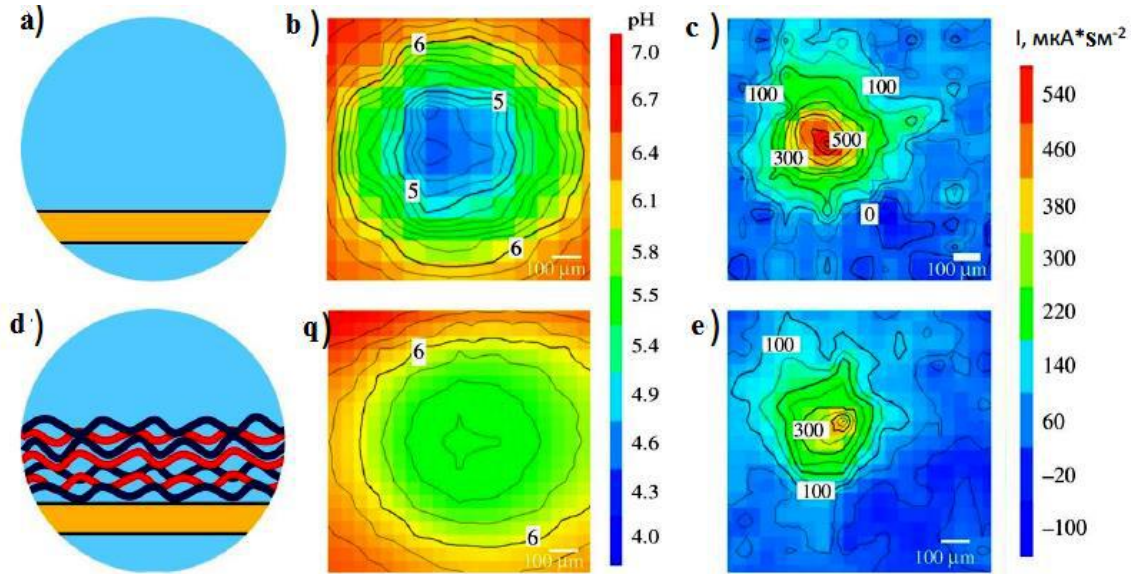
manəə törədir və sabit yüksək fotocərəyan sıxlığını saxlamaqla, materialın həll olunmasının və təbəqələrinin təbii örtülməmiş fotoelektrod dörd saat ərzində işıqlandırıldıqda cərəyan sıxlığının beş dəfə azalmasının qarşısını alır. Elektrik və fotoelektrokimyəvi prosesləri, ionların spesifik fəza paylanmasını Şennonun entropiyası nöqtəyi-nəzərindən xarakterizə etmək olar. Foto cərəyanın fotoelektrokimyəvi keçidinin təsiri dəyişdirilməmiş anodlaşdırılmış nanostrukturulu TiO₂-də titan substratda həyata keçirilə bilər və "və ya" və "eksklüziv və ya" məntiqinə uyğun olaraq məntiqi hesablamaların aparılmasında istifadə edilə bilər. pH-a həssas təbəqələrin yükü onların səthində biofilmlərinin böyüməsinin əsas determinantıdır. Polielektrolit örtüyünün növündən və onun protonasiya dərəcəsindən asılı olaraq, biofilminin artımı və biokütlə istehsalı müxtəlif dərəcələrdə manəə törədilir ki, bu da biofilmin fenotipinə nəzarət etməyə imkan verir. Bütün nümunələrin skan edən titrəmə elektrodu və skan edən ion seçici elektrod

üsulları ilə öyrənilməsindən, bütün elektrokimyəvi üsullarla xarakterizə edilməsindən ibarətdir [4].

İstifadə olunan materiallar, maddələr, avadanlıq və tədqiqat üsulları təsvir olunur. Biz "qızıl-su məhlulu", "platin-su məhlulu", "TiO₂-su məhlulu" və "GaP-su məhlulu" interfeyslərində elektro- və fotoelektrokimyəvi prosesləri tədqiq edilir. Elektrodların və fotoelektrodların səthləri təbii və sintetik polielektrolitlər və lipidlər təbəqələri ilə örtülmüşdür. İnterfeyslərin xassələri skan edən elektron mikroskopiyaya (SEM) və atom qüvvəsi üsulları ilə öyrənilmişdir. Mikroskopiyaya, pyezokristal mikrobənzər, damcı formalı analizatorlardan istifadə etməklə. Tədqiq olunan prosesləri təsvir etmək üçün klassik elektrokimyəvi üsullar toplusundan istifadə edilmişdir. Yerli elektrokimyəvi ölçmələr üçün biz mikroelektrod aşkarlama üsullarından istifadə etdik - skan edən vibrasiya elektrodu və skan edən ion seçici elektrod.



Şəkil 1. Müsbət qütbləşmiş (+90 nA) səthindən yuxarı olan 0,5 M NaCl məhlulunda ion cərəyanları a) Pt elektrod, b) Polietilenimin polikatasiyası (PE) təbəqəsi ilə örtülmüş Pt-elektrod, c) İki qat polielektrolitlə örtülmüş Pt-elektrod - polikation PE və polianion PS, d) Üç qat polielektrolit ilə örtülmüş Pt-elektrod - PE/PS/PE [2].



Şəkil 2. Elektrod səthinin sxematik təsviri, 150 mM hidrokinnonun 60 mM məhluluna batırılmış elektrodun 15 dəqiqə ərzində 5 μ A cərəyan keçirdikdən sonra ölçülən pH xəritəsi [3].

Təcrübələr üçün vibrasiya zond kimi təcrid olunmuş Pt-Ir mikrozondu istifadə edilmişdir. Cihaz bir-birindən Δr məsafədə yerləşən iki nöqtə arasında ΔV potensial fərqi ölçdü - zond vibrasiyasının həddindən

artıq nöqtələri. Məlumatlar məhlulun keçiriciliyini ion cərəyanlarının dəyərlərinə nəzərə alaraq yenidən hesablanmışdır. Ölçmələri maye proton-selektiv membranla doldurulmuş diametri 2 μ m olan şüşə kapilyar

mikroelektrodlardan istifadə etməklə aparılmışdır. “Polielektrolit təbəqələrinin foto və elektrokimyəvi aktivliyə təsiri” adlı üçüncü fəsildə qütbləşmə zamanı qızıl və platin mikroelektrodlarında və şüalanma zamanı TiO₂ fotoelektrodlarında baş verən proseslər, polielektrolit təbəqələrinin səthdə elektro- və fotoelektrokimyəvi təsirlərə təsiri nəzərdən keçirilir. fəaliyyəti öyrənilir. Maqnezium nümunələrini korroziyadan və GaP-ni fotokorroziyadan qorumaq üçün poliion birləşmələrin imkanları tədqiq edilmişdir [2]. Nümunələrin səth morfologiyası polielektrolit örtüklərinin çökdürülməsindən əvvəl və sonra tədqiq edilmişdir. Göstərildi ki, platin elektrodunun (PE)-dan istifadə edərək ölçülən anodik aktivliyi, polietilenimin platin elektrodu (PE) və polistirol sulfonatın (PS) polielektrolit örtüyünə malik elektrod üçün belə örtüksüz platin elektrodun daha yüksəkdir. Polielektrolit örtüyü olmayan platin elektrod müsbət polarizasiyada (90nA) təxminən 70 μA/sm² anod aktivliyi göstərdi ki, bu da PE polikatasiya qatının çökməsindən sonra 90-100 μA/sm²-ə qədər artdı. PS polianion təbəqəsinin təbii elektrokimyəvi aktivliyi bir qədər azaldı (şəkil 1). Oxşar katod aktivliyi üçün də vəziyyət müşahidə edilmişdir [3].

Bununla belə, daha çox sayda polielektrolit təbəqəsi tətbiq edilərkən (poliionik kompozisiya qızıl elektrodun anodik aktivliyi və onun üzərində hidroxinonun oksidləşməsi zamanı baş verən pH qradienti daha az nəzərə çarpır (şəkil 2). Çox güman ki, belə bir qalınlığın poliion montajı rezistiv xüsusiyyətlər nümayiş etdirməyə başlayır və ötürülməyə mane olur. Polielektrolit örtüklərinin korroziyaya qarşı xüsusiyyətləri də öyrənilmişdir. Təbii polielektrolitlərin, xüsusən də hörümçək toru ipəyin metalları korroziyadan qorumaq üçün effektivliyi göstərilmişdir: ipəklə örtülmüş maqnezium substratları təmizlənməmiş nümunələrlə müqayisədə üç dəfə yüksək korroziyaya davamlılıq nümayiş etdirir. Əlavə ipək çöktürmə korroziyaya davamlılığı 18 dəfə yaxşılaşdırır. Beləliklə, protonasiya belə təbəqələrdə molekul daxili və molekullararası qarşılıqlı təsirlərin təbiətini dəyişdirir, onların morfologiyasının dəyişməsinə səbəb ola bilər: qalınlıq, kobudluq, məsaməlilik, həmçinin yük və islanma qabiliyyəti. Bu işin məqsədi xarici təsirlərin təsiri altında məhlullarda baş verən proton qradientlərində elektrodun və fotoelektrodların səthində pH-həssas təbəqələrdə baş verən prosesləri öyrənməkdir [1].

- [1] N.V. Ryzhkov, D.V. Andreeva, E.V. Skorb. Coupling pH-regulated multilayers with inorganic surfaces for bionic devices and infochemistry, Langmuir. 2019, t. 35, N. 26, c. 8543-8556.
- [2] N.V. Ryzhkov, N. Brezhneva, E.V. Skorb. Feedback mechanisms at inorganic-polyelectrolyte interfaces for applied materials. Surface Innovations. 2019, t. 7, N. 3–4, c. 145-167.
- [3] A. Nikitina, Y. Lanchuk, O. Luneva, N. Ryzhkov, S.A. Ulasevich, E.V. Skorb. Evolution of light-induced processes at heterostructured interfaces.

- Book of abstracts of the 2nd international conference PSNSPA 2018 – Photonic Colloidal Nanostructures: Synthesis, Properties, and Application. Санкт-Петербург. 4-8 июня 2018, т. 36.
- [4] Н.В. Рыжков, Е.В. Скорб. Светоуправляемые процессы на границе раздела фаз полупроводниково-полиэлектролитно-липидных композитов. Тезисы докладов кластера конференций 2018. Суздаль. 1-6 июля 2018. С. 437.

T.F. Yusibova, R. Sh. Agayeva, A.A. Orujova

ELECTROPHYSICAL METHODS FOR STUDYING DEFECTS WITH DEEP LEVELS IN MULTILAYER STRUCTURES BASED ON SEMICONDUCTORS.

The control of nanosystems with the help of external electromagnetic fields is of interest because of the possibility of remote switching of their properties. The recently shown effect of the appearance of a pH gradient on the surface of semiconductors during their local irradiation in aqueous solutions opens up prospects for creating photosensitive structures consisting of semiconductor substrates and pH-sensitive layers (for example, polyelectrolytes). In such structures, the pH change at the semiconductor/solution interface is activated by light, which makes it possible to achieve switching of pH-sensitive layers on the surface of semiconductors into different states. So protonation changes the nature of intra- and intermolecular interactions in such layers, which can lead to a change in their morphology: thickness, roughness, porosity, as well as charge and wettability. The use of light as a stimulus provides a high response rate of the material, the exposure parameters can be changed over a wide range (for example, the intensity and wavelength of radiation), and the use of pH gradients created by light allows you to expand the class of light-sensitive materials that can be remotely affected, causing their functional response.

Т.Ф. Юсибова, Р.Ш. Агаева, А.А. Оруджова

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ С ГЛУБОКИМИ УРОВНЯМИ В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ.

Управление наносистемами с помощью воздействия внешних электромагнитных полей представляет интерес ввиду возможности дистанционного переключения их свойств. Недавно показанный эффект возникновения градиента pH на поверхности полупроводников при их локальном облучении в водных растворах открывает перспективы для создания светочувствительных структур, состоящих из полупроводниковых подложек и pH-чувствительных слоев (например, полиэлектролитов). В таких структурах изменение pH на границе раздела ‘полупроводник/раствор’ активируется светом, что позволяет добиваться переключений pH-чувствительных слоев на поверхности

полупроводников в различные состояния. Так протонирование изменяет характер внутри- и межмолекулярных взаимодействий в таких слоях, что может приводить к изменению их морфологии: толщины, шероховатости, пористости, а также заряда и смачиваемости. Использование света в качестве стимула обеспечивает высокую скорость отклика материала, параметры воздействия могут быть изменены в широких пределах (например, интенсивность и длина волны излучения), а использование созданных светом градиентов рН позволяет расширить класс светочувствительных материалов, на которые можно дистанционно воздействовать, вызывая их функциональный отклик.

MOLEKULYAR QURULUŞ MODELİ ƏSASINDA Ge-As-Se-S XALKOGENİD ŞÜŞƏVARI SİSTEMİNDƏ RAMAN SƏPİLMƏSİNİN TƏDQIQI

S.İ. MEHDİYEVA¹, R.İ. ƏLƏKBƏROV^{1,2}, S.M. MƏMMƏDOV¹

1. Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil nazirliyi, Fizika İnstitutu,

2. Azərbaycan Dövlət İqtisad Universiteti (UNEC)

E-mail: Rahim-14@mail.ru

Vakuumda termik buxarlandırma üsulu ilə alınan nazik təbəqəli $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$, $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ şüşəvari tərkibli xalkogenidlərin lokal quruluşunu əmələ gətirən quruluş elementlərinin optik rəqs modları Raman spektroskopiyası vasitəsilə tədqiq olunmuşdur. Raman səpilmə spektrlərinə molekulyar quruluş modeli tətbiq olunaraq müşahidə olunan müxtəlif rəqs tezliklərinə malik piklərin və səpilmə zolaqlarının amorf matrisi əmələ gətirən piramidal ($\text{AsS}_{3/2}$, $\text{AsSe}_{3/2}$) və tetraedral ($\text{GeSe}_{4/2}$, $\text{GeS}_{4/2}$) quruluş elementlərinin və kimyəvi rabitələrin (As-S, As-Se, Ge-S, Ge-Se) mövcudluğu ilə bağlılığı təsdiq olunmuşdur.

Açar sözlər: xalkogenid şüşə, amorf, molekulyar quruluş.

PACS: 81.05. Gc

1. GİRİŞ

Hazırda binar və mürəkkəb komponentli xalkogenid şüşələrin lokal quruluşu, optik spektroskopiyası və istilik xassələri sahəsində elmi tədqiqatlar intensiv şəkildə inkişaf edir [1]. Müxtəlif elmi məqalələrin təhlili göstərir ki, Ge-As-Se və Ge-As-Se-S çoxkomponentli xalkogenid şüşə sistemlərinin Raman səpilmə mexanizmlərinin dəqiq öyrənilməsi çox vacibdir. Xalkogenid şüşələrdə kristallara məxsus periodik nizamlı quruluş olmadığından onlara məxsus Raman səpilməsi bütün optik fononların iştirakının icazəli olması sayəsində geniş maksimumlu səpilmə zolağı ilə xarakterizə edilir [2]. Qeyd olunan maddələrdə səpilmə zolağının vəziyyəti və birinci pikin yarım eni onların quruluşunu, stexiometrik tərkibini və amorf matrisi əmələ gətirən digər quruluş elementlərinin rəqsi modlarını təhlil etməyə imkan verir [1, 2]. Aparılan elmi tədqiqatlar göstərir ki, şüşəvari matrisi əmələ gətirən quruluş elementlərinə məxsus rabitələrin elastiklik qüvvə sabitini, optik modun kütləsini və o cümlədən həmin modlara məxsus rəqs tezliklərinin Raman səpilmə spektrində aşkar olunması lokal quruluşun təbiətinin öyrənilməsi baxımından mühüm əhəmiyyət kəsb edir.

Təqdim olunan məqalənin məqsədi molekulyar quruluş modeli əsasında Ge-As-Se, Ge-As-Se-S xalkogenid şüşəvari sistemlərinin Raman səpilmə spektrində müxtəlif səpilmə zolaqlarının əmələ gəlməsinə zəmin yaradan quruluş elementlərinə məxsus rəqsi modların müəyyənləşdirilməsidir.

2. TƏCRÜBƏNİN METODİKASI VƏ NÜMUNƏLƏRİN ALINMASI

$\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$, $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ xalkogenid şüşəvari yarımkeçirici (XŞY) tərkiblərinin sintezi fırlanan silindrik soba üsulu ilə yerinə yetirilmişdir. Bunun üçün göstərilən mürəkkəb komponentli şüşəvari tərkiblərə məxsus xüsusi təmizlikli (təmizlik dərəcəsi

99,9999%) elementlərdən seçilmiş stexiometrik və qeyri-stexiometrik tərkib nisbətlərinə uyğun elekton tərzidə çəkilərək, daxili diametri 12÷17 mm olan və havası 10^{-4} tor təzyiqə qədər sorulmuş kvarts ampulalara doldurulmuşdur.

Tədqiqat üçün seçilmiş mürəkkəb komponentli maddələrin sintezi 950°C temperaturda yerinə yetirilmişdir. Sintezin yüksək temperaturda aparılması nəticəsində tərkibə daxil olan bütün komponentlərin mümkün qədər az özlülüklə bir-birinə qarışmasına nail olunmuşdur. Sobanın qızdırılması nixrom spirali ilə, temperaturun ölçülməsi isə xromel-alümel termocütü vasitəsilə edilmişdir. Sintez olunacaq mürəkkəb komponentli tərkiblərin bircinsliliyini təmin etmək üçün ampulalar 950°C temperaturda 11 saat ərzində saxlanılmış, sintez prosesinin sonu söndürülmüş fırlanan soba rejimində həyata keçirilmişdir. Raman səpilməsi təcrübələri şüşə altlıqlar üzərində $d = 2$ mik qalınlıqlı nazik amorf təbəqələrdə yerinə yetirilmişdir.

Bu tədqiqatlar üçölçülü konfokal lazer mikro-spektroqrafında əsasən optik spektrin $\nu = 25 \div 500$ cm^{-1} intervalında aparılmışdır.

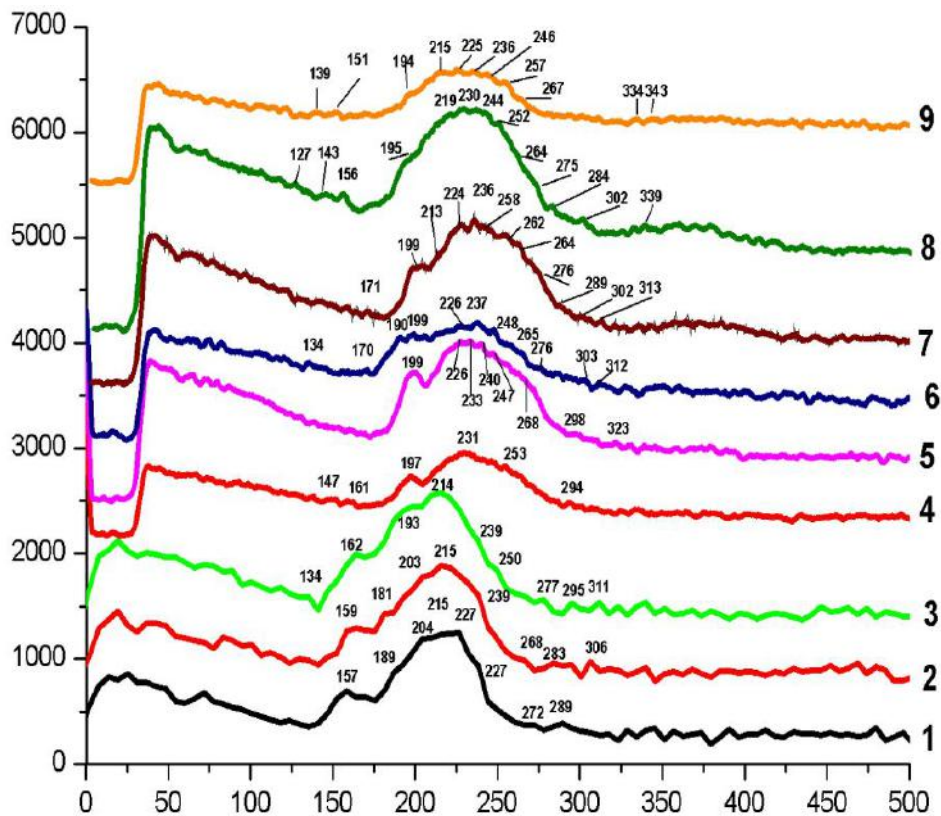
3. NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil 1-də $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$, $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ və $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ xalkogenid şüşəvari tərkiblərinin Raman səpilmə spektrləri göstərilmişdir. Göründüyü kimi, bütün tərkiblərin Raman səpilmə spektrlərində müşahidə edilən səpilmə zolaqlarını əsasən dörd intervala bölmək olar. Tezliyin $\nu = 20 \div 100$ cm^{-1} intervalında müşahidə edilən aşağı tezlikli səpilmə zolağı əsasən xalkogenid şüşələrdə lokal quruluşun orta nizamlılığı (ON) ilə bağlıdır. Qeyri-kristal maddələrdə orta nizam quruluşu aşağı tezlikli Bozon pikinin və birinci kəskin difraksiya pikinin (BKDP) müşahidə olunması ilə təsdiq olunur [3-6].

Spektrdə digər $\nu = 115 \div 180$ cm^{-1} ; $180 \div 300$ cm^{-1} ; $300 \div 45$ cm^{-1} tezliklər intervalında müşahidə olunan sə-

pilmə zolaqları tədqiq olunan maddələrin amorf matrisini əmələ gətirən müxtəlif quruluş elementlərinin rəqs modları və rabitələrin rəqs tezlikləri ilə əlaqədardır. Spektrlərdən görüldüyü kimi, germaniumun (Ge) konsentrasiyasının $7 < x < 25$ at % aralığında artması, $\text{GeSe}_{4/2}$ tetraedrik quruluş elementlərinin künc sərhədli rəqs

modları hesabına $180 \div 203 \text{ cm}^{-1}$ tezliklər intervalında yeni pikin yaranmasına səbəb olur [1]. Raman səpilmə spektrinə $262 \div 280 \text{ cm}^{-1}$ tezliklər intervalında müşahidə olunan $\sim 265 \text{ cm}^{-1}$ tezlikli pik əsasən selen (Se) zəncirləri və $\text{GeSe}_{4/2}$ tetraedrik quruluş elementlərinin kiçik künc sərhədli rəqs modları ilə izah olunur [7].



Şəkil 1. Xalkogenid şüşəvari nazik təbəqələrin Raman səpilmə spektrləri: 1 - $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$, 2 - $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, 3 - $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, 4 - $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, 5 - $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, 6 - $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, 7 - $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, 8 - $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, 9 - $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$

Tezliyin $285 \div 300 \text{ cm}^{-1}$ və $300 \div 375 \text{ cm}^{-1}$ intervallarında müşahidə olunan piklər isə $\text{GeSe}_{4/2}$ tetraedrik quruluş elementlərinin asimmetrik rəqs modları (F_2 -modu) ilə [7] və $\text{GeS}_{4/2}$ tetraedrik quruluş elementlərinin simmetrik künc sərhədli və yansərhədli gərilmə rəqs modlarının ($\sim 340 \text{ cm}^{-1}$, $\sim 372 \text{ cm}^{-1}$) varlığı ilə izah edilir [8]. Məqalədə molekulyar quruluş modeli və tetraedral (AB_4) molekullar üçün Walter Gordy [9] tərəfindən təklif olunan (3) və (4) düsturları tətbiq olunaraq $\text{GeSe}_{4/2}$ ($\text{GeS}_{4/2}$) tetraedrik quruluş elementlərinin kiçik künc sərhədli və asimmetrik rəqs modları üçün müxtəlif müəlliflərin nəticələri ilə kifayət qədər uyğunluq təşkil edən nəticələr (cədvəl 1) əldə edilmişdir. Germaniumun (Ge) konsentrasiyasının nisbətən yüksək olduğu $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ və $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ təkiblərində yuxarıda qeyd olunan pikin zəifləməsi və qismən yox olması selen (Se) atomlarının konsentrasiyasının azalması və kükürd atomlarının (S) konsentrasiyasının artması və bunun nəticəsində tetraedral $\text{GeS}_{4/2}$ quruluş vahidlərinin konsentrasiyasının artması ilə əlaqədardır. Raman səpilmə spektrlərinə məxsus $210 \div 215 \text{ cm}^{-1}$ tezlik intervalında müşahidə olunan geniş piklər əsasən yan sərhədli $\text{GeSe}_{4/2}$ tetraedrik rəqs modlarının mövcudluğu ilə

izah olunur. $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ təkiblərində germaniumun (Ge) konsentrasiyasının artması ilə yanaşı arsen (As) atomlarının konsentrasiyasının artması amorf matrisdə $\text{AsSe}_{3/2}$ piramidal quruluş elementlərinin nisbi payını artırır. $\text{AsSe}_{3/2}$ piramidal quruluş elementlərinin nisbi payının artması nəticəsində spektrin $210 \div 215 \text{ cm}^{-1}$ tezlik intervalında müşahidə edilən piklər qismən böyük tezliklər oblastına doğru sürüşərək $215 \div 226 \text{ cm}^{-1}$ tezlik oblastında yeni piklərin əmələ gəlməsinə səbəb olur. Qeyd olunan piklər $\text{AsSe}_{3/2}$ piramidal quruluş elementlərinə aid rəqs modlarının olması ilə əlaqədardır. Selen (Se) və arsenin (As) konsentrasiyasının nisbətən yüksək olduğu $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ şüşə təkiblərinə aid Raman spektrlərində $343 \div 385 \text{ cm}^{-1}$ tezlik oblastında zəif piklərin müşahidə olunması AsS_3 piramidal quruluş vahidlərinin, həmçinin AsS_3 və AsSe_3 qarışıq piramidal və As_4S_4 quruluş elementlərinin rəqs modları ilə izah edilmişdir [10] AsS_3 piramidal quruluş elementlərinə məxsus rəqs modlarının tezlikləri G.Lucovsky tərəfindən təklif olunan molekulyar quruluş modelindən

[11] alınan (1) düsturu və Herzberqin piramidal quruluşlu rəqs modları üçün təklif etdiyi (5) və (6) düsturlarına əsasən hesablanmış və nəticələr cədvəl 1-də göstərilmişdir. Göründüyü kimi, rəqs modlarına uyğun tezliklərin nəzəri hesablanmış və eksperimental qiymətləri uyğunluq təşkil edir.

Cədvəl 1.

Tetraedral və piramidal vahidlər və kimyəvi rabitələr	m [akv]	v, cm ⁻¹ [15]	v, cm ⁻¹ [14]
GeS ₄	46,35	332	312
GeSe ₄	59,02	278	258
AsS ₃	42,12	290	280
AsSe ₃	56,91	240	229
AsS ₃	m ₁ =39,44 [16]	300	289
AsS ₃	m _{2,3,4} =29,29 [16]	348	335
AsSe ₃	m ₁ = 54,87 [16]	244	233
AsSe ₃	m _{2,3,4} =45,89 [16]	267	255
As-S	22,45	397	383
As-Se	38,44	292	279
Ge-S	22,24	479	451
Ge-Se	37,82	347	322

Ge-S rabitələrinin enerjisi As-S rabitələrinin enerjisindən yüksək olduğundan piramidal AsS₃ quruluş elementinin modlarının yaratdığı səpilmə zolağının intensivliyi çox zəifdir [12]. Tədqiq olunan şüşə tərkiblərin 115÷180 cm⁻¹; 180÷300 cm⁻¹; 300÷450 cm⁻¹ tezlik aralıklarında Raman rəqs modları molekulyar quruluş modelini tətbiq etməklə hesablanmışdır. G.Lucovsky [11] modelinə görə binar xalkogenid şüşələrdə (As₂S₃) molekulyar quruluş elementlərinin daxili rəqsələrinin identifikasiyası valent qüvvə sahəsi modelləri və AsS₃ piramidal molekulardan ibarət konfigurasiya şəbəkəsi ilə təsvir edilə bilər [11]. Molekulyar model göstərir ki, optik modların rəqs tezlikləri aşağıdakı düsturla hesablanıla bilər:

$$v_0 = \frac{1}{2\pi c} \left(\frac{k_{AB}}{\mu} \right)^{1/2}, \quad (1)$$

burada v₀ - harmonik ossilyatorun tezliyi, c - işıq sürəti, k - A və B atomları arasında rabitənin qüvvə sabiti, μ - A və B atomları üçün (2) ifadəsi ilə hesablanmış modun kütləsidir.

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}, \quad (2)$$

burada m_a və m_b A və B atomlarının atom kütlələridir. (1) düsturundakı k_{AB} piramidal (AB₃) və tetraedral (AB₄) molekulalar üçün Walter Gordy [9] tərəfindən təklif olunan (3) və (4) düsturları ilə hesablanmışdır.

$$k=1,67 \cdot N \cdot \left(\frac{X_A \cdot X_B}{d^2} \right)^3 + 0,30, \quad (3)$$

$$k=3,29 \cdot \left(\frac{X_A \cdot X_B}{d^2} \right)^3 - 0,40, \quad (4)$$

burada d - rabitə uzunluğu, N – rabitənin tərtibi və X_A və X_B rabitəni yaradan atomların elektromənfilidir. Amorf matrisanı əmələ gətirən müxtəlif atomlar arasındakı rabitə uzunluğunun qiymətləri molekulyar quruluşun tədqiqində tətbiq olunan SAMSON paket proqramı vasitəsilə [13] müəyyənləşdirilmiş və nəticələr Cədvəl 2-də göstərilmişdir.

Tezliyi (1) düsturu ilə hesablanan piramidal vibrasiya modlarının kütləsi (μ=m₁ və ya μ=m_{2,3,4}) Herzberg [16] tərəfindən təklif olunmuş (5) və (6) düsturları ilə verilmişdir.

$$m_1 = \frac{3m_y m_x \sin\beta}{m_x + 3m_y \sin\beta}, \quad (5)$$

$$m_{2,3,4} = \frac{3m_y m_x \cos\beta}{m_x + 3m_y \cos\beta}, \quad (6)$$

burada β X-Y rabitəsi ilə simmetriya oxu arasındakı bucaqdır [16]. Molekulyar quruluşun tədqiqində tətbiq olunan SAMSON paket proqramı vasitəsilə [13] AsS₃ və AsSe₃ quruluş elementləri üçün β-nın qiymətinin ~60° olduğu müəyyənləşdirilmişdir. Optik modların kütlələri və tezlikləri (1), (5) və (6) düsturlarından hesablanmış və alınan nəticələr Cədvəl 1-də göstərilmişdir.

Cədvəl 2.

Elektromənfilik [15]	k [dynes/cm·10 ⁻⁵] [15]	Pauling elektromənfiliyi [14]	k [dynes/cm·10 ⁻⁵] [14]	d, Å [13]	
Ge (2,01)	As-Se (1,936)	Ge (1,8)	As-Se (1,765)	As-S (2,26)	Ge-Ge (2,39)
As (2,18)	As-S (2,095)	As (2)	As-S (1,943)	As-Se (2,39)	As-As (2,42)
S (2,58)	Ge-Se (2,69)	S (2,5)	Ge-Se (2,319)	Ge-S (2,22)	Se-Se (2,38)
Se (2,55)	Ge-S (3,018)	Se (2,4)	Ge-S (2,673)	Ge-Se (2,36)	S-S (2,13)

Cədvəl 1-də alınan nəticələr göstərir ki, Ge₄As₁₄Se₈₂, Ge₄As₁₄S₂Se₈₀, Ge₇As₁₆S₅Se₇₂, Ge₁₀As₂₀S₁₀Se₆₀, Ge_{17,5}As₁₅S₁₅Se_{52,5}, Ge₂₄As₁₉S₂₀Se₃₇, Ge₂₅As₁₀S₂₅Se₄₀, Ge₂₆As₁₈S₃₀Se₂₆ və Ge₃₃As₁₇S₃₅Se₁₅ xalkogenid şüşəvari tərkiblərinin Raman səpilmə spektrlərinə molekulyar quruluş modelinin tətbiqi elmi

ədəbiyyatda alınan nəticələrlə yaxşı uyğunluq təşkil edir.

4. XÜLASƏ

Məqalədə molekulyar quruluş modeli tətbiq olunaraq Ge₄As₁₄Se₈₂, Ge₄As₁₄S₂Se₈₀, Ge₇As₁₆S₅Se₇₂,

$\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17.5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52.5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ və $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ xalkogenid şüşəvari tərkiblərini əmələ gətirən müxtəlif quruluş elementlərinin və rabitələrin rəqs tezlikləri hesablanmışdır. Göstərilmişdir ki, amorf matrisanı təşkil edən $\text{GeSe}_{4/2}$ ($\text{GeS}_{4/2}$) tetraedrik quruluş elementlərinin rəqs modları üçün hesablanmış tezliklərin qiymətləri (278 cm^{-1} , 332 cm^{-1}) onların asimmetrik rəqs modları (F_2 -modu) və $\text{GeS}_{4/2}$ tetraedrik quruluş elementlərinin simmetrik künc sərhədli gərilmə rəqs modlarının tezlikləri ilə uyğunluq təşkil edir. Müəyyən olunmuşdur

ki, germaniumunla (Ge) yanaşı arsen (As) atomlarının konsentrasiyasının artması hesabına amorf matrisda $\text{AsSe}_{3/2}$ piramidal quruluş elementlərinin nisbi payı artır. Piramidal quruluş elementləri üçün optik modun kütləsini təyin edən Herzberg düsturu tətbiq olunaraq $\text{AsS}_{3/2}$, $\text{AsSe}_{3/2}$ piramidal quruluş elementlərinin rəqs modları hesabına Raman səpilmə spektrinin $343\div 385\text{ cm}^{-1}$, $215\div 226\text{ cm}^{-1}$ tezliklər aralığında müşahidə olunan maksimumlarının hesablamalarının nəticələri (348 cm^{-1} , 229 cm^{-1}) ilə uyğunluq təşkil etdiyi təsdiq olunmuşdur.

- [1] Rongping Wang, Kunlun Yan, Zhiyong Yang, Barry Luther-Davies. Structural and physical properties of $\text{Ge}_{11.5}\text{As}_{24}\text{S}_{64.5-x}\text{Se}_{64.5-(1-x)}$ glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids* 427, 2015, 16–19.
- [2] Zongwei Xu, Zhongdu He, Ying Song, Xiu Fu, Mathias Rommel, Xichun Luo, Alexander Hartmaier, Junjie Zhang and F. Fengzhou. Topic Review: Application of Raman Spectroscopy Characterization in Micro/Nano-machining, *Micromachines* 9(7), 361, 2018. Doi: [10.3390/mi9070361](https://doi.org/10.3390/mi9070361)
- [3] S.R. Elliott. Medium-range structural order in covalent amorphous solids. *Nature*, 1991, 354, p.445-452.
- [4] S.R. Elliott. Second sharp diffraction peak in the structure factor of binary covalent network glasses. *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.*, 1995, vol. 51, p.8599
- [5] A.P. Sokolov. Medium-range order in glasses: Comparison of Raman and diffraction measurements. A.P. Sokolov, A. Kisliuk, M. Soltwisch, D. Quitmann. *Phys.Rev. Lett.*, 1992, 69 (1), p.1540-1543.
- [6] R.I. Alekberov, G.A. Isayeva, S.I. Mekhtiyeva. Boson peak and nanostructure of chalcogenide glass-like semiconductors. *Journal of Advances in Physics*, 2014, 6(3), p.1259-1262.
- [7] M.Olivier, J.C.Tchahame, P.Němec, M. Chauvet, V. Besse, C. Cassagne, G. Boudebs, G. Renversez, R. Boidin, E. Baudet, and V. Nazabal. Structure, nonlinear properties, and photosensitivity of $(\text{GeSe}_2)_{100-x}(\text{Sb}_2\text{Se}_3)_x$ glasses. *Optical Materials Express*, vol. 4, Issue 3, pp. 525-540, 2014. <https://doi.org/10.1364/OME.4.000525>
- [8] Quan Guo, Yantao Xu, Haitao Guo a, Xusheng Xiao, Changgui Lin, Xiaoxia Cui, Pengfei Wang, Fei Gao, Min Lua. Bo Peng Effect of iodine (I2) on structural, thermal and optical properties of Ge-Sb-S chalcogenide host glasses and ones doped with Dy. *Journal of Non-Crystalline Solids* 464, 2017, 81–88.
- [9] Walter Gordy. A Relation between Bond Force Constants, Bond Orders, Bond Lengths, and the Electronegativities of the Bonded Atoms. *The Journal of Chemical Physics* 14, 305, 1946; doi: 10.1063/1.1724138
- [10] P.И. Алекберов, С.И. Мехтиева, А. И. Исаев, Г.А. Исаева. Комбинационное рассеяние света в халькогенидных стеклообразных полупроводниках As-Se-S и As-Se-Te. *ФТП*, 2014, т.48, вып. 6, стр.823-826.
- [11] G. Lucovsky, R.M. Martin. A molecular model for the vibrational modes in chalcogenide glasses. *J. Non-Cryst.Solids*. 1972, 8–10, p.185–190.
- [12] Mykhaylo Shpotyuk, Oleh Shpotyuk. Correlation of the glass transition temperature and average energetic connectivity in network chalcogenide glasses, *Computational Problems Of Electrical Engineering*, vol. 11, No. 2, 2021, p. 32-37.
- [13] SAMSON molecular design software <https://www.samson-connect.net>
- [14] L. Pauling. The nature of the chemical bond, Cornell University Press Ithaca NY, Chap. IX, 1948.
- [15] Таблица Менделеева – Ptable, <https://ptable.com/>
- [16] G. Herzberg. *Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules* (Van Nostrand-Reinhold, New York, 1945.

S.I. Mekhtiyeva, R.I. Alekberov, S.M. Mammadov

STUDY OF RAMAN SCATTERING BASED ON MOLECULAR STRUCTURE MODEL IN Ge-As-Se-S CHALCOGENIDE GLASSY SYSTEM

Optical oscillation modes of structural elements forming the local structure of $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$, $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17.5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52.5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ with thin films chalcogenide glassy compositions obtained by vacuum thermal evaporation method were studied by Raman spectroscopy. Applying the model of the molecular structure to the Raman spectra of studied substances, it was confirmed that the peaks and scattering bands with different vibration frequencies observed in spectra are associated with the presence of pyramidal ($\text{AsS}_{3/2}$, $\text{AsSe}_{3/2}$) and tetrahedral ($\text{GeSe}_{4/2}$, $\text{GeS}_{4/2}$) structural elements and chemical bonds (As-S, As-Se, Ge-S, Ge-Se) that form an amorphous matrix.

С.И. Мехтиева, Р.И. Алекберов, С.М. Маммадов

**ИССЛЕДОВАНИЕ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЙЯНИЯ СВЕТА НА ОСНОВЕ
МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ В ХАЛЬКОГЕНИДНОЙ СТЕКЛООБРАЗНОЙ
СИСТЕМЕ Ge-As-Se-S**

Моды оптических колебаний структурных элементов, образующих локальную структуру $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$, $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ с тонких пленок халькогенидных стеклообразных композиций, полученных методом термического испарения в вакууме, исследованы методом рамановской спектроскопии. Применяя модель молекулярного строения к спектрам комбинационного рассеяния исследуемых веществ, было подтверждено, что пики и полосы рассеяния с разными частотами колебаний, наблюдаемые в спектрах, связаны с наличием пирамидальных ($\text{AsS}_{3/2}$, $\text{AsSe}_{3/2}$) и тетраэдрических ($\text{AsS}_{3/2}$, $\text{AsSe}_{3/2}$) $\text{GeSe}_{4/2}$, $\text{GeS}_{4/2}$ структурных элементов и химических связей (As-S , As-Se , Ge-S , Ge-Se), образующих аморфную матрицу.

PET APARATLARI ÜÇÜN DETEKTORLARIN YENİ TIPLƏRİNİN HAZIRLAMASI

XƏYALƏ ELBRUS qızı HÜSEYNZADƏ

Mingəçevir Dövlət Universiteti, Mingəçevir, Azərbaycan

Khayala.huseynzada@gmail.com

Bu işdə mövcud pozitron-emissiya tomoqrafiya aparatlarının analiz sxemləri, iş prinsipləri həmçinin onların çatışmazlıqları təqdim edilmişdir. Mikropikselli selvari fotodiodlarının yeni modulu təklif edilmişdir, hansı ki, hədəfi fotoelektron vakuum gücləndiriciləri əsasında skanerin indiki fotodetektorlarını əvəz etməkdir. Yeni modulun üstünlükləri və skanerlərin hibrid PET-MRT də onların tətbiqinin imkanı təsvir edilmişdir.

Açar sözlər: pozitron emissiya tomoqrafiyası, fotodiod, mikropikselli selvari fotodiodlar (MSFD), fotoelektron gücləndiricilər (FEG).

GİRİŞ

Hal-hazırda onkoloji xəstəliklər ölümcül nəticəylə ən təhlükəli xəstəliklərdən biridir. Yalnız xərçəngdən bütün dünyada 2018-ci ildə 9,6 milyon insan [1] həlak olmuşdur. Azərbaycanın payına isə ildə 4-5 min nəfər düşür. Ümumi problem xəstəliyin sonrakı mərhələlərində tibbi yardım axtarmaq və diaqnostikanın olmamasıdır. Diaqnostika pozitron emissiya tomoqrafiyası kimi bahalı avadanlıqlarda aparılır. Orta hesablamalara görə, 1 milyon əhaliyə 1 cihaz norma hesab olunur. Bununla belə, avadanlıqların qiymət diapazonu klinikalara kifayət qədər sayda tomoqrafiya almağa imkan vermir. Həmçinin, müasir PET skanerlərinin aşağı rezolyusiyaya malik olması işləri erkən mərhələlərdə dəqiq lokallaşdırma bilmir.

PROBLEMİN TƏHLİLİ

Pozitron emissiya tomoqrafiyası, həmçinin PET tomoqrafiyası və ya PET skan adlanır, nüvə təbabətində görüntüləmə növüdür.

Protonla zəngin izotoplar nüvədəki bir protonun neytron, pozitron və neytrinoya çevrildiyi pozitron şüalanması ilə parçalana bilər. Qız nüvəsinin atom nömrəsi ana nüvədən bir vahid azdır. Pozitron emissiyası ilə parçalanan izotopların nümunələri cədvəl 1-də göstərilmişdir.

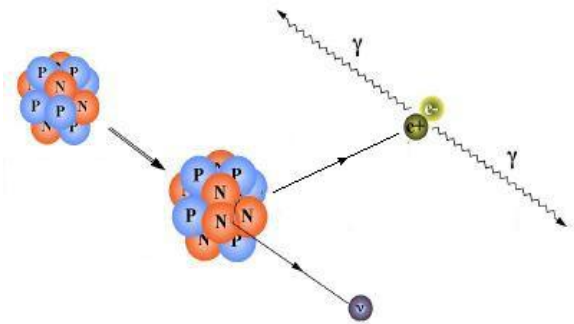
Cədvəl 1.

İstifadə edilən pozitron-saçan radioizotoplar

Izotop	Yarımparçalanma period (dəq)	Maksimum pozitron enerjisi (MeV)	İstehsal
11C	20.3	0.96	Siklotron
13N	9.97	1.19	Siklotron
15O	2.03	1.70	Siklotron
18F	109.8	0.64	Siklotron
68Ga	67.8	1.89	Generator
82Rb	1.26	3.15	Generator

Pozitronlar insan toxumalarından keçərkən kinetik enerjilərini əsasən elektronlarla Kulon qarşılıqlı təsirindən verirlər. Bir pozitronun sərbəst kütləsi elektronun kütləsi ilə eyni olduğundan, pozitronlar hər bir Ku-

lon qarşılıqlı təsiri ilə böyük istiqamətli sapmalara məruz qala bilər və onlar kinetik enerjilərini itirərək toxumada əyri bir yol gedirlər (şəkil 1).



Şəkil 1. Pozitron emissiyası və annihilasiyası.

Pozitronlar istilik enerjilərində çatdıqda, onlar annihilasiya yolu ilə elektronlarla qarşılıqlı təsirə başlayır və bu, pozitron sistemində antiparalel olan iki 511keV qamma kvantının əmələ gəlməsi ilə nəticələnir. Sərbəst parçalanmada iştirak edən qarşılıqlı təsirdə olan hissəciklərin impulsunun dəyişməsi 511 keV enerjili fotonlar istiqamətində bucaq qeyri-müəyyənliyinə səbəb olur [3].

Pozitronların sonlu diapazonu və annihilasiya fotonlarının qeyri-xəttiliyi ənənəvi tək foton emissiya metodlarında tapılmayan özünəməxsus yerləşdirmə qeyri-dəqiqliyinə gətirib çıxarır.

PET kamerada hər bir detektor hadisə fotonu aşkar edildikdə sinxronlaşdırılmış siqnal yaradır. Sonra bu impulsar təsadüf dövrlərində birləşdirilir və impulsar qısa müddət ərzində düşərsə, onlar təsadüf hesab edilir (şəkil 2).

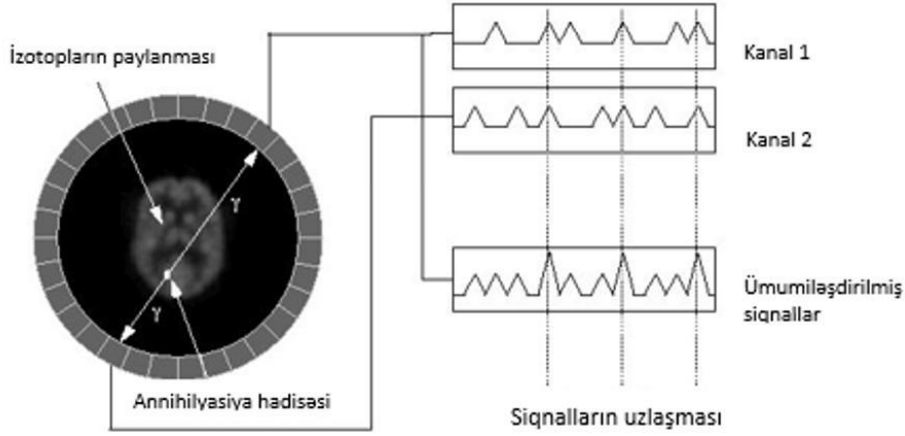
Mövcud PET tomoqrafiyası əsasən 4 komponentdən ibarətdir. Bu qurğu mexaniki hissə, elektronika, detektor hissəsi və proqram təminatı hissələrindən ibarətdir. Əsasən, avadanlığın qiymətinin 1/3-dən çoxunu əsasən vakuüm fotoelektron gücləndirici borulardan istifadə edən detektor hissəsi tutur (PMT, şəkil 3). Dünyaya bazarında FEG bahalı fotodetektorlardan biri hesab olunur. Onların yüksək enerji istehlakı, forma və ümumi ölçülər, vibrasiya və maqnit sahələrinə həssaslıq kimi bəzi çatışmazlıqları da var. Bu çatışmazlıqlar bütövlükdə avadanlığın özündə əks olunur. Silisium

PET APARATLARI ÜÇÜN DETEKTORLARIN YENİ TİPLƏRİNİN HAZIRLAMASI

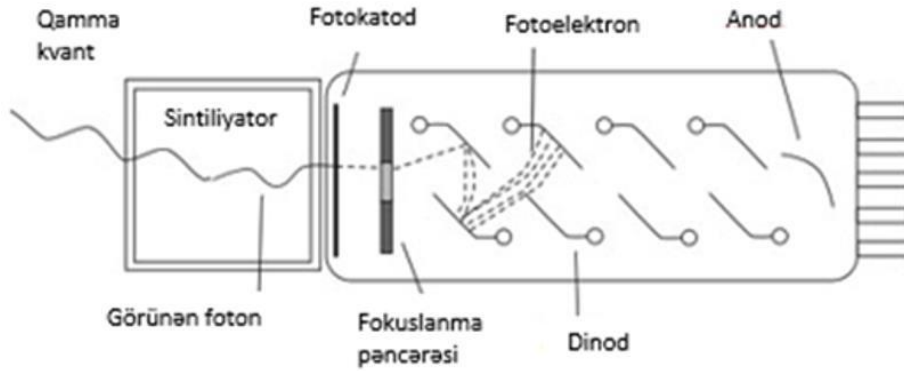
əsaslı fotodiodların yaradılması üzrə elmi işlər aparılır [2].

Müasir silisium fotodiodlar ənənəvi vakuum fotoelektron gücləndiricilərini əvəz etmək üçün böyük potensiala malikdir. Fotodetektorların yeni növləri FEG-

nin yuxarıda göstərilən çatışmazlıqlarından azaddır ki, bu da xarici tədqiqat mərkəzlərinə maqnit rezonans və pozitron emissiya tomoqraflarının vahid diaqnostika avadanlığına inteqrasiya imkanlarını tədqiq etməyə imkan verdi.



Şəkil 2. Annihilasiya prosesinin qeydiyyat sxemi

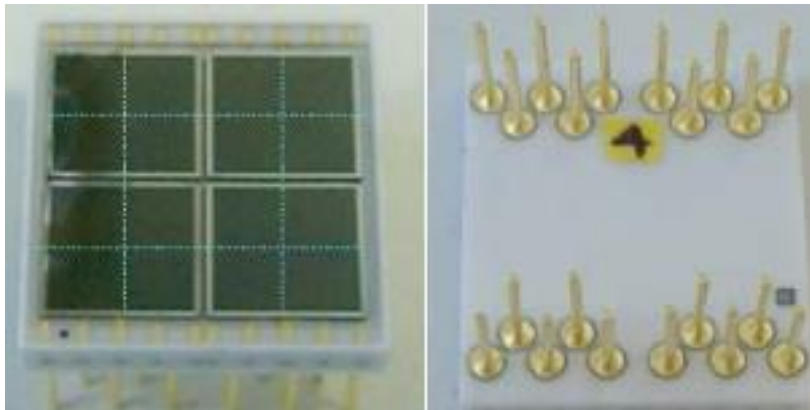


Şəkil 3. Vakuum fotoelektron qeyd etmə sxemi.

YENİ KONSEPSİYA

Məlumdur ki, xəstənin orqanizmində yoluxmuş hüceyrələrin lokalizasiyasının yüksək dəqiqliklə müəyyən edilməsi üçün radiasiya detektorlarının ayırd etmə qabiliyyəti və sürəti böyük əhəmiyyət kəsb edir. Mikropikselli selvari fotodiodlarına (MSFD) əsaslanan ye-

ni modul (şəkil 4) hazırlanmışdır [4]. Yeni MSFD konfigurasiyaları PET tomoqrafiyasında istifadə üçün ən yaxşı parametrlərə malikdir. Ən son MSFD nümunələri yüksək aşkarlama effektivliyinə (35%), həssas zonanın həndəsi amilinə (100%), foto siqnala sürətli reaksiyaya (100 ns) və maqnit sahələrinə qeyri həssaslığa malikdir.

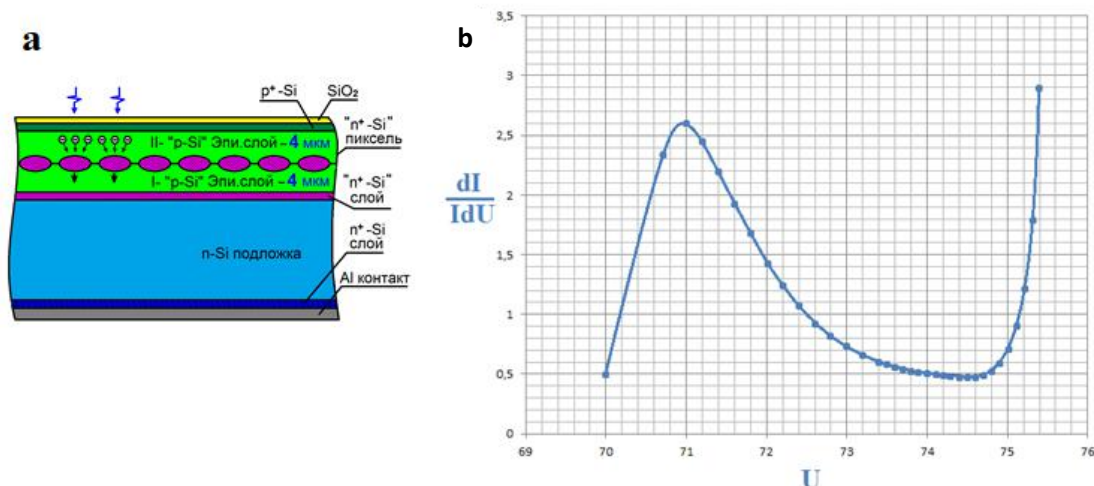


Şəkil 4. Üst tərəfdən (sol) və arxa tərəfdən (sağ) MSFD matris modulu.

Modul 16 elementli matris şəklində keramika substratda yığılmışdır. Kontaktlar matrisin hər bir elementinə əks tərəfdən bağlanır, onların köməyi ilə fotodiodlara gərginliklər tətbiq olunur (~ 90-95 V). Qəbul edilən foto siqnal 2V bant genişliyi olan yüksək həssas gücləndirici ilə gücləndirilir.

Tibbi diaqnostika sahəsinə PET-MRT skanerləri üçün Zecotek şirkətinin silisium fotoelektron gücləndiricilərini, və ya mikropiksel sevari fotodiodlarını (MSFD) təqdim etmək üçün işçi qrupumuza növbəti nəsil yeni yüksək həssaslıqlı fotodiod hazırlamaq həvələ olunmuşdur [4-6]. Yeni silisium əsaslı fotodiodların

inkişafı üçün pikselləri dərinlikdə yerləşən mikropikselli selvari fotodiodlarının strukturu seçilmişdir (Şəkil 1a), piksel ölçüsü 10 μm və sıxlığı 1000 piksel/ mm^2 . Fotodiodun aktiv sahəsi 3,7 x 3,7 mm^2 dir. Həm Çoxrəlski üsulu ilə, həm də zona əritmə üsulu ilə müxtəlif texnologiyalardan istifadə etməklə hazırlanmış 20 düymlük silisium altlıqlarında nümunələrin istehsalı üçün istehsal alqoritmi tərtib edilmişdir. İstehsal yeri olaraq, optik mikroelektronikanın istehsalında uzun illər təcrübəsi olan Malayziya Mikroelektron Sistemlər İnstitutu MİMOS seçilmişdir.



Şəkil 5. MSFD-nin sxematik görüntüsü a, Volt- Amper xarakteristikası (VAX) b.

MSFD-nin bəzi xarakteristikalarından danışa bilərək Məlum olduğu kimi, PET-MRT skanerlərində qamma kvantları qeydə almaq üçün silisium detektoru yüksək piksel sıxlığına, aşağı həndəsi faktora, yüksək foton qeydetmə effektivliyinə və yüksək amplitud ayırdetmə qabiliyyətinə malik olmalıdır. Yüksək dozaları və struktur ölçü məlumatları simulyasiya edilmiş və hesablanmışdır. İstehsal başa çatdıqdan sonra matrislər disk kəsicisi maşından istifadə edərək tək elementlər şəklində kəsilmiş və dəmir korpuslara quraşdırılmışdır. Nəticədə nümunələr 73-75 V diapazonunda işləmə gərginliyi ilə təxminən 71 V-lik bir deşilmə gərginliyinə malikdir (şəkil 5 b).

NƏTİCƏ

PET tomoqrafiyasının parametrlərini yaxşılaşdırmaq üçün detektor modulu hazırlanmışdır. Modul maqnit sahələrinə həssas deyil, bu da onun hibrid PET-MRT skanerlərində istifadə etməyə imkan verir. Bu skanerlər iki əldə edilmiş görüntünün birləşməsində diaqnoz qoyulmuş xəstənin ətraflı proyeksiyasını verir. Bu tip yeni moduldan istifadə etməklə tomoqrafların istehsal xərclərini 20%-dən çox azaltmaq mümkündür ki, bu da diaqnostik xərclərin qiymət diapazonuna əhəmiyyətli dərəcədə təsir göstərə bilər.

[1] <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/cancer>

[2] Image artifacts from MR-based attenuation correction in clinical, whole-body PET/MRI, MAGMA Magnetic Resonance Materials in Physics Biology and Medicine, DOI: 10.1007/s10334-012-0345-4.

[3] D.W. Rickey, R. Gordon and W. Huda. 1992 "On lifting the inherent limitations of positron emission tomography by using magnetic fields (MagPET)" *Automedica*, 14 355-369.

[4] A new detector concept for silicon photomultipliers. A. Sadigov et al. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 824(2016)135–136.

[5] K. Isayev, et al. "MAPD type avalanche photodetectors." arXiv preprint arXiv:2209.05057, 2022.

[6] F. Ahmadov, et al. "Investigation of parameters of new MAPD-3NM silicon photomultipliers." *Journal of Instrumentation* 17.01 (2022): C01001.

[7] N. Sadigova, et al. "IMPROVEMENT OF BURIED PIXEL AVALANCHE PHOTODETECTORS." *Colloquium-journal*. No. 5 (92). Голопристанський міськрайонний центр зайнятості, 2021.

POLİPROPİLENİN ELEKTROFİZİKİ XASSƏLƏRİNƏ NANOĞİLİN TƏSİRİ

A.R SADIQOVA¹, P.B. ƏSİLƏYLI¹, A.Ə. HADIYEVA², X.O. SADIQ²,
İ.M. İSMAYILOV³, V.Ə. ƏLƏKBƏROV¹

1. Azərbaycan Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu.

2. Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti. Azadlıq prospekti, 20

3. Azərbaycan Memarlıq və İnşaat Universiteti

e-mail: arzu-sadigova@mail.ru

Araşdırdığımız tədqiqat işində polipropilen (PP) əsasında D_{KI} markalı nanogil (NG) əlavəli nanokompozitlərin elektrik möhkəmliyi (E) və elektrik keçiriciliyi (γ) öyrənilmişdir. Nanokompozitlərin γ -sının temperatur-tezlik asılılığını öyrənməklə texnikanın müxtəlif sahələrində məqsəduyğun şəkildə istifadə oluna bilən yeni elektroaktiv polimer kompozit materiallar əldə edilə bilər.

Açar sözlər: nanogil, elektrik möhkəmliyi, elektrik keçiriciliyi, nanokompozitlər.

GİRİŞ

Yeni kompleks xassələrə malik materiallara ehtiyac yarandıqda yenidən polimer materialları sintez etmək və onların istehsalını inkişaf etdirmək məqsəduyğun deyil: bu çox uzun, bahalı, mürəkkəb və hər zaman müvəffəqiyyətlə nəticələnmə bilən yol deyildir. Bu məsələnin perspektiv həllərindən biri mövcud polimerlərin fiziki modifikasiyası, və ya onlara yeni kompleks xüsusiyyətlər vermək və daha davamlı etmək üçün başqa təbiətə və quruluşa malik qatqıların əlavə edilməsidir. Ona görə də təsadüfi deyil ki, son illərdə polimerlər fizika və kimyasında əsas yeri kompozit materialların alınması və istifadəsi tutur [1].

Kompozit materiallarda matris və əlavə hissəciklərinin sərhədləri arasındakı qarşılıqlı təsirdən maddənin möhkəmliyinin, dayanıqlılığının və bir çox digər xassələrinin yaxşılaşmasına gətirib çıxaran amillər yaranır. Fazalararası sərhəddəki qarşılıqlı təsir sistemin ayrı-ayrı komponentlərinin xassələrinin dəyişməsinə səbəb olur və nəticədə kompozit materialların onun tərkibinə daxil olan komponentlərlə müqayisədə prinsipdə yeni xassələrə malik olurlar.

Polimer materiallar içərisində daha perspektiv olan termoplastik polimerlərdir. Bu polimerlər texnoloji xüsusiyyətləri ilə yanaşı, həmçinin yüngüllüyü, ətraf mühitin təsirinə qarşı davamlılığı, yüksək optik, dielektrik xassələri ilə də seçilir. Buna görə də, termoplastik polimerlərdən həm detal və məmulatların hazırlanmasında, həm tikinti sahəsində, həm də plastik boru və izolyasiya materiallarının hazırlanmasında geniş istifadə olunur.

Poliolefinlər sinfinə aid olan geniş istifadə sahəsinə malik yüksək molekullu birləşmələrdən biri PP-dir. PP-dən alınan məhsullar fərqli xarici amillərin təsiri altında parçalanmaya məruz qalırlar. Bunun qarşısını almaq üçün PP əsasında D_{KI} əlavə edilmiş nanokompozitlər hazırlayırlar. PP-nin kimyəvi quruluşu $[-CH_2-CHCH_3-]_n$ şəklindədir. PP metal kompleksli katalizatorların iştirakı ilə propilenlərin polimerizasiyasından alınır. İzo-, sindo- və ataktik konfiqurasiyalarından olan PP-nin xassələri molekulyar çəkiddən və izo-

taktik hissələrinin tərkibindən asılı olaraq geniş aralıqda dəyişə bilər. Ən çox sənaye əhəmiyyətli izotaktik PP-dir [2].

PP plastik material olmaqla yüksək möhkəmlik, yüksək kimyəvi dayanıqlıq, aşağı nəm və qaz keçiriciliyi ilə fərqlənir. Asan emal olunur, üzvi və qeyri-üzvi əlavələrlə yaxşı qarışa bilər. İstismar temperaturu $120^{\circ}C - 140^{\circ}C$ -dir. Polimerlər əsasında NG əlavəli nanokompozitlərin bir çox mexaniki və elektrik xassələri tədqiqatçılar tərəfindən araşdırılmışdır [3-6]. Bu nanokompozitlərin elektrofiziki xassələri müqayisəli şəkildə öyrənilməsi həm praktik və həm də elmi cəhətdən vacib məsələdir.

Nümunələrin alınması və təcrübi metodlar

Kompozit material olaraq PP-yə daxil edilmiş qeyri-üzvi qatqı kimi istifadə olunan nanohissəcik kimi Na^+ -montmorillonit tərkibli D_{KI} markalı NG götürülmüşdür. NG təbəqəli quruluşa malik, qalınlığı təxminən 1-3 nm, uzununa ölçüsü 50-150nm olan gil minerallarının ümumi adıdır. Montmorillonit (Fransada Montmorillon şəhərində tapıldığı üçün bu ad verilmişdir) boz, və ya ağ rəngli yüksək dispers təbəqəli silikatdır. Kimyəvi quruluşu:



D_{KI} müxtəlif faizlərdə (1,0%; 2,0%; 4,0%; 6,0%; 10,0%) toz şəklində PP ilə mexaniki qarışdırıldıqdan sonra qaynar presləmə üsulu ilə (15Mpa, 445K, 10dəq.) nazik (50mkm-80mkm) nümunələr əldə edilmişdir. Hər iki komponent toz şəklində və sıxlıqları bir-birinə yaxın olduğundan bircinsli qarışıq alınır. Kiçik faizlərdə nanokompozitlərin sıxlığının dəyişməməsi hazırlanan məmulatların yüngül olmasını təmin edər ki, bu da praktiki cəhətdən çox vacibdir.

Polimerlər və polimer nanokompozitlər texniki məqsədlər üçün istifadə olunduqda, elektrik sahəsinin bircinsliliyi lazımi səviyyədə təmin olunmur, izolyasiya materialları "kənar effektlər" in təsirinə məruz qalırlar. Fiziki tədqiqatlar zamanı elektrik sahəsinin bircinsliliyini təmin etmək və deşilmə gərginliyinin qiymətinə kənar boşalmaların təsirini aradan götürmək lazımdır. Elektrodlar parçalanmayan poladdan hazırlanmış, kənarları yuvarlaqlaşdırılmış, diametri 30 mm

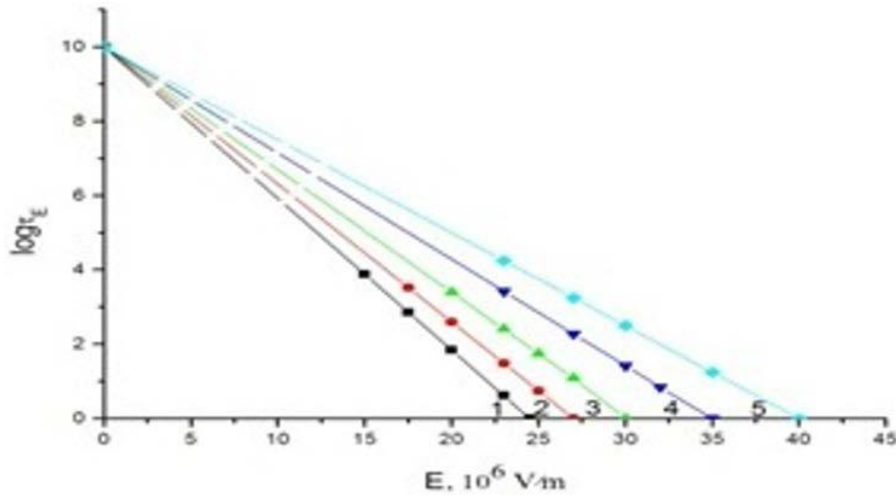
və 2mm olan sistemdən ibarətdir. Yüksək gərginlikli mənbə kimi YPIY-1M qurğusundan istifadə olunmuşdur. Elektrik möhkəmliyi iki üsulla ölçülür. Birincisi, nümunələri elektrodlar arasında yerləşdirərək gərginlik mənbəyindən dəyişən cərəyan verilir. Deşilmə gərginliyini nümunənin qalınlığına (d) bölsək $E = \frac{U_{des}}{d}$ düsturundan elektrik möhkəmliyini hesablaya bilərik. İkinci üsul isə nümunəyə deşilmə gərginliyindən kiçik gərginliklər verməklə elektrik yaşama müddətinin (τ) (nümunəyə gərginlik verdikdən deşilməyə qədər keçən zaman) loqarifmasının ($\log \tau$) dəyişən gərginliyin sahəsinin intensivliyindən asılı qrafikindən $t=1$ saniyə müddətindəki qiymətlərindən hesablanır.

Elektrodlar sistemindən ibarət olan xüsusi ölçü özəyində E7-20 immittans cihazı vasitəsilə otaq temperaturunda və 25Hz-dən 1MHz-ə qədər tezlik və 1kHs-

də 300K-400K temperatur aralığında nümunələrin elektrik müqaviməti ölçülmüşdür.

Təcrübi nəticələr və izahı

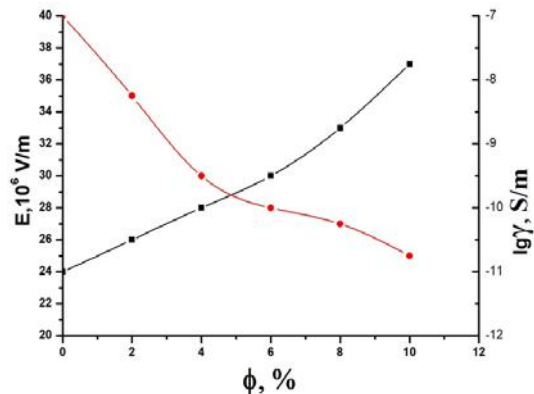
Elektrik yaşama müddətinin sahənin intensivliyindən asılılıq qrafikindən görüldüyü kimi (şəkil 1), sahənin intensivliyi artdıqca həm saf, həm də nanokompozitlər üçün τ azalır. Mexaniki yaşama müddətində olduğu kimi [7] bu düz xətlər "ailəsi" də termoflüktasiya mexanizmi ilə izah oluna bilər. Şəkil 1-dən istifadə edərək 1 saniyədəki elektrik möhkəmliklərinin D_{KI} -in miqdarından asılılığı şəkil 2-də göstərilmişdir və E əlavənin miqdarından asılı olaraq azalır.



Şəkil 1. PP+ D_{KI} nanokompozitlərinin elektrik yaşama müddətinin ($\log \tau E$) elektrik sahəsinin intensivliyindən (E) asılılıqları: 1~PP+10,0% D_{KI} ; 2~PP+8,0% D_{KI} ; 3~PP+4,0% D_{KI} ; 4~2,0% D_{KI} ; 5~saf PP.

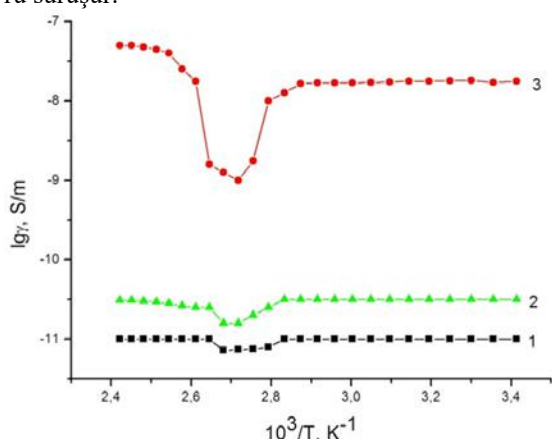
Nanokompozitlərin elektrik keçiriciliyinə D_{KI} -in təsirini və γ -nın temperatur tezlik asılılığını öyrənməklə texnikanın müxtəlif sahələrində (radio, optik və akustik elektronkada, qeyri-xətti optikada, hasablama və köçürmə texnikasında və s.) məqsədə uyğun şəkildə istifadə oluna bilən yeni elektroaktiv polimer kompozit materiallar əldə edə bilərik. Şəkil 2-də PP-nin elektrik keçiriciliyinin D_{KI} -in miqdarından asılılığı verilmişdir. D_{KI} -in miqdarından asılı olaraq nanokompozitin γ -sı artır. Nanokompozitlərin keçiriciliyinin artması əlavə edilmiş gil minerallarının kristal daxili rabitələrinin növündən asılıdır. Kovalent rabitələrə malik olan dielektrik minerallar (kvars, slüda, çöl şpatı və s.) çox yüksək müqavimətə ($10^{12} - 10^{15} \text{Om} \cdot m$) malikdirlər. Əsasən ion rabitələri ilə tanınan yarımkeçirici minerallar da (karbonat, sulfat, halooid və s.) yüksək müqavimət ilə ($10^4 - 10^8 \text{Om} \cdot m$) fərqlənirlər. Ən nəhayət ion-kovalent rabitəyə malik gil minerallarının (hidroslüda, montmorillonit, kaolinit və s.) müqaviməti ($\rho < 10^4 \text{Om} \cdot m$) kifayət qədər aşağıdır [8]. Əlavə kimi istifadə etdiyimiz D_{KI} markalı nanogil ilə alınan PP nanokompozitlərin elektrik möhkəmliyində artan keçiriciliyində azalma gözləmək mənasız olardı (şəkil 2), çünki D_{KI} orta keçirici minerallar sinfinə aiddirlər.

Araşdırmalardan görünür ki, [9,10], real şəkildə hazırlana bilən elektron qurğuların ən mühüm parametrlərindən biri relaksasiya proseslərinin sürəti ilə ölçülə bilən qısa müddətli təsirlərdir. Bununla əlaqədar olaraq nanokompozitlərin polyarlaşma proseslərinin aktivləşmə enerjisinin temperatur asılılığını öyrənmək çox mühümdür. Ona görə də, dəyişən elektrik sahəsində PP və alınan nanokompozitlərin keçiriciliyi geniş temperatur və tezlik aralığında tədqiq edilmişdir.



Şəkil 2. PP+ D_{KI} nanokompozitlərinin elektrik möhkəmliyinin (E) və elektrik keçiriciliyinin (γ) D_{KI} -in həcmi miqdarından asılılığı.

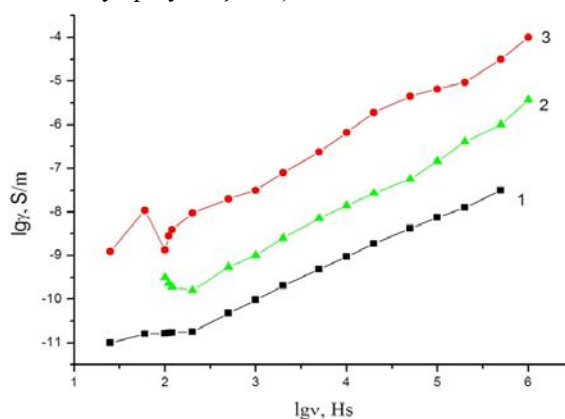
Şəkil 3-də nümunələrin γ -sının 1kHs-də temperatur asılılığı qrafiki olaraq təsvir edilmişdir. Göründüyü kimi, 345K-ə qədər temperaturun artması ilə PP və nanokompozitlərdə praktik olaraq γ sabit qalır (I bölgə), temperaturun sonrakı artması ilə γ minimum həddə qədər azalır (II bölgə), sonra yenidən artır (III bölgə). II və III bölgədə $\lg \gamma$ -nın temperaturdan xətti asılılığı uyğun bölgələrdə γ -nın eksponensial qanunla dəyişdiyini göstərir. PP və PP+2,0% D_{KI} nanokompozitdə II bölgənin meyl bucağı III bölgənin meyl bucağından çoxdur. Ən çox γ -ya malik olan PP+10,0% D_{KI} nanokompozitdə bu meyl demək olar ki, eynidir. Meyl bucaqları uyğun temperatur aralığında aktivləşmə enerjilərinin müxtəlif olmasını göstərir və bunu iki mexanizm ilə izah etmək olar. Temperaturun artması ilə γ -nın azalması nümunədə elektronların energetik təbəqələrdən azad olması ilə elektron keçiriciliyinin yaranmasını göstərir. III- bölgədə γ -nın artması göstərir ki, polimer matrisanın seqmentlərinin hərəkətliliyinin və D_{KI} hissəciklərinin iştirakı ilə cərəyan daşıyıcılarının artması hesabına baş verir. Qeyd etmək lazımdır ki, D_{KI} -in böyük həcmi miqdarında (PP+10,0% D_{KI}) γ -nın artma temperaturu $20^\circ C$ yüksək temperaturalara doğru sürüşür.



Şəkil 3. PP+NG nanokompozitlərinin elektrik keçiriciliyinin ($\lg \gamma$) $v=1$ kHs-də temperatur (T) asılılıqları: 1- saf PP; 2- PP+2,0% NG; 3- PP+10,0% NG.

PP+ D_{KI} nanokompozitlərin dəyişən elektrik sahəsində elektrik keçiriciliyinin $T=293K$ -də sahənin tezliyindən asılılığı ikiqat loqarifmik miqyasda göstərilmişdir (şəkil 4). Bu asılılıqlarda ümumi bir xassə müşahidə edilir, sahənin tezliyindən asılı olaraq yarıdır. Saf PP üçün $\lg \gamma$ (v) asılılığı loqarifmik koordinat sistemində iki xətti bölgədən ibarətdir. Bu cür xəttilik γ -nın v -dən üstlü asılılığı göstərir, yəni $\gamma \sim v^S$ (S keçiricilik mexanizminin təbiətindən asılı olaraq təyin edilə bilən

kəmiyyətdir). γ (v) asılılığının bu cür dəyişməsi yüklərin daşınmasının sıçrayış mexanizmi ilə [11] baş verdiyini güman etmək olar. Xətti bölgələrin hər ikisində saf PP üçün $S < 1$ (uyğun olaraq 0,6 və 0,8) olması onu göstərir ki, omik olmayan müqavimətlərdə də yük daşınması mövcuddur. PP+10,0% D_{KI} nanokompoziti üçün keçiricilik $\gamma_{dc} = \gamma_{sc} + \gamma_{rel}$ tənliyi ilə istifadə oluna bilər (γ_{dc} -dəyişən cərəyan elektrik keçiriciliyi, γ_{sc} - sabit cərəyan elektrik keçiriciliyi, γ_{rel} - fazalararası sərhəddə yaranan relaksasiya elektrik keçiriciliyi). Müəlliflər belə hesab edirlər ki, D_{KI} -in konsentrasiyasının artması ilə fazalararası polyarlaşma meydana gəlir [11]. Nanokompozit sistemlərdə komponentlər müxtəlif keçiriciliyə və dielektrik sabitinə malik olduğu üçün elektrik sahəsinin təsiri ilə elektrodlardan injeksiya olunan yüklər komponentlərin ayrılma sərhədləri arasında toplanır və fazalararası polyarlaşmanın meydana gəlməsinə səbəb olur (Maksvell-Vaqner relaksasiya polyarlaşması).



Şəkil 4. PP+NG nanokompozitlərinin elektrik keçiriciliyinin ($\lg \gamma$) $T=293$ -də tezlik ($\lg v$) asılılıqları: 1- saf PP; 2- PP+2,0% NG; 3- PP+10,0% NG.

PP-nin elektrik möhkəmliyinin D_{KI} -in miqdarından asılı olaraq dəyişməsinə və nanokompozitlərin elektrik keçiriciliyinin temperatur və tezlik asılılıqlarının təcübi nəticələrinə əsaslanaraq aşağıdakı müddəalar irəli sürmək olar.

1. Polimerlərə bərk əlavələr daxil etməklə polimer matrisasında fazalararası sərhəddə yükdaşıyıcıların tələləri kimi özünü göstərə bilən yeni quruluş yaratmaq olar.
2. Hetrogen sistemlərdə komponentlərin elektrik keçiriciliyinin müxtəlifliyinə görə Maksvell-Vaqner (miqrasiya) polyarlaşması müşahidə olunur.
3. D_{KI} əlvanin təsirindən sonra makromolekulların hərəkətliliyinin artması relaksasiya proseslərinin sürətini əhəmiyyətli dərəcədə artırır və bunun nəticəsində γ -nın artmasına uyğun olaraq elektrik möhkəmliyi azalır.

[1] S. Hudson. Polyolefin nanocomposites, United States patent №59105231999.
 [2] В.И. Пулиновский, И.К. Ярцев. Полипропилен: Книга по Требованию М.,2013,150С.

[3] А.Ə. Hadiyeva, Ramazanov, V.Ə. Ələkbərov, A.R. Sadıqova, H.S. İbrahimova. "Montmorillonit nanogilinin polipropilenin elektret xassələrinə təsiri", Energetikanın problemləri, №2, 2015 s.48-55

- [4] *M.A.Guliyev., A.R.Sadigova., A.A. Hadiyeva., P.B. Asilbeyli., N.C. mamedov., E.S.Safiyev.* "Changes occurring in structure of polyethylene + nanoclay nanocomposites after influence of an electric field". *İJTRP*, V 13, №4, 2021, P.40-44.
- [5] *Y.Özcanlı., M. Beken., F. Kosovalı Çavuş., A.A.Hadiyeva., A.R.Sadigova., V.A. Alekperov.* "Artificial Neural Network Modelling of the Mechanical Properties of Nanocomposite Polypropylene –Nanoclay". *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics* V.12.P.316-320.2017
- [6] *A.P.Садыгова., И.И.Аббасов., Э.С.Сафиев., П.Б. Асилбейли., В.А.Алекперов.* "Влияние микродававок наноглины на молекулярные процессы и кинетику электрического и механического разрушения полиэтилена." *Nanosistemi. Nanomaterial. Nanotehnologii.* т.17, №1, с155-165.
- [7] *M.A. Ramazanov, A.A. Hadiyeva., V.A. Alekperov.* "Influence Of Electric Field (Aging In Electric Field) On Structure And Properties Of Nanocomposite Polypropylene - Nanoclay." *Journal of Ovonic Research.* V. 10., № 4. July-august 2014., p.101-107.
- [8] *В.И. Осипов, В.Н. Соколов, Н.А. Румянцева.* "Микроструктура глинистых пород." М.: Недра, 1989, 211с.
- [9] *Н.М. Ушаков, А.Н. Ульзутуев, И.Д. Кособудский* "Термодиелектрические свойства полимерных композитных наноматериалов на основе медьоксид–меди в матрице полиэтилена высокого давления". *ЖТФ*, 2008, т. 78, в. 12, с. 65-69.
- [10] *М.М. Кулиев, Р.С. Исмайлова.* "Диэлектрические и электрические свойства композитов с пьезоэлектрическим наполнителем" // *Пластич.массы*, 2012, №4, с.10-13.(94)
- [11] *М.М. Kuliev, O.A. Samedov, R.S.Ismayilova.* "The Temperature- Frequency Dispersion Of The Dielectric Characteristics Of Composite Materials Based On Polyethylene With TlInS₂ Inclusions". *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*, 2012, v.40, № 2, p.91-96 (57).

MnIn₂S₄ MONOKRİSTALLARINDA AŞIRMA EFEKTİNİN TƏDQIQI

O.B. TAĞIYEV^{1,2}, T.Ş. İBRAHİMOVA¹, F.A. KAZIMOVA¹,
G.S. HACIYEVA¹, E.Q. ƏSƏDOV¹

¹Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu
²M.V.Lomonosov adına MDU Bakı Filialı, AZ1143 Bakı, Azərbaycan
kazimova-f@mail.ru

MnIn₂S₄ monokristalları əsasında metal-yarımqeçirici -metal strukturu hazırlanmış və 77÷300K temperatur intervalında voltamper xarakteristikası(VAX) tədqiq edilmişdir. VAX- da Om qanununa tabe olan, cərəyanın kəskin artma oblastları ilə yanaşı mənfi diferensial müqavimətli oblastında olması aşkar edilmişdir. Göstərilmişdir ki, aşırma effekti həm electron həm də istilik prosesləri hesabına baş vermişdir. Tələrlin aktivasiya enerjisi tapılmışdır.

Açar sözlər: aşırma effekti, mənfi müqavimət, hədd gərginliyi, hədd cərəyni
Pacs: 72.80, 75.50

GİRİŞ

Artıq bir neçə onilliklərdə ki, tədqiqatçıların A^{II}B₂^{III}X₄^{VI} (burada A-ikivalentli kationlar – Mn, Co, Ca; B- üçvalentli kationlar - Ga, In; X-halkogenlər -S, Se, Te) tipli birləşmələrə marağını artırır. MnIn₂S₄ monokristalları bu tip birləşmələrdən biridir ki, onların elektrik, foto, elektrolüminessent və başqa xassələri bir sıra işlərdə tədqiq olunmuşdur [1-7]. Buna baxmayaraq MnIn₂S₄ monokristallarında mənfi müqavimətli oblast olan aşırma effekti haqqında elmi ədəbiyyatda demək olar ki, məlumat yoxdur.

Təqdim olunan iş MnIn₂S₄ monokristalları əsasında hazırlanmış metal- yarımqeçirici-metal strukturlarında aşırma effektinin tədqiqinə həsr olunmuşdur.

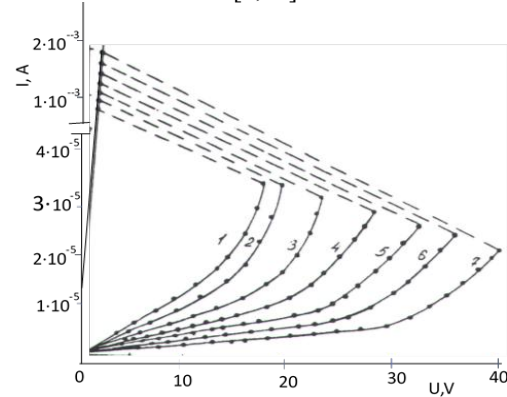
TƏCRÜBÜ HİSSƏ

MnIn₂S₄ monokristalları bərk cisim reaksiyası üsulu ilə alınmışdır. Monokristalların alınması üçün optimal rejim t₁ (850°C) -t₂(750°C) temperatur fərqi olmuşdur. Yodun miqdarı və təcrübələrin müddəti uyğun olaraq 5mq/sm³ və 5 gün olmuşdur. Rentgen analizi alınmış monokristalların kub quruluşu malik olmasını göstərmişdir(fəza qrupu Fd3m), qəfəs parametrləri a=10,71Å. Omik elektrodlar qismində indium (In) götürülmüşdür. İn- MnIn₂S₄ -İN strukturu sendviç şəklində hazırlanmışdır. Elektrodlar arasındakı məsafə (d) 50-1000mkm intervalda dəyişmişdir.

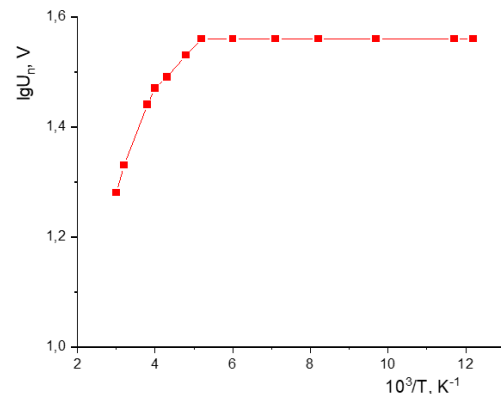
NƏTİCƏLƏR VƏ MÜZAKİRƏ

Müxtəlif temperatur intervalında (77÷360K) İn- MnIn₂S₄ -İN strukturunun şəkil 1-də verilmiş voltamper xarakteristikalarında bir neçə oblastın olması müəyyən edilmişdir. Belə ki, kiçik gərginliklərdə nümunədən keçən cərəyan Om qanununa tabe olur. Gərginliyin tədricən artması nəticəsində Om qanunu pozulur və gərginlik müəyyən hədd qiymətinə (U_{həd}) çatanda nümunə sıçrayışla yüksəkölü haldan aşağıölü hala keçir ki, bu halda uzun müddət saxlayır, yəni nümunədə mənfi müqavimətli S tipli oblast yaranır. Aşırma hadisəsi zamanı nümunənin müqaviməti 3 tərtib azalır. Nümunəni

əvvəlki halına qaytarmaq üçün ona qısamüddətli elektrik impulsu ilə yaxud istiliklə təsir etmək olar. VAX-ın gedişi müşahidə olunan hadisənin əvvəli elektron, sonrası isə (S tipli aşırma effekti) istilik effekti ilə bağlı olmasından xəbər verir [9,10].



Şəkil 1. İn- MnIn₂S₄ -İN strukturunun müxtəlif temperaturalarda VAX (K): 1-360, 2-346, 3-320, 4-287, 5-239, 6-125, 7-77.

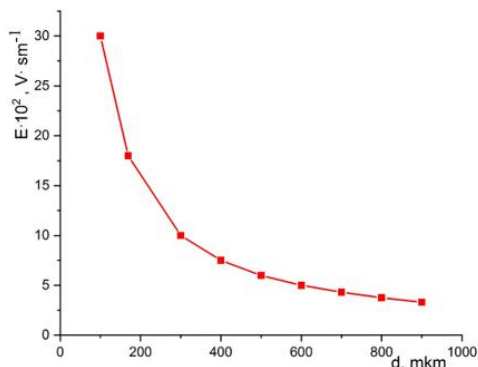


Şəkil 2. İn- MnIn₂S₄ -İN strukturunda hədd gərginliyinin temperaturdan asılılığı.

Şəkil 1-dən görüldüyü kimi temperatur azaldıqca hədd gərginliyi artır, hədd cərəyanı isə azalır.

Şəkil 2 -də lgU_{həd} -in 10/T-dən asılılığı verilmişdir. 77÷190K oblastda gərginlik həddi demək olar ki, temperaturdan asılı deyil (əyrinin 1-ci hissəsi),

190÷360K intervalında isə bu asılılıq kifayət qədərdir (əyrinin 2 və 3-cü hissəsi).



Şəkil 3. In- MnIn₂S₄ -in strukturunda həddgərginliyinin nümunənin qalınlığından asılılığı.

Əyrinin (2) və (3) hissələrindən aşırma effektinə cavabdeh olan tələlərin aktivasiya enerjisi 0,11 eV və 0,063eV olaraq tapılmışdır ki, bu da termostimullaşdırılmış depolyarizasiyadan təyin edilmiş qiymətlərlə üst-üstə düşür [1-4].

Gərginlik həddinin nümunənin qalınlığından (d) asılılıq qrafikindən (şəkil 3) bu asılılığın tərs mütənəsb olduğu görünür, bu da aşırma effektinin elektron-istilik mexanizmini bir daha təsdiqləyir.

Beləliklə hazırlanmış In- MnIn₂S₄ -in strukturunda aşırma effekti aşqar edilmiş və göstərilmişdir ki, bu hadisə həm elektron, həm də istilik prosesləri hesabına baş verir.

- [1] *H.N. Niftiyev.* Термостимулированные токи в монокристаллах MnIn₂S₄. ФТП, 2002, т. 36, в. 7, с. 836-837.
- [2] *H.N. Niftiyev, O.B. Tagiev.* Вольтамперные характеристики монокристаллов MnIn₂S₄ и MnGa₂S₄. ФТП, 2004, т. 38, в. 2, с.164-165.
- [3] *H.N. Niftiyev.* Электрические свойства монокристаллов MnIn₂S₄. ФТП, 2004, т. 38, в. 2, с.166-167.
- [4] *N.N.Niftiyev, O.B.Tagiyev.* MnIn₂S₄ və MnGaInS₄ monokristallarında termostimullaşmış depolyarizasiya səbəyanları. Fizika, AMEA, 2005, с. XI, № 3, s.10-11.
- [5] *H.N.Niftiyev, O.B.Tagiev.* Влияние освещения на вольтамперные характеристики и электропроводность монокристаллов MnIn₂S₄. Письма в ЖТФ, 2005, т. 31, в. 19, с. 72-75.
- [6] *H.Niftiyev, O.B.Tagiev.* Энергетические уровни в монокристаллах MnGa₂S₄, MnIn₂S₄ и MnGaInS₄. АМЕА xəbərləri, Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya, Bakı, 2007, с. XXVII, №. 2, s. 123-125.
- [7] *N.N. Niftiyev, O.B.Tagiyev, M.B.Muradov, F.M. Məmmədov, T.Ş.Həşimova.* FeGa₂S₄ kristalının dielektrik xassələri. АМЕА, xəbərləri, Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya, 2007, с. XXVII, № 5, s. 84-86
- [8] *H.N. Niftiyev, O.B. Tagiev,* Влияние сильного электрического поля на электропроводность монокристаллов MnGa₂S₄, MnIn₂S₄ и MnGaInS₄. ФТП, 2009, т. 43, в. 9, с. 1172-1174.
- [9] *И.Н.Бурнейка, А.А. Чеснок.* К вопросу о тепловом переключении в полупроводниках. Литовский физич. Сборник, 1975, 15, №6, с.935-941.
- [10] *Э.Г.Коснов.* О механизме переключения в тонкопленочной системе МДМ. Изв. высш. учебных заведений. Физика, 1971, №4, 63, с.105-109.

O.B. Tagiyev, T.Sh. Ibragimova, F.A. Kazymova, G.S. Hadjiyeva, E.G. Asadov

INVESTIGATION OF THE SWITCHING EFFECT IN MnIn₂S₄ SINGLE CRYSTALS

MSM (metal-semiconductor-metal) structures based on MnIn₂S₄ single crystals were fabricated and their current-voltage characteristics were studied in the temperature range 77÷360K. The presence on the characteristics of the region with the fulfillment of Ohm's law, a sharp increase in current and a region with differential negative resistance was revealed. It is shown that the switching effect is caused by both electronic and thermal processes. The activation energies of the traps responsible for switching have been determined.

O.B. Тагиев, Т.Ш. Ибрагимова, Ф.А. Казымова, Г.С. Гаджиева, Е.Г. Асадов

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ MnIn₂S₄

Изготовлены МПМ (метал-полупроводник-металл)- структуры на основе монокристаллов MnIn₂S₄ и в области температур 77÷360K исследованы их вольтамперные характеристики. Выявлено наличие на характеристиках области с выполнением закона Ома, резкого роста тока и области с дифференциальным отрицательным сопротивлением. Показано, что эффект переключения вызван как электронными, так и тепловыми процессами. Определены энергии активации ловушек, ответственных за переключение.

PEROVSKİTƏBƏNZƏR LAYLI $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ BİRLƏŞMƏSİNDƏ YÜKSƏK TƏZYİQLƏRDƏ FAZA KEÇİDLƏRİ

A.G. ASADOV^{1,2}, A.İ. MAMMADOV¹, D.P. KOZLENKO², S.E. KİCHANOV²,
R.Z. MEHDİYEVA¹, E.V. LUKİN², O.N. LİS², A.V. RUTKAUSKAS²,
E.R. HÜSEYNOVA¹, X.İ. ƏHMƏDOV¹

¹ *Institute of Physics, Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan,
131, H. Javid ave., Baku, AZ 1143*

² *Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, 141980 Dubna, Russia.
asifasadov@jinr.ru (99412)5372292*

Perovskitəbənzər laylı $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ birləşməsinin kristal strukturuna və vibrasiya spektrlərinə yüksək təzyiğin təsiri rentgen şüalarının difraksiyası və Raman spektroskopiyasından istifadə etməklə 30 GPa-a qədər təzyiqlərdə tədqiq edilmişdir. Birləşmənin kristal quruluşu otaq temperaturunda və ətraf mühit təzyiqində neytron difraksiyasının köməyi ilə ölçüldü. $P=17,3$ GPa-da $P2_1$ simmetriyasının ilkin monoklinik fazasından $P2$ simmetriyasının monoklinik fazasına faza keçidi müşahidə edilmişdir. $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -də təzyiğin yaratdığı faza keçidləri vahid hüceyrə parametrlərinin təzyiqdən asılılıqlarında, eləcə də vibrasiya rejimlərində anomaliyalarla müşayiət olunur. Şəbəkə parametrlərinin, vahid hüceyrə həcmnin və vibrasiya tezliklərinin barik asılılıqları əldə edilmişdir; $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin ilkin və təzyiqlə bağlı fazaları üçün bulk modulları hesablanmışdır.

Açar sözlər: Faza keçidləri, kiçik bucaq altında səpilmə, $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ birləşməsinin kristal strukturuna, Raman səpilməsi.
PACs: 81.15.-z; 81.15.Rs; 81.20.Fw; 81.40.Tv; 68.37.Hu; 68.55-

GİRİŞ

Nadir torpaq elementlərinin titanitləri mühəndislik və texnoloji cihazlarda geniş tətbiqi sayəsində elmi ictimaiyyətin marağına səbəb olur [1-4]. Bilinən dielektrik, ferroelektrik və piezoelektrik xassələri bu materialları kimya və material istehsalı, avtomobil və elektrik enerjisi sənayesində sensorlar və aktuatorlar üçün perspektivli edir [4,5]. Bundan əlavə, laylı titanitlərin yanacaq elementləri və enerjiyə çevrilmə texnologiyaları üçün material kimi istifadə perspektivləri var [6].

$\text{Pr}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, $\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$, $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$, $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ kimi ümumi düsturu $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$ olan kompleks ferroelektrik materiallar, Kürü temperaturlarının həddindən artıq yüksək olması səbəbindən yaxşı tanınır [5]. Maraqlıdır ki, nadir torpaq elementləri olan titanatlar nadir torpaq elementlərinin kation radiusundan asılı olaraq üç struktur tipə malikdirlər bunlar [1]: Flüorit, piroxlor və perovskitəbənzər laylı strukturlardır [7]. $\text{Eu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ və $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ titanatlar piroxlorlar olduğu halda, $A = \text{La}^{3+}$, Ce^{3+} , Nd^{3+} , Pr^{3+} ionları olan $\text{A}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ sistemləri [1-3, 8-10] qeyri-mərkəzli monosimmetrik olmayan mürəkkəb perovskitəbənzər laylı struktur əmələ gətirir [11]. $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin bu struktur növü son dərəcə yüksək Kürü nöqtəsi $T_c = 1461^\circ\text{C}$ olan ferroelektrik vəziyyətə malikdir [12]. TiO_6 oktaedrlərinin düzülüşü və onların qarşılıqlı orientasiyası kristal quruluşu ferroelektrik olan maddələrdə əhəmiyyətli rol oynayır [13]. Perovskitəbənzər laylı birləşmələrin piezoelektrik xassələri xüsusilə, $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ və analogi titanatlarda ferroelektriklik halının sabitliyi sintez şəraitinin dəyişməsi [14] və ya yüksək temperaturun və ya təzyiğin təsiri [15] nəticəsində yaranan kristal struktur dəyişikliklərindən asılıdır [9]. Son dövrdə 773 K temperaturda [8] $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin $\text{Cmc}2_1$ fazasına faza keçidi bildirilmişdir bu keçiddə La atomlarının qarşılıqlı yerdəyişmələri və TiO_6 oktaedrlərinin fırlanmaları [12] və bundan əlavə, 1773 K daha yüksək temperaturda Cm

cm fəza qrupu ilə ortoromb fazaya faza keçidi müşahidə edilmişdir [3, 8, 16]. Maraqlıdır ki, bu faza keçidlərinin təkamülü $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ titanatlarının kimyəvi sintezinin xüsusiyyətlərindən çox asılıdır [14].

$\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ birləşməsində temperaturun yaratdığı struktur faza keçidləri kifayət qədər təfərrüatlı şəkildə öyrənilsə də, bu materialın kristal strukturuna yüksək təzyiğin təsiri hələ də az araşdırılmışdır [8, 16]. Əvvəllər $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -də təzyiqlə induksiya olunan faza keçidi $16,7\text{ GPa}$ -da aşkar edilmişdi [9]. Müəyyən edilmişdir ki, $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin yüksək təzyiq fazası TiO_6 oktaedrlərinin əyilməsinin modifikasiyası ilə müşayiət olunur və bu ilkin monoklinik fazanın simmetriyasının dəyişməsi ilə nəticələnə bilər [2]. $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ laylı ferroelektrik materialın kristal quruluşunun təzyiğin yaratdığı faza keçidi üzərində təkamülünü daha ətraflı öyrənmək üçün biz 30 GPa -a qədər təzyiqlərdə rentgen şüalarının difraksiyası və Raman spektroskopiyası təcrübələrini həyata keçirdik. Bundan əlavə, ətraf mühit şəraitində $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin kristal quruluşunun xarakterizə edilməsi üçün neytron difraksiya üsulundan istifadə edilmişdir.

$\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ nümunəsinin sintezi üçün əvvəllər təsvir edilmiş kimi minerallaşma polimerləşən kompleks maddədən istifadə edilmişdir [17]. İlkin komponentlər kimi tetrabutil titanat ($\text{C}_{16}\text{H}_{36}\text{O}_4\text{Ti}$), etilen qlikol ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2$), limon turşusu ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$) və lantan nitrat ($\text{La}(\text{NO}_3)_3 \times 6\text{H}_2\text{O}$) istifadə edilmişdir [14]. Qeyd etmək lazımdır ki, sintez proseduru zamanı titan mənbəyinin seçilməsi $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin başqa bir ortoromb $\text{Pna}2_1$ fazasının yaranmasına səbəb ola bilər [14].

$\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin ətraf mühit şəraitində kristal quruluşu neytron difraksiya üsulu ilə tədqiq edilmişdir ki, bu da yüngül oksigen atomlarının koordinatlarını rentgen şüaları ilə müqayisədə xeyli dəqiqliklə təyin etməyə imkan verir. Ölçmələr DN-6 difraktometri ilə IBR-2 yüksək axınlı impulsu reaktorda (FLNP JINR, Dubna, Rusiya) aparılmışdır [18]. Difraksiya nümunələri

$2\theta=90^\circ$. səpilmə bucağında toplanmışdır. $\lambda = 2 \text{ \AA}$ -da spektrometrin ayırdetmə qabiliyyəti bu bucaq üçün $\Delta d/d = 0,022$ -dir. Məlumat toplama vaxtı 20 dəqiqə ilə məhdudlaşdırılıb və nümunə həcmi təxminən 5 mm^3 hesablanıb. Neytron difraksiya məlumatları FullProf proqramından istifadə etməklə Rietveld metodu ilə təhlil edilmişdir [19].

Yüksək təzyiqli rentgen difraksiya təcrübələri SAXS/WAXS Xeuss 3.0 sistemindən (XENOCs, Qrenobl, Fransa) istifadə edilməklə hazırlanmışdır. Dalğa uzunluğu $\lambda = 0,71078 \text{ \AA}$ olan Mo Ka X-şüaları GeniX3D mənbəyi tərəfindən yaradılmışdır. Rentgen şüalarının difraksiya nümunələri Dectris Eiger 2R 1M detektorundan istifadə etməklə toplanmışdır.

Raman spektrləri He-Ne lazerindən yayılan 633 nm dalğa uzunluqlu, 100 \mu m konfokal çuxurlu və $\times 50$ obyektiv ilə LabRAM HR spektrometridən (Horiba Gr, Lyon, Fransa) istifadə edərək toplanılıb.

Ətraf mühitin temperaturu və 30 GPa -a qədər təzyiqlərdə rentgen şüalarının difraksiyası və Raman spektroskopiyası ölçmələrində Almax Plate tipli almaz anvil qəfəsindən istifadə edilmişdir. 250 \mu m -lik kuletləri olan almazlardan istifadə edilmişdir. Nümunə təxminən 50 \mu m qalınlıq üçün nəzərdə tutulmuş Re gasgetdə hazırlanmış 150 \mu m diametrlili dəliyə yüklənmişdir. Təzyiq yaqut flüoresensiya texnikası ilə müəyyən edilmişdir [20].

$\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ birləşməsinin ətraf mühit şəraitində ölçülən neytron difraksiya sxemi şəkil 1-də göstərilmişdir. Neytron difraksiya məlumatlarının təsviri üçün əvvəllər təklif edilmiş [9] monoklinik P21, P2, Pm, P2/m və ortoromb Cmc21 struktur modelləri yoxlanılmışdır. Gözlənilməli kimi [5], P21 fəza qrupu ilə verilmiş struktur model eksperimental məlumatların ən yaxşı şəkildə təsvirini təmin edir. Tədqiq olunan $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ nümunəsində əlavə defekt fəzaları aşkar edilməmişdir.

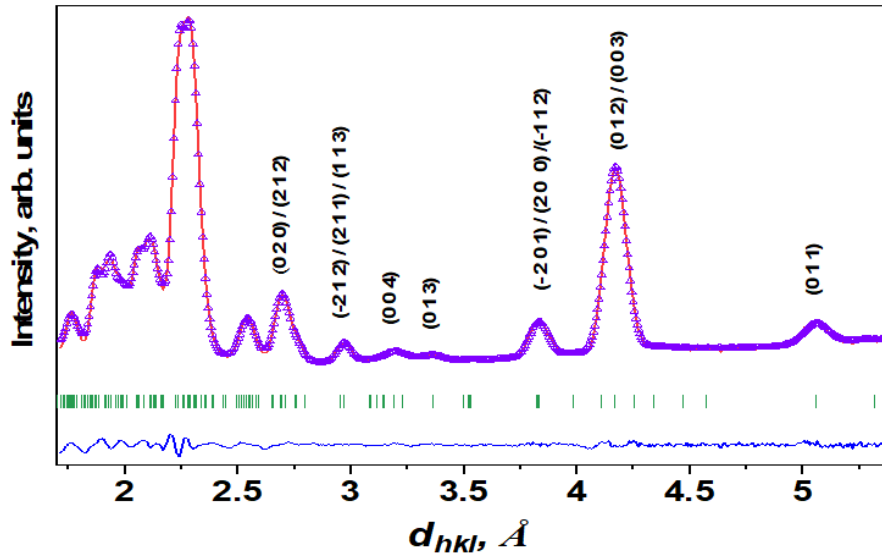
$a = 7,752(4) \text{ \AA}$, $b = 5,510(2) \text{ \AA}$, $c = 12,962(3) \text{ \AA}$, $\beta = 98,7(2)^\circ$ qəfəs parametrlərinin hesablanmış qiymətləri ədəbiyyatla tam uyğunlaşmışdır [12]. Struktur parametrlərin əldə edilmiş məlumatları Cədvəl 1-də verilmişdir.

Cədvəl 1.

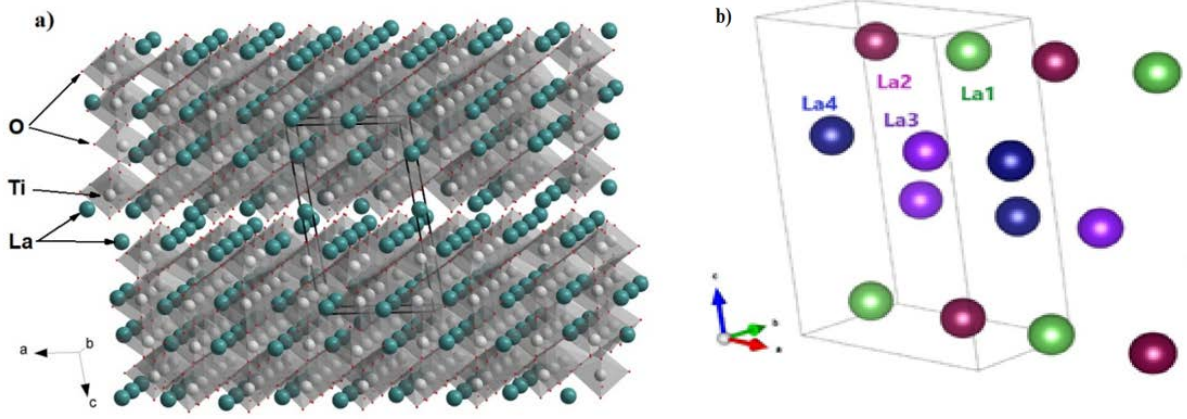
Neytron difraksiyası məlumatlarına əsasən $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin monoklinik fazasının atom koordinatları.

Atom	x	y	z
La1	0.2615(8)	0.2992(8)	0.1067(5)
La2	0.7877(7)	0.293(4)	0.1086(7)
La3	0.3211(3)	0.8386(4)	0.388(1)
La4	0.8647(2)	0.8520(5)	0.3820(9)
Ti1	0.0653(3)	0.7370(9)	0.1288(7)
Ti2	0.5129(7)	0.7598(9)	0.1272(4)
Ti3	0.0883(6)	0.2480(1)	0.3152(1)
Ti4	0.5761(9)	0.2735(1)	0.3141(3)
O1	0.7714(6)	0.7866(6)	0.0930(5)
O2	0.2697(3)	0.7152(4)	0.0784(8)
O3	0.0166(4)	0.0243(4)	0.0160(6)
O4	0.4744(7)	0.0366(7)	0.0154(2)
O5	0.0856(3)	1.0057(3)	0.2338(3)
O6	0.5254(4)	0.9684(1)	0.2353(2)
O7	0.0325(3)	0.4843(2)	0.2041(9)
O8	0.5661(3)	0.443(9)	0.1856(6)
O9	0.1001(4)	0.5517(3)	0.4119(1)
O10	0.6070(8)	0.5721(7)	0.4001(9)
O11	0.1209(7)	0.063(3)	0.4401(3)
O12	0.6002(2)	0.0763(4)	0.4347(1)
O13	0.3252(1)	0.3023(4)	0.3052(8)
O14	0.8110(9)	0.2315(1)	0.2995(1)

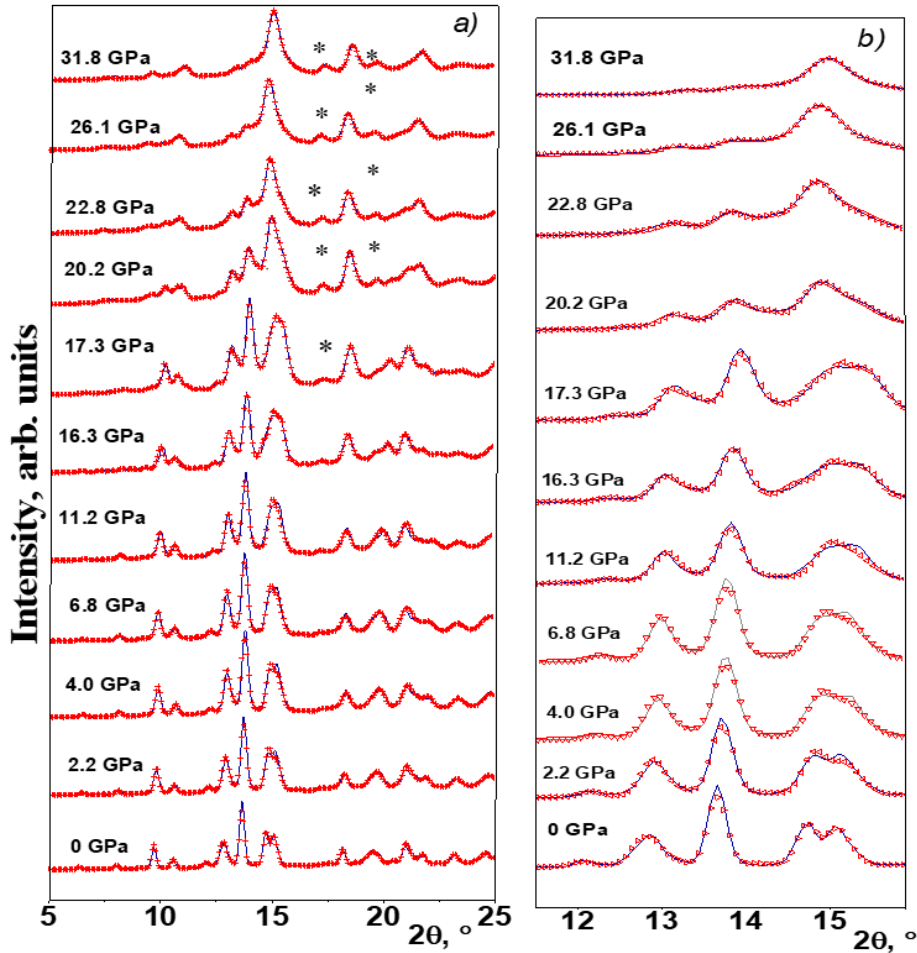
$\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ və nadir torpaq ionlarının mövqelərinin ilkin monoklinik fazasının sxematik kristal quruluşu müvafiq olaraq şəkil 2a və 2b-də göstərilmişdir.



Şəkil 1. Ətraf mühit şəraitində ölçülən və Rietveld üsulu ilə dəqiqləşdirilmiş $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin neytron difraksiya nümunələri. Eksperimental nöqtələr, hesablanmış profilər və fərq əyrisi göstərilir. Gənələr P21 fəza qrupu ilə monoklinik fazaya uyğun gələn difraksiya zirvələrinin hesablanmış mövqelərini təmsil edir. Bir neçə difraksiya zirvəsinin göstəriciləri verilmişdir.



Şəkil 2. a) $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ birləşməsinin monoklinik P21 kristal quruluşunun sxematik təsviri. Lantan, titan və oksigen atomları işarələnmişdir. b) $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin kristal strukturundakı lantan ionlarının düzülüşü. Kristaloqrafik oxların istiqaməti göstərilmişdir.



Şəkil 3. a) $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin seçilmiş təzyiqlərdə və ətraf mühitin temperaturunda ölçülən rentgen şüalarının difraksiya nümunələri. b) Seçilmiş təzyiqlərdə və ətraf mühitin temperaturunda ölçülən $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ rentgen şüalarının difraksiya nümunələrinin böyüdülmüş bölgəsi. Eksperimental nöqtələr və hesablanmış profillər göstərilir. '*' işarələri yüksək təzyiq hüceyrəsinin Renum gasgetinin əlavə zirvələrini göstərir.

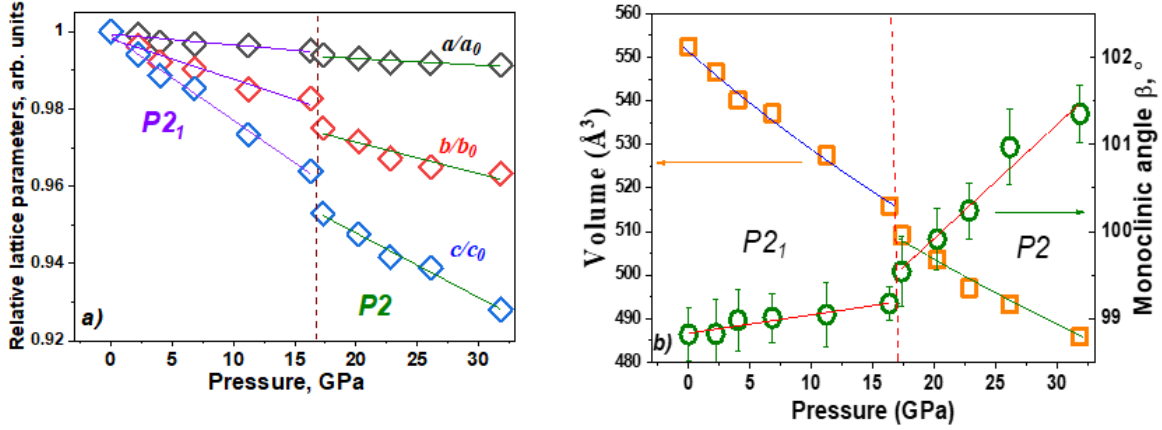
Seçilmiş təzyiqlərdə və ətraf mühitin temperaturunda ölçülən $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin rentgen şüalarının difraksiya nümunələri şəkil 3-də göstərilmişdir. Aşağı və orta təzyiqlərdə onlar P21 simmetriyasının monoklinik kristal quruluşuna uyğun gəlir. $P > 16,3$ GPa-da $2\theta \sim 6,4^\circ$ -də yerləşən bir neçə yeni difraksiya zirvəsi; $7,5^\circ$ və $9,4^\circ$; aşkar edilmişdir (şəkil 3), eyni zamanda, $2\theta \sim 8,0^\circ$ -da

əks; $9,7^\circ$; $21,0^\circ$ yox olur. Digər difraksiya zirvələrinin nisbi intensivliyində əhəmiyyətli dəyişikliklər aşkar edilmişdir. $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin şəbəkə parametrlərinin və vahid hüceyrə həcmının təzyiqdən asılılığı şəkil 4a və 4b-də göstərilmişdir. $P = 16,3$ GPa keçid təzyiqi ətrafında şəbəkə parametrlərinin struktur davranışında anomalialar, həmçinin monoklinik bucaq β (Şəkil 4b)

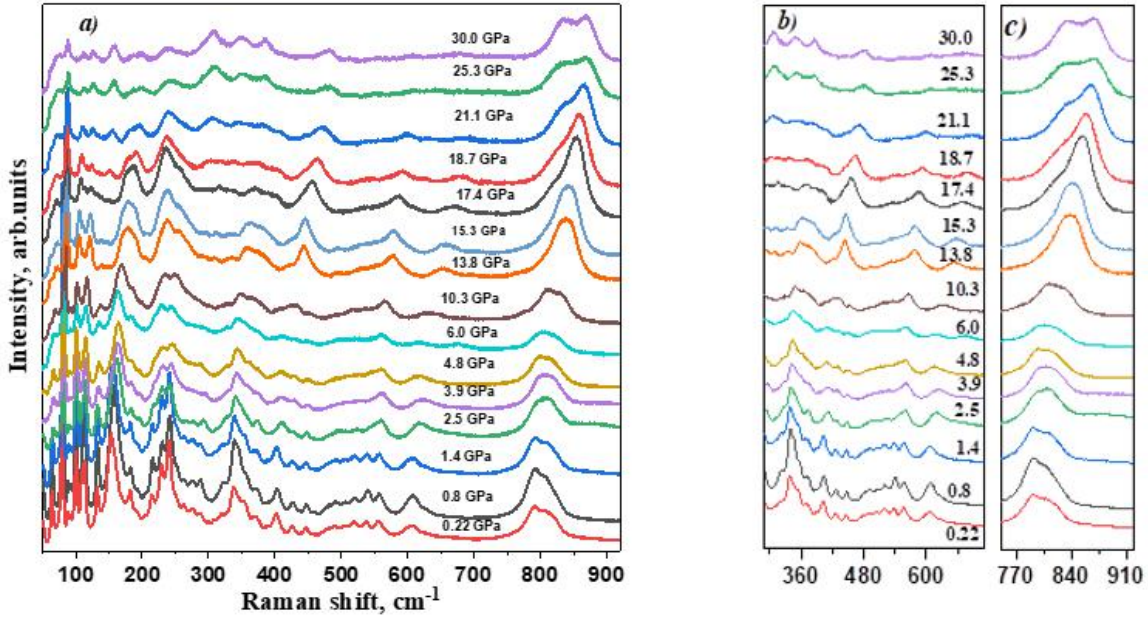
müşahidə edilmişdir. İlk monoklinik struktur modelindən istifadə edərək rentgen şüalarının difraksiya məlumatlarının keyfiyyətcə uyğunluğu əldə edilməmişdir. Digər tərəfdən, yeni zirvələrin görünüşü $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin kristal quruluşunun simmetriyasının dəyişməsi ilə struktur faza çevrilməsini nəzərdə tutur. Ağlabatan bir yanaşma olaraq, yüksək təzyiqli mərhələsi üçün aşağı simmetriyalı monoklinik P2 struktur modeli istifadə edildi və profil uyğunluğu metodu ilə sonrakı təhlilə nail olundu.

Faza çevrilməsi b və s parametrlərinin nəzərə çarpacaq dərəcədə kiçilməsi və monoklinik bucağın sıçra-

yışla artması ilə nəticələnir, parametrlər isə keçid nöqtəsinin yaxınlığında aşkar özəlliklər nümayiş etdirmir (şəkil 4a). $ka_i = -(1/a_{i0})(da_i/dP)/T$, $a_i = a, b, c$ şəbəkə parametrlərinin sıxılma qabiliyyəti $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin aşağı təzyiqli və yüksək təzyiqli fazası üçün hesablanmışdır. $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ və $k_{a2} = 0,00017(1) \text{ GPa}^{-1}$, k_{b2} aşağı təzyiqli fazası P21 üçün $k_{a1} = 0,00022(1) \text{ GPa}^{-1}$, $k_{b1} = 0,0010(1) \text{ GPa}^{-1}$, $k_{c1} = 0,0022(1) \text{ GPa}^{-1}$, $k_{b2} = 0,0008(1) \text{ GPa}^{-1}$, yüksək təzyiqli fazası P2 üçün $k_{c2} = 0,0017(2) \text{ GPa}^{-1}$ alınmışdır. Bu o deməkdir ki, daha az sıxılan b oxu ilə qəfəs sıxılma anizotropiyası yüksək təzyiqli fazası üçün qorunur.



Şəkil 4. a) $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin aşağı təzyiqli və yüksək təzyiqli fazaları üçün təzyiqli funksiyası kimi nisbi qəfəs parametrləri. b) $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin aşağı təzyiqli və yüksək təzyiqli fazaları üçün vahid hüceyrə həcminin təzyiqdən asılılığı və onların Birc-Murnaqan hal tənliyindən (1) istifadə edərək uyğunluğu və təzyiqdən asılı olaraq hər iki fazanın monoklinik bucağı β göstərilmişdir.



Şəkil 5. a) Müxtəlif təzyiqlərdə $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin Raman spektrləri. b) 370-680 sm^{-1} və c) 760-920 sm^{-1} regionlar üçün $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin Raman spektrlərinin böyüdülmüş hissələri.

Həcm sıxılma məlumatları (Şəkil 4a) üçüncü dərəcəli Birch-Murnaghan hal tənliyi ilə təchiz edilmişdir.

$$P = \frac{3}{2} B_0 \left(x^{-\frac{7}{3}} - x^{-\frac{5}{3}} \right) \left[1 + \frac{3}{4} (B' - 4) \left(x^{-\frac{2}{3}} - 1 \right) \right] \quad (1)$$

İlkin monoklinik P21 fazası üçün $B_0=183(4)$ GPa-da $B' = 5(1)$ və $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin təzyiçəsəbəb olan P2 fazası üçün sabit $B'=4(0)$ ilə $B_0 = 201(1)$ GPa. hesablanmışlar. Kütləvi modulun əldə edilən qiymətləri $B_0=121(23)$ GPa kimi hesablanan əvvəlkiyərdən daha yüksəkdir və ətraf mühit təzyiqində təzyiç kənarlaşması $B' = 18(5)$. Çox güman ki, bu, tədqiq olunan titanitlərin sintez yanaşmasındakı fərqlərlə bağlıdır [14]. Digər tərəfdən, əvvəlki tədqiqatlarda [9], vahid hüceyrə həcmindən asılılıqlar yüksək B' qiymətləri ilə təchiz edilmişdir ki, bu da son nəticəyə təsir edə bilər.

Seçilmiş təzyiqlərdə və ətraf mühitin temperaturunda ölçülən $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin Raman spektrləri şəkil 5a-da göstərilmişdir. 50–490 cm^{-1} dalğa uzunluğu diapazonunda aşağı tezlikli vibrasiya rejimləri La–O vibrasiyalarına aid edilə bilər; təhrif olunmuş TiO_6 oktaedrinin vibrasiyası ilə əlaqəli 490–575 cm^{-1} diapazonunda rejimlər; Ti–O vibrasiyalarının simmetrik və asimmetrik dartılma rejimləri 785–814 cm^{-1} diapazonunda yerləşir [7]. $P > 15,3$ GPa təzyiqində Raman spektrlərində bir neçə dəyişiklik müşahidə edildi (Şəkil 5b və c), bu, rentgen şüalarının difraksiya nəticələrinə uyğun olaraq təzyiqlə idarə olunan fazanın yüksək təzyiqli P2 fazasına keçidinin göstəricisidir [9]. həmçinin son tədqiqatlar. Xüsusilə, $\sim 60 \text{ cm}^{-1}$ -də La–O vibrasiyalarının tək rejimi tədricən bir neçə zəif zirvəyə bölünür. 90–130 cm^{-1} dalğa sayı diapazonunda Raman xətlərinin yaxşı ayrılmış dubletinin intensivliyi kəskin şəkildə dəyişir və bir neçə zirvəyə bölünür. Raman xəttinin $\sim 160 \text{ cm}^{-1}$ -də tədricən

genişlənməsi və sonradan təxminən 21,1 GPa təzyiqlərdə yoxa çıxması müşahidə edilmişdir. 200–260 cm^{-1} dalğa diapazonunda dubletdə bir neçə dəyişiklik aşkar edilmişdir. Bundan əlavə, bir neçə Raman spektral xəttinin itməsi müşahidə edilmişdir (şəkil 5b). $\sim 820 \text{ cm}^{-1}$ də dubletdə aydın intensivliyin yenidən bölüşdürülməsi yüksək təzyiqlərdə aşkar edilmişdir (şəkil 5c). Bu təsir təhrif olunmuş TiO_6 oktaedrinin simmetriyası ilə bağlı ola bilər [2]. Ola bilsin ki, Raman spektrlərindəki dəyişikliklər $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin ilkin aşağı təzyiç fazasında struktur qeyri-sabitliyini aşkar edir ki, bu da bu birləşmədə ferroelektrik fazanın yox olmasına səbəb ola bilər [9].

$\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin seçilmiş vibrasiya rejimlərinin təzyiçdən asılılıqları şəkil 6-da göstərilmişdir. Müşahidə olunan rejimlərin tezlikləri sıxılma zamanı artır, lakin onların təzyiçdən asılılıqlarında nəzərəcarpacaq anomaliyalar aşağı təzyiç P21-dən yüksək təzyiç fazasına struktur faza keçidlərinin yaxınlığında aydın şəkildə aşkar edilmişdir. $P \sim 15,3$ GPa-da P2.

Nəticələrimiz göstərir ki, perovskitəbənzər laylı $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ferroelektrikdə təzyiçin yaratdığı struktur faza keçidi $P \sim 17$ GPa yüksək təzyiqlərdə inkişaf edir. Eksperimental məlumatlara əsasən, ehtimal edilir ki, faza keçidi P2₁ simmetriyasının ilkin monoklinik fazasından P2 simmetriyasının monoklinik fazasına baş verir və bu, TiO_6 oktaedrlərinin struktur təhrifləri və lantan ionları təbəqələrinin topologiyasının dəyişməsi ilə müşayiət olunur. Güman edirik ki, $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -də ferroelektrik fazanın itməsi təzyiqlə idarə olunan faza keçidi zamanı baş verir.

-
- [1] Z. Gao et al. "Origin of the phase change from pyrochlore to perovskite-like layered structure and a new lead free ferroelectric." Society, vol. 92, no. 10, pp. 2270–2275, Oct. 2009, doi: 10.1111/j.1551-2916.2009.03209.x.
- [2] F. X. Zhang, J. W. Wang, M. Lang, J. M. Zhang, and R. C. Ewing. "Pressure-induced structural transformations in lanthanide titanates: La_2TiO_5 and Nd_2TiO_5 ," J Solid State Chem, vol. 183, no. 11, pp. 2636–2643, Nov. 2010, doi: 10.1016/j.jssc.2010.09.014.
- [3] J. López-Pérez and J. Íñiguez. "Ab initio study of proper topological ferroelectricity in layered perovskite $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$," Phys Rev B Condens Matter Mater Phys, vol. 84, no. 7, Aug. 2011, doi: 10.1103/PhysRevB.84.075121.
- [4] H. Yan, H. Ning, Y. Kan, P. Wang, and M. J. Reece. "Piezoelectric ceramics with super-high curie points," Journal of the American Ceramic Society, vol. 92, no. 10, pp. 2270–2275, Oct. 2009, doi: 10.1111/j.1551-2916.2009.03209.x.
- [5] S. Nanamatsu, M. Kimura, K. Doi, S. Matsushita, and N. Yamada. "A new ferroelectric: $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$," Ferroelectrics, vol. 8, no. 1, pp. 511–513, Oct. 1973, doi: 10.1080/00150197408234143.
- [6] D. W. Hwang, J. S. Lee, W. Li, and S. H. Oh. "Electronic Band Structure and Photocatalytic Activity of $\text{Ln}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}$)," Journal of Physical Chemistry B, vol. 107, no. 21, pp. 4963–4970, May 2003, doi: 10.1021/JP034229N.
- [7] S.J. Patwe et al. "Structural and electrical properties of layered perovskite type $\text{Pr}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$: Experimental and theoretical investigations," J

- Mater Chem C Mater, vol. 3, no. 17, pp. 4570–4584, May 2015, doi: 10.1039/c5tc00242g.
- [8] *N. Ishizawa, F. Marumo, S. Iwai, M. Kimura, T. Kawamura, and IUCr.* “Compounds with perovskite-type slabs. V. A high-temperature modification of $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$,” urn:issn:0567-7408, vol. 38, no. 2, pp. 368–372, Feb. 1982, doi: 10.1107/S0567740882002994.
- [9] *F. X. Zhang et al.* “Structural change of layered perovskite $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ at high pressures,” J Solid State Chem, vol. 180, no. 2, pp. 571–576, Feb. 2007, doi: 10.1016/j.jssc.2006.11.022.
- [10] *H. W. Schmalle, T. Williams, A. Reller, A. Linden, and J. G. Bednorz.* “The twin structure of $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$: X-ray and transmission electron microscopy studies,” Acta Crystallographica Section B, vol. 49, no. 2, pp. 235–244, 1993, doi: 10.1107/S010876819200987X.
- [11] *F. Lichtenberg, A. Herrnberger, K. Wiedenmann, and J. Mannhart.* “Synthesis of perovskite-related layered $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2} = \text{ABO}_X$ type niobates and titanates and study of their structural, electric and magnetic properties,” 2001. [Online]. Available: www.elsevier.nl/locate/pssc
- [12] *Z. Gao and X. Ce Ti.* “Perovskite-Like Layered Structure $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$ Ferroelectrics and Solid Solutions.”
- [13] *J. Alanis et al.* “High-pressure structural change in the ferroelectric layered perovskite $\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$,” Phys Rev B, vol. 100, no. 5, Aug. 2019, doi: 10.1103/physrevb.100.054110.
- [14] *Z. Li, G. Chen, X. Tian, and Y. Li.* “Photocatalytic property of $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ synthesized by the mineralization polymerizable complex method,” Mater Res Bull, vol. 43, no. 7, pp. 1781–1788, Jul. 2008, doi: 10.1016/j.materresbull.2007.07.010.
- [15] *P. Sivagnanapalani, N. I. Ansari, and P. K. Panda.* “ $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ (NTO) with high curie temperature (TC) for high temperature sensor applications,” Sensors International, vol. 2, Jan. 2021, doi: 10.1016/j.sintl.2021.100093.
- [16] *G. Herrera, J. Jiménez-Mier, and E. Chavira.* “Layered-structural monoclinic-orthorhombic perovskite $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ to orthorhombic LaTiO_3 phase transition and their microstructure characterization,” Mater Charact, vol. 89, pp. 13–22, Mar. 2014, doi: 10.1016/j.matchar.2013.12.013.
- [17] *H. G. Kim, D. W. Hwang, S. W. Bae, J. H. Jung, and J. S. Lee.* “Photocatalytic Water Splitting over $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ Synthesized by the Polymerizable Complex Method,” Catalysis Letters 2003 91:3, vol. 91, no. 3, pp. 193–198, Dec. 2003, doi: 10.1023/B:CATL.0000007154.30343.23.
- [18] *D. Kozlenko, S. Kichanov, E. Lukin, and B. Savenko.* “The DN-6 Neutron Diffractometer for High-Pressure Research at Half a Megabar Scale,” Crystals 2018, Vol. 8, Page 331, vol. 8, no. 8, p. 331, Aug. 2018, doi: 10.3390/CRYST8080331.
- [19] *J. Rodríguez-Carvajal and J. Rodríguez-Carvajal.* “Introduction to the Program FULLPROF: Refinement of Crystal and Magnetic Structures from Powder and Single Crystal Data Various Scientific Software Development View project Introduction to the Program FULLPROF: Refinement of Crystal and Magnetic Structures from Powder and Single Crystal Data”, Accessed: Oct. 21, 2022. [Online]. Available: <https://www.researchgate.net/publication/267375610>
- [20] *J. C. Chervin, B. Canny, and M. Mancinelli.* “Ruby-spheres as pressure gauge for optically transparent high pressure cells,” <https://doi.org/10.1080/08957950108202589>, vol. 21, no. 6, pp. 305–314, 2006, doi: 10.1080/08957950108202589.

TlGaSe₂<Pr> KRİSTALLARININ OPTİK XASSƏLƏRİ

P.H. İSMAYILOVA, N.Z. HƏSƏNOV, A.A. HACIYEVA,
S.S. ABDİNBOYOV, X.Ş. VƏLİBOYOV

Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutu, Bakı, Azərbaycan
e-mail: p.ismayilova@physics.science.az

Nadir torpaq elementi praseodimiumun 0÷2 mol% konsentrasiyası ilə aşqarlanmış keyfiyyətli TlGaSe₂ kristallarının sintezi və yetişdirilməsi texnologiyası işlənmişdir. 77-300 K temperatur intervalında TlGaSe₂<Pr> monokristallarında optik udulma tədqiqatları aparılmışdır. TlGaSe₂<Pr> laylı yarımkeçirici kristalların optik udulma spektrinin analizi optik udulma sərhədində düz (E_{gd}) və çəp (E_{gi}) keçidlərin enerjilərinin temperaturdan asılılıqlarını təyin etməyə imkan vermişdir. 77 K-də TlGaSe₂ və TlGaSe₂<2%Pr> üçün düz və çəp keçidlərin qiymətləri uyğun olaraq 2,192; 2,13 eV və 2,141; 2,093 eV-dur.

Açar sözlər: xalkogenidlər, optik udma kənarı, nadir torpaq elementi, praseodimium, düz və çəp qadağan zonalar.

PACS: 61.50.Ks, 77.80.Bh

GİRİŞ

Son illər bir və iki ölçülü sistemlər fizikasına maraq artmışdır. Bu onların müasir mikroelektronikada geniş tətbiq olunan unikal xüsusiyyətlərinin mövcudluğu ilə bağlıdır. Belə sistemlərə A^{III}B^{III}C^{VI}₂ qrupuna daxil olan TlGaSe₂, TlInSe₂ və TlInS₂ kristalları daxildir. TlGaSe₂ yarımkeçirici birləşməsinin fiziki xassələri ədəbiyyatda kifayət qədər geniş təqdim edilmişdir [1, 2]. TlGaSe₂ yaxın İQ oblastda optik şəffaflığı, yaddaş effekti, yüksək foto və rentgen həssaslığı kimi maraqlı fiziki xüsusiyyətlərə malikdir [3, 4].

TlGaSe₂ kristalları elementar qəfəs parametrləri $a = 10,779(2) \text{ \AA}$, $b = 10,776(1) \text{ \AA}$, $c = 15,663(5) \text{ \AA}$, $\beta = 99,993(6)^\circ$, fəza qrupu C2/c, $Z = 16$ olan monoklin sinqoniyada kristallaşır [5]. Hər bir kristal layın güclü kovalent əlaqəyə malik [GaSe₄] tetraedrik düyünlərdən ibarət olması, laylar arasındakı zəyif van-der-vaals əlaqəsi, kristalın fiziki xassələrinin güclü anizotropluğuna və böyük ehtimalla kristalın strukturunda qüsurların yaranmasına gətirib çıxarır. Elementar qəfəsin [001] istiqaməti boyunca laylar bir-birinə nəzərən 90° burularaq üçbucaqlı prizma boşluqları yaradırlar. Tl⁺ kationları bu boşluqlarda yerləşərək müxtəlif layları birləşdirir.

Müasir yarımkeçiricilər fizikasının mühüm vəziyyətlərindən biri artıq məlum olan maddələrə dopinglər, aşqarlar vurmaqla, onların əsasında yaranan bərk məhlulların faydalı fiziki xassələrinin idarə olunmasıdır. Aşqarlar və dislokasiyalar yarımkeçirici kristalların xüsusiyyətlərinə nəzərən çarpacaq dərəcədə təsir göstərir və bəzən yeni fiziki effektlərin yaranmasına səbəb olur. Buna görə də, aşqarların daxil edilməsi yarımkeçiricilərin fiziki xassələrin dəyişməək üçün vacib praktiki üsuldür. Xüsusilə, son zamanlarda nadir torpaq elementləri (NTE) ilə A^{III}B^{III}C^{VI}₂ qrupunun kristallarının doping edilməsinin perspektivli olduğu göstərilmişdir [6,7].

Ədəbiyyatda 200–2000 nm dalğa uzunluğu diapazonunda optik və fotoelektrik tədqiqatların nəticələri əsasında, TlGaSe₂ kristallarının düz və çəp keçidlər üçün qadağan zonanın eninin qiymətləri alınmışdır [3]. Göstərilmişdir ki, temperaturun 4,2–293 K və fotonun enerjisinin 30–150 sm⁻¹ oblastında optik udulma Urbax qanununa tabə olur.

[8]-də göstərilmişdir ki, 10–320 K temperatur intervalında təmiz və 0,1 mol% Pr-la aşqarlanmış

TlGaSe₂ monokristallarının optik udma sərhədi Urbax qaydasına tabə olur. Müəllif TlGaSe₂, TlGa_{0,999}Pr_{0,001}Se₂ üçün Urbax enerjisini və fononların enerjisini hesablamışdır. 320 K temperaturda TlGaSe₂ və TlGa_{0,999}Pr_{0,001}Se₂-də düz və çəp keçidlərin qadağan zonasının enini müvafiq olaraq 2,173 və 2,155 eV və 2,154 və 2,044 eV qiymətləndirmişdir. TlGaSe₂ üçün 180 və 210 K-də, TlGa_{0,999}Pr_{0,001}Se₂ üçün 140 K-də Urbax enerjisində kəskin dəyişiklik qeyd olunmuşdur ki, müəllif bu temperaturların faza keçid temperaturları ola biləcəyini hesab edir.

Qarşımıza qoyduğumuz əsas məsələ NTE praseodimium ilə 2 mol%-ə qədər konsentrasiyada doping olunmuş TlGaSe₂ kristallarının sintezi və yetişdirilmə texnologiyasının işlənməsi, alınmış TlGaSe₂<Pr>-nin optik xassələrinin tədqiqidir.

EKSPERİMENTAL HİSSƏ

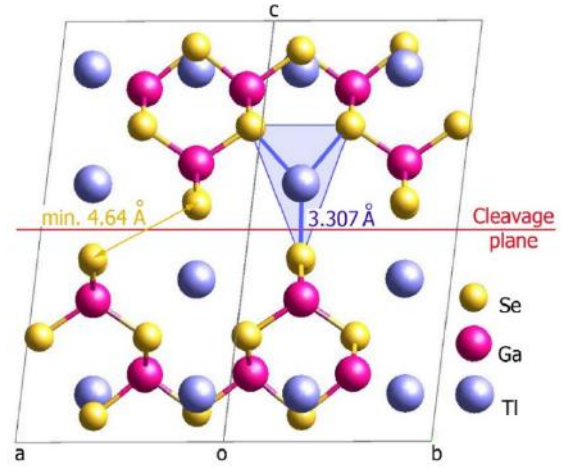
TlGaSe₂<Pr> (0÷2 mol%) birləşmələri yüksək təmizliyə malik (99,999%) ilkin elementlərin stexiometrik nisbətində 10⁻³ Pa təzyiqdə vakuuma qvars ampulada birbaşa əritmə yolu ilə sintez olunmuşdur. Ampula üfüqi vəziyyətdə uzunluğunun 2/3 hissəsi sobanın içərisində, digər hissəsi sobadan kənar qalmaqla yerləşdirilmişdir. Ampulanın üfüqi yerləşdirilməsi ərintinin səthini çoxaltmağa və bununla sintez prosesini sürətləndirməyə imkan verir. Ampulanın partlamasının qarşısını almaq üçün sobanın temperaturu 5 K/dəq sürətilə uçucu komponentin (Se) ərimə temperaturuna $T > 495 \text{ K}$ qədər tədricən qaldırılmışdır. Bir müddət (5-6 saat) bu temperaturda saxlama (tablama) bircins kristal almağa kömək edir. Adətən, tərkibində uçucu komponent olan mürəkkəb yarımkeçiricilərin sintezi zamanı ərinti qarışdırılır ki, bu da əriməkdə olan komponentlərin tam diffuziyası üçün vacibdir. Tablama prosesindən sonra sobanın temperaturu birləşmənin (TlGaSe₂) ərimə temperaturundan (1080 K-dən) yuxarı qaldırılır. Ərinti bu temperaturda 5 saat saxlanılır ki, kristalın qalıqları tam həll olunsun. Ampulanın kənar qalan hissəsinin temperaturu nisbətən aşağı olduğundan, uçucu komponent buxarlanaraq ampulanın soyuq divarına yapışır. Kondensə olunduqdan sonra yenidən yüksək temperaturu zonaya qayıdır ki, bu da daxili təzyiqin doymuş buxarın təzyiqinə qədər qalxmasına mane olur.

Sintezdən sonra polikristalların birfazlı olmaları RFA və mikrostruktur analizlə yoxlanılır.

Alınmış $TlGaSe_2<Pr>$ (0 ± 2 mol%) kristallarının rentgen difraktoqramları çəkilmişdir. Ölçmələr BRUKER XRD D2-PHASE cihazında aparılıb. Difraktoqramların təsnifatı və araşdırılması EVA və Topaz-4.2 proqramları vasitəsilə aparılıb. Difraktoqramların analizi tədqiq olunan maddələrin $TlGaSe_2$ birləşməsinin [5]-dəki qəfəs parametrlərinin olduğu kimidir. $GaSe_4$ tetraedrləri tərə nöqtələri ilə birləşərək iki ölçülü mürəkkəb konstruksiyalı sonsuz laylar formalaşdırır. $TlGaSe_2<Pr>$ -də bu laylar arasında van-der-vaals əlaqələri mövcud deyil, belə ki, iki qonşu lay arasındakı ən yaxın Se-Se məsafəsi $4,64 \text{ \AA}$ təşkil edir. Kristal formalaşdırın laylararası əlaqə isə Tl-Se ion tipli əlaqələridir. Hər bir Tl atomu altı Se atomu ilə triqonal prizma formalı koordinasiya malikdir. Bunlar quruluşun nisbətən zəif əlaqələridir və kristalların kifayət qədər asanlıqla laylara ayrılma bilməsinə səbəb olur. Şəkil 1-də $TlGaSe_2$ kristallarının quruluş fraqmenti, qırmızı xətlə isə laylanma müstəvisi (0 0 1) göstərilib [9].

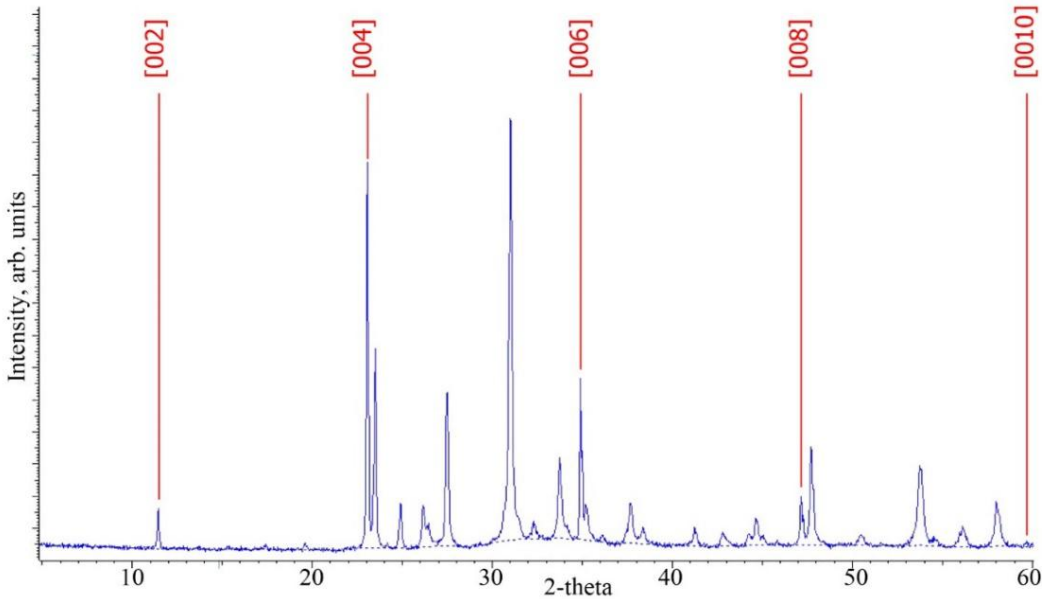
Aldığımız difraktoqramların müqayisəli analizi aşqarlanmanın difraksiya mənzərələrində vizual hiss olunacaq dəyişikliyə səbəb olmadığını qəstərdi. Amma diqər tərəfdən isə aşqarın miqdarı artdıqca kristalların laylara ayrılma xüsusiyyəti azaldığını, yəni keyfiyyətli səthlərin əldə olunmasının çətinləşdiyini müşahidə etdik. Kristal-kimyəvi məlumatlar əsasında Pr atomlarının quruluşda Ga atomlarının tetraedrlərində yerləşə bilməyəcəyini biz əvvəlcədən nəzərə almışdıq. Ga atomlarının tetraedrlərinin ölçülərinin Pr atomları üçün çox kiçik olduğunu nəzərə alaraq $Pr \rightarrow Ga$ əvəzləməsini mümkün hesab etmirik. Doğrudan da, bu günə qədər öyrənilmiş kristal quruluşlarında yüngül NTE üçün tetraedrik koordinasiya rastlanmayıb. Amma Tl atomlarının triqonal prizmaları isə Pr atomları üçün həm formaca xarakter, həm də ölçülərinə görə çox uyğundurlar

(şəkil 1). Belə əvəzləmə həm də kristalların laylanma xüsusiyyətinin zəifləməsinin səbəbini də izah edir. Belə ki, Tl^{1+} ionlarının Pr^{3+} ionları ilə əvəzlənməsi laylararası əlaqənin güclənməsinə səbəb olmalıdır. Şəkil 2-də $TlGaSe_2$ kristalın difraksiya mənzərəsi göstərilmişdir [9].

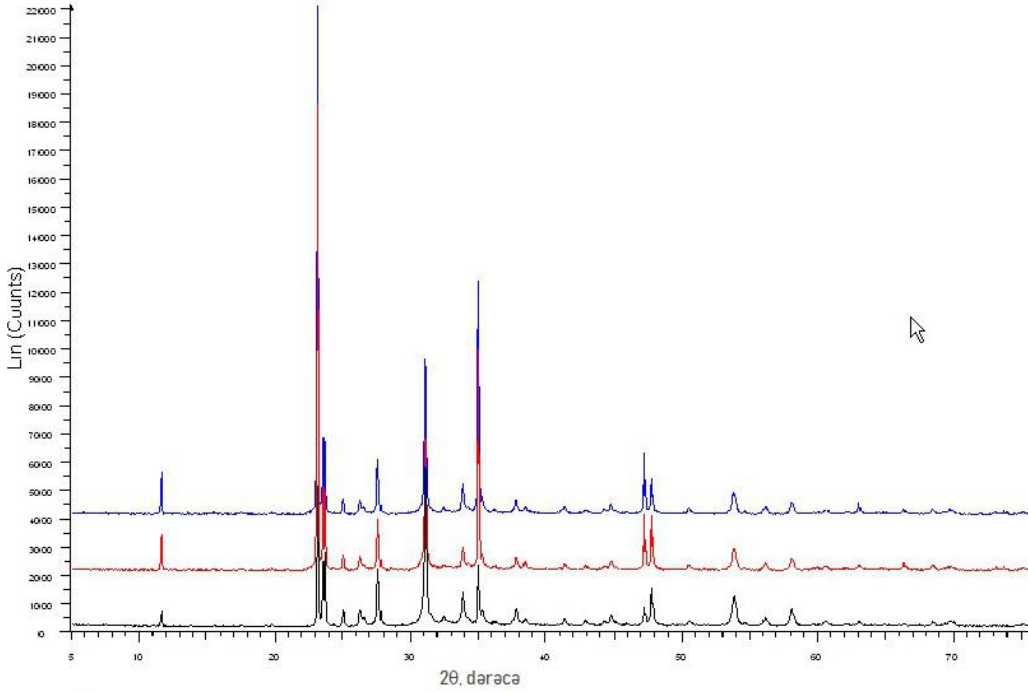


Şəkil 1. $TlGaSe_2$ kristalın quruluş fraqmenti [9].

Difraktometr ilə aparılan hesablamalar göstərdi ki, $TlGaSe_2$ -nin Pr ilə dopinqi onun kristallik strukturunda nəzərə çarpacaq dəyişiklik əmələ gətirmir. Tərkiblərin bir fazlı olduğu, və qəfəs parametrlərinin $TlGaSe_2$ -dən çox fərqli olmadığı müəyyənləşdirilmişdir. $TlGaSe_2$ əsaslı $TlGaSe_2<Pr>$ nümunələri qəfəs parametrləri $a=10,779 \text{ \AA}$; $b=10,776 \text{ \AA}$; $c=15,663 \text{ \AA}$, $\beta=99,993^\circ$, fəza qrupu C2/c olan monoklin sinqoniyada kristallaşirlar. $TlGaSe_2<Pr>$ (0 ± 2 mol%) nümunələrin difraktoqramlarındakı reflekslər $TlGaSe_2$ fazasına uyğundur (şəkil 3).



Şəkil 2. $TlGaSe_2$ kristalın difraktoqramı [9].



Şəkil 3. TlGaSe₂<Pr> kristallarının difraktoqramları.

Optik xassələri ölçmək üçün TlGaSe₂<Pr> mono-kristalları Briçmen-Stokbarger metodu ilə yetişdirilmişdir [10]. Beləki, əvvəlcədən sintez edilmiş polikristal xırdalanaraq uzunluğu 20 sm olan qalın divarlı, ucu iynəvari olan kvars ampulaya doldurulur. 10⁻³ Pa təzyiqdə vakuumlaşdırılmış ampulanın ağızı lehimlənilir. Ampula sobanın oxu boyunca kvars tutacağıın köməyi ilə sobanın 1-ci zonasına yerləşdirilir. Sobanın 1-ci zonasının temperaturu $T=T_{or}+40$ K qədər tədricən qaldırılır. TlGaSe₂-nin erimə temperaturu (1180±10 K) olduğundan sobanın temperaturu 1220 K qədər qaldırılır. Ampula bu temperaturda 5-10 saat saxlanılır və vibrasiya edilir ki, həll olma prosesi uğurla getsin. Sonra xüsusi mexanizmin köməyi ilə 1,5 mm/saat sürətilə aşağı 2-ci zonaya buraxılır. Burada temperatur $T < T_{or} - 50$ K-dir. Ampulanın iynəvari formada olan ucu nisbətən soyuq zonaya keçən zaman kristallaşma mərkəzlərindən biri ampulanın ucuna cataraq kristallaşmanı yuxarıya doğru yüksəldir (yəni yalnız bu mərkəzlərdən biri ampulanın yuxarı hissəsinə doğru böyüyür). Temperatur qradienti 40 K/saat olmalıdır. Kristallaşma zonasında temperatur qradientinin yüksək olması böyük gərginlik yaradır ki, bu da kristalın keyfiyyətinə mənfi təsir göstərir. Kristallaşma zonasını (temperatur qradientli zonanı) keçdikdən sonra ampula tablama zonasına (3-cü zonaya) daxil olur. Tablama zonasında temperatur $T \approx 2/3 T_{or}$ olur. Tablama prosesi kristalın bərkiməsi zamanı meydana çıxan daxili gərginliyi azaldır. Bu zonada 1-2 gün saxlanılır, sonra ampula otaq temperaturuna qədər soyudulur. Sobanın temperaturunu 10K/saat sürətilə azaltmaqla buna nail olunur.

0-2 mol% praseodimiumun konsentrasiyası olan TlGaSe₂<Pr> laylı yarımkəçirici kristalların optik udulma spektrini öyrənmək üçün nümunələr monokristal külçədən ayrılmış və qalınlıqları 25–120 mkm olan nazik lövhələr şəklində hazırlanmışdır. Işıq nümunənin

üzərinə kristalın c oxuna paralel olaraq yönəldilmişdir. Optik buraxma spektrlərinin tədqiqi MDR-23 monoxromatoru əsasında və 77–300 K intervalında temperaturu sabit saxlayan azot kriostatı olan qurğunun köməyi ilə aparılmışdır. Şüa qəbuledicisi kimi FEU-100 cihazından istifadə olunmuşdur. Qurğunun ayırdetmə qabiliyyəti 3 Å-dir.

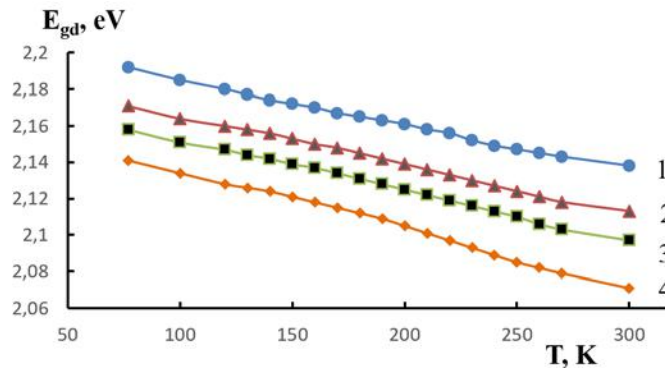
Optik udma əmsalını $\alpha = 10^{-3}$ sm⁻¹ intervalında hesablamaq və bütün intervalı əhatə etmək üçün onu iki yerə bölərək, iki cüt müxtəlif qalınlıqlı nümunələrdən keçən işıq selinin intensivliyinin qiymətlərindən istifadə olunmuşdur. Hər bir hissə üçün $\alpha = 1/(d_2 - d_1) \times \ln(I_1/I_2)$, hesablanmışdır. Burada d_1 və d_2 nümunələrin qalınlığı, I_1 və I_2 nümunələrdən keçən işığın intensivliyidir. Uyğun hissədə və hər bir nümunə üçün αd vahiddən böyük olduğundan nümunələrdən keçən və əks olunan sülalərin interferensiyası çox zəif olmuş və müşahidə olunmamışdır. Bundan əlavə çoxlu sayda əks olunma və interferensiyanın qarşısını almaq üçün, nümunə düşən şüaya nəzərən kiçik bucaq altında yönəldilmişdir.

NƏTİCƏLƏR VƏ ONUN MÜZAKİRƏSİ

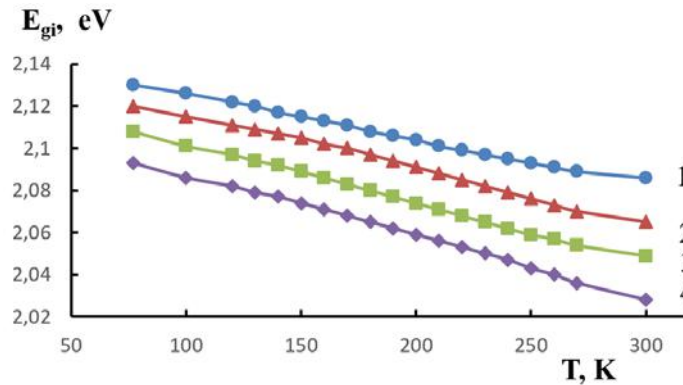
Praseodimiumun konsentrasiyası 0–2 mol% olan TlGaSe₂<Pr> monokristallarının 77–300 K temperatur diapazonunda 20-dən 1000 sm⁻¹-ə qədər udma əmsalının ölçmələri üzrə alınan eksperimental nəticələr təhlil edilmişdir. TlGaSe₂<Pr> monokristallarının udma sərhədində düz və çəp keçidlərin qadağan zonasının eni, $(\alpha/\hbar\omega)^2$ -nin fotonun enerjisindən $\hbar\omega$ və $(\alpha/\hbar\omega)^{1/2}$ -nin $\hbar\omega$ -dən asılılıq qrafikindəki düz xətti hissənin extrapolasiyasından alınmışdır. Düz və çəp keçidlər üçün qadağan zonasının eninin müxtəlif temperaturlardakı qiymətləri cədvəl 1-də verilmişdir.

TlGaSe₂<Pr>-də düz və çəp qadağan zonaların enlərinin qiymətləri.

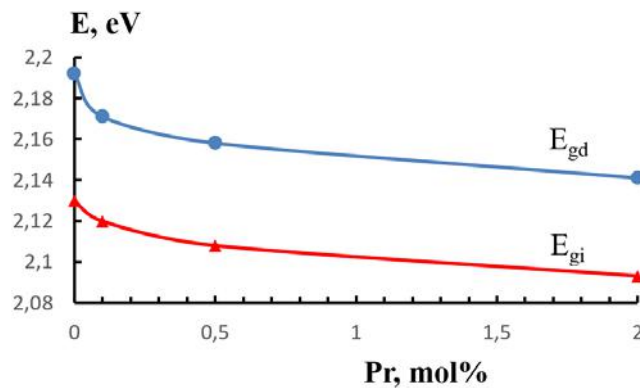
T, K	TlGaSe ₂		Pr 0.1%		Pr 0.5%		Pr 2%	
	E _{gd}	E _{gi}	E _{gd}	E _{gi}	E _{gd}	E _{gi}	E _{gd}	E _{gi}
77	2,192	2,13	2,171	2,12	2,158	2,108	2,141	2,093
100	2,185	2,126	2,164	2,115	2,151	2,101	2,134	2,086
120	2,18	2,122	2,16	2,111	2,147	2,097	2,128	2,082
150	2,172	2,115	2,153	2,105	2,139	2,089	2,121	2,074
200	2,161	2,104	2,139	2,091	2,125	2,074	2,105	2,059
250	2,147	2,093	2,124	2,076	2,11	2,059	2,085	2,043
300	2,138	2,086	2,113	2,065	2,097	2,049	2,071	2,028



Şəkil 4. TlGaSe₂<Pr> monokristallarının udma kənarında E_{gd} düz optik keçidin eninin temperaturdan asılılığı, (mol %):1) 0; 2) 0,1; 3) 0,5; 4) 2.



Şəkil 5. Tərkibində əlavəedici maddə olan TlGaSe₂<Pr> monokristallarının udma kənarında E_{gi} çəp optik keçidin eninin temperaturdan asılılığı, (mol%): 1) 0; 2) 0,1; 3) 0,5; 4) 2.



Şəkil 6. TlGaSe₂<Pr>-də E_{gd} və E_{gi}-nin 77 K temperaturda praseodimiumun tərkibindən (mol%-lə) asılılığı.

Bütün nümunələrdə ölçmələrin nəticələri göstərir ki, 77–300 K temperatur intervalında $\alpha = 40\text{--}150 \text{ sm}^{-1}$ -də optik udulmanın uzun dalğalı quyruğu Urbax qaydasına tabedir. TlGaSe₂-nin daxil olduğu seqnotoelektriklərdə Urbax quyruğunun meydana çıxması elektronların uzununa optik fononlarla qarşılıqlı təsiri ilə əlaqələndirilir [11].

Şəkil 4-də TlGaSe₂<Pr> kristalların optik udulma kənarında düz keçidlərin qadağan zonasının eninin temperatur asılılıqlarından görünür ki, bütün tərkiblər üçün mənfi temperatur gradienti saxlanılır və Pr-un konsentrasiyasının artması ilə E_{gd} uzun dalğalı oblasta doğru sürüşür. TlGaSe₂<Pr> kristallarının optik udma kənarındakı E_{gi} çəp keçidlərinin qadağan zonasının eni üçün oxşar məlumatlar şəkl. 5-də verilmişdir.

Pr-la aşqarlanma TlGaSe₂-də düz və çəp keçidlərin qadağan olunmuş zonasının enini kiçildir ki, bu da tələlərin konsentrasiyasının azalması ilə əlaqəli ola bilər. [8]-in müəllifi də eyni nəticəyə gəlir. TlGaSe₂-nin qadağan zonasında meydana çıxan səviyyələr struktur defektləri və kiçik miqdarda xüsusi aşqarların mövcudluğu ilə əlaqələndirilir. Nadir torpaq elementlərinin əlavə edilməsi zamanı bu səviyyələr ləğv edilə bilər ki, bu da E_{gi}-nin aşağı enerjilərə doğru sürüşməsinə səbəb olur.

TlGaSe₂ kristalları üçün 77–300 K temperatur intervalında orta temperatur qradienti dE_{gd}/dT təqribən $-2,42 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}$ və $dE_{gi}/dT = -1,97 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}$ təşkil edir. Müqayisə üçün TlGaSe₂<2%Pr> tərkibi üçün eyni xüsusiyyətləri təqdim edirik: $dE_{gd}/dT = -3,14 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}$ və $dE_{gi}/dT = -2,91 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}$. Beləliklə, TlGaSe₂-yə NTE praseodimiumun 2 mol% daxil edilməsi dE_{gd}/dT və dE_{gi}/dT temperatur əmsalının modulunun nəzərə çarpacaq dərəcədə artmasına səbəb olur.

77 K temperaturda TlGaSe₂-yə nisbətən TlGaSe₂<2%Pr> üçün E_{gd} qadağan zonasının eninin uzundalğalara doğru yerdəyişməsi 51 meV, 300 K temperaturda isə 67 meV-dir. Çəp optik keçidlərin eni E_{gi} üçün yerdəyişmə müvafiq olaraq 37 və 58 meV-dir.

Şəkil 6-də TlGaSe₂<Pr> üçün E_{gd} və E_{gi}-nin 77 K temperaturda nadir torpaq elementi Pr-un miqdarından asılılığı göstərilir.

Ekspərimənt göstərdi ki, TlGaSe₂ və TlGaSe₂<Pr> monokristallarının udma kənarının strukturunda aşağıdakı fərqlər müşahidə olunur: aşağı temperaturda TlGaSe₂<Pr>-də (0,1–2 mol%), düz keçid yaxınlığında eksitonun əmələ gəlməsi ilə əlaqəli udma zolağının aşkar edilməsi mümkün deyil; TlGaSe₂<Pr>-də udma əmsalının qiyməti TlGaSe₂-dən nəzərəçarpacaq dərəcədə yüksəkdir.

- | | |
|--|--|
| <p>[1] G.D. Guseinov, A.M. Ramazanade, E.M. Kerimova, M.Z. Ismailov. About a group of three component compounds being analogues to binary semiconductors of A^{III}B^{VI} type. Phys. Stat. Sol. A. 1967, 22, K117.</p> <p>[2] Sh.Nurov, V.M. Burlakov, E.A. Vinogradov, N.M. Gasanly, B.M. Dzhevadov. Vibrational spectra of TlInS₂, TlIn_{0.95}Ga_{0.05}S₂, TlIn(S_{0.8}Se_{0.2})₂ crystals in the vicinity of phase transitions. Phys. Status Solidi B. 1986, 137, p.21. https://doi.org/10.1002/pssb.2221370103</p> <p>[3] M.M. El-Nahass, M.M. Sallam, A.R. Samy and E.M. Ibrahim. Optical, electrical conduction and dielectric properties of TlGaSe₂ layered single crystal. Solid State Sci. 2006, 8, p.488–499.</p> <p>[4] A.M. Panich, R.M. Sardarly. Physical properties of the low-dimensional A³B⁶ and A³B³C₂ compounds. New York: Nova Science Publishers, 2010.</p> <p>[5] G.E. Delgado, A.J. Mora, F.V. Pérez and J.González. Growth and crystal structure of the layered compound TlGaSe₂. Cryst. Res. Technol. 2007, 2, p.663–666.</p> | <p>[6] А.М. Паушаев, С.Н. Мустафаева, Э.М. Керимова, Н.З. Гасанов. Диэлектрические и оптические свойства легированных редкоземельными элементами монокристаллов TlInS₂ и TlInSe₂. Ученые записки Национальной Академии Авиации. 2014, т.16, № 3, с.29-37.</p> <p>[7] Э.М. Керимова, Н.З. Гасанов. Кристаллофизика сложных полупроводников на основе соединений типа TlB^{III}C₂^{VI}, включающих редкоземельные элементы и переходные металлы. АМЕА Хəбərlər, Fizika və Astronomiya seriyası. 2017, №2, с.12-26.</p> <p>[8] B. Gurbulak. The optical investigation of TlGa_{0.999}Pr_{0.001}Se₂ and TlGaSe₂ single crystals. Physica B: Cond. Mater. 2001, 293, p.289–296.</p> <p>[9] Johnsen, Simon; Liu, Zhifu; Peters, John A.; etc. Thallium Chalcogenide-Based Wide-Band-Gap Semiconductors: TlGaSe₂ for Radiation Detectors. Chemistry of Materials, 2011, 23, p.3120.</p> <p>[10] Э.М. Керимова. Кристаллофизика низкоразмерных халькогенидов, Баку, ЕЛМ, 2012, 708с.</p> <p>[11] G.D. Mahan. Phonon-broadened optical spectra: Urbach's rule. Phys. Rev. 1966, 145, p.602–608.</p> |
|--|--|

KOORDİNATDAN ASILI KÜTLƏYƏ MALİK YARIMSONSUZ HARMONİK OSSİLYATORUN $\mathfrak{su}(1, 1)$ DİNAMİK SİMMETRİYA CƏBRİNİN DƏQİQ REALİZASİYASI

Ş.M. NAĞİYEV, E.İ. CƏFƏROV

Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutu

Cavid pr. 131, AZ1143, Azərbaycan

e-mail: sh.nagiyev@physics.science.az, ejafarov@physics.science.az

Kütləsi koordinatdan asılı olaraq dəyişən, bu səbəbdən də özünü yarımsonsuz harmonik ossilyator kimi aparan kvant sistemi üçün $\mathfrak{su}(1,1)$ dinamik simmetriya cəbri qurulmuş və qapalı cəbri yaradan hər üç generatorun aşkar şəkilləri hesablanmışdır.

Aşar sözlər: Yarımsonsuz harmonik ossilyator; Li cəbri; Dəqiq həllər; Lager çoxhədliləri

PACS: 03.65.-w, 02.30.Hq, 03.65.Ge

GİRİŞ

Müasir fizikanın ən cəlbedici məsələlərindən biri şübhəsiz ki, harmonik ossilyator məsələsidir [1]. Qeyd edilən məsələ həm klassik, həm də kvant mexanikasının fundamental qanunları çərçivəsində çox maraqlı və sonsuz sayda hadisələri elmi baxımdan dolğun izah edə bilən dəqiq həllərə malikdir [2,3]. Klassik mexanikada, məsələ üçün uyğun Nyuton tənliyi yazılır və məhdud oblastda harmonik ossilyator məsələsinə uyğun gələn fiziki sistemin hərəkəti üçün trayektoriya funksiyaları analitik şəkildə tapılır. Kvant mexanikası çərçivəsində isə, submikron ölçüdə fiziki sistemin özünü harmonik ossilyator kimi aparması ideyası, bu sistemi ya konfigurasiya, ya da impuls fəzasında bu sistemi xarakterizə edə biləcək uyğun kvant mexanikası tənliyinin həlli üzərindən mümkündür. Bu tənlik qeyri-relyativistik kvant mexanikası məsələsi üçün Şredinger, relyativistik kvant mexanikası məsələsi üçün isə sonlu-fərq, Kleyn-Qordon və ya Dirak tənlikləridir. Bütün bu tənlikləri müəyyən yanaşmalarla harmonik ossilyator üçün dəqiq həll etmək mümkündür. Lakin, burada bir şey nəzərə alınmalıdır ki, kvant mexanikası klassik mexanikadan fərqli olaraq, impuls və koordinat arasındakı mövcud Heyzenberq qeyri-müəyyənlik prinsipinin mövcudluğu səbəbindən, məhdud oblastdakı hərəkət yerinə, adətən, sonsuz oblastda hərəkəti tədqiq edir. Yəni, tədqiq edilən fiziki sisteminin koordinatının və impulsunun aşkar qiymətləri yerinə konfigurasiya və ya impuls fəzasında bu sistemin sonsuz oblastda olma ehtimalı anlayışı daxil edilir. Bu zaman, yuxarıda sadaladığımız tənlikləri dəqiq və ya təqribi həll etməklə həmin sistemə uyğun gələn dalğa funksiyası və enerji spektrinin müəyyən analitik ifadələri tapılır ki, bu ifadələr də kvant sistemini tam olaraq xarakterizə etmək üçün kifayətdirlər.

Yuxarıda da qeyd etdiyimiz kvant harmonik ossilyatoru məsələsi də qeyri-relyativistik kvant mexanikasında kanonik yanaşma çərçivəsində koordinat və impulsun üzərinə heç bir məhdudiyət qoyulmadığı təqdirdə kvant mexanikasının riyazi cəhətdən ən sadə və dəqiq analitik həllərinə malikdirlər. Bu həllər stasionar hallarda həm koordinat, həm də impuls təsvirində dalğa funksiyası üçün Ermit çoxhədlilərindən asılı riyazi

ifadəni verir, sistemin enerji spektri isə sonsuz sayda xətti və ekvidistant səviyyələrdən ibarətdirlər [3].

[4,5] məqalələri kvant harmonik ossilyatorunun çox maraqlı konfaynment modelini təqdim etmişdir. Belə ki, dalğa funksiyaları Ermit çoxhədliləri ilə ifadə olunan harmonik ossilyator məsələsi daha da ümumiləşdirilərək, belə ehtimal edilir ki, konfigurasiya fəzasında kvant ossilyatoru sistemi koordinatın hər hansı sonlu mənfi qiymətində məhdudlaşdırılır, lakin, koordinatın müsbət qiymətlər oblası tamamilə dəyişməz qalır. Daha sonra, bu kvant ossilyatoru modeli inkişaf etdirilərək, onun faza fəzası da qurulmuş və bu faza fəzasında impuls və koordinatın birgə kvazi-paylanma funksiyası olan Husimi funksiyasının aşkar şəkli də tapılmışdır [6]. Lakin, nəzərə almaq lazımdır ki, hər hansı yeni qurulan kvant sisteminin ən əsas xassələrindən biri də onun dinamik simmetriyasının olub-olmadığının yoxlanılması və dinamik simmetriya cəbrinə uyğun gələn generatorların aşkar şəkillərinin tapılmasıdır. Hal-hazırkı məqalənin məqsədi də, yuxarıda qeyd edilən koordinatdan asılı kütləyə malik yarımsonsuz harmonik ossilyator modelini təsvir edə bilən dinamik simmetriya cəbrinin generatorlarının necə tapıldığını göstərmək və cəbri təşkil edən hər üç generatorun analitik ifadələrini hesablamaqdır.

DALĞA FUNKSİYASI ERMİT ÇOXHƏDLİLƏRİ İLƏ İFADƏ OLUNAN QEYRİ-RELYATİVİSTİK OSSİLYATORUN DİNAMİK SİMMETRİYASI

Bu bölmədə biz stasionar hallarının dalğa funksiyası Ermit çoxhədliləri ilə ifadə olunan qeyri-relyativistik xətti harmonik ossilyatorun dinamik simmetriya cəbrinin generatorları ilə bağlı qısa icmal təqdim edirik.

Belə ki, kanonik yanaşmada $V(x) = \frac{m_0\omega^2 x^2}{2}$ potensialı ilə ifadə olunan qeyri-relyativistik harmonik ossilyator üçün stasionar Şredinger tənliyi aşağıdakı şəkildədir:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m_0\omega^2 x^2}{2} \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (1)$$

Burada, m_0 – kvant harmonik ossilyatorunun bircins kütləsi, ω – ossilyatorun bucaq tezliyi, $\psi(x)$ – ikinci

tərtib diferensial tənliyin məxsusi funksiyası olan sistemin dalğa funksiyası, E isə bu tənliyin məxsusi qiyməti olan kvant sistemina uyğun enerji spektridir.

Yuxarıdakı (1) tənliyinin dəqiq həlli göstərir ki, enerji spektri aşağıdakı şəkildə sonsuz sayda ekvidistant diskret səviyyələrdən ibarətdir:

$$E \equiv E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

Bu tənliyin aşkar həlli olan $\psi(x)$ dalğa funksiyası da eyni qayda ilə diskret qiymətlər alır və Ermit çoxhədliləri ilə ifadə olunan aşağıdakı analitik ifadəyə malikdir [7]:

$$\psi(x) \equiv \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\lambda_0^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2} \lambda_0^2 x^2} H_n(\lambda_0 x), \quad \lambda_0 = \sqrt{\frac{m_0 \omega}{\hbar}}. \quad (3)$$

Qeyri-relyativistik xətti harmonik ossilyatorun dinamik simmetriya cəbri Heyzenberq-Li cəbridir və aşağıdakı şəkildədir:

$$[\hat{H}, a^\pm] = \pm \hbar\omega a^\pm, \quad (4a)$$

$$[a^-, a^+] = 1. \quad (4b)$$

Burada, \hat{H} kvant ossilyatorunun (1) tənliyindən də görüldüyü kimi tam Hamilton operatorudur və aşağıdakı şəkildədir

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m_0 \omega^2 x^2}{2}. \quad (5)$$

a^\pm operatorları isə kvant ossilyatorunun yüksəldici və endirici operatorları adlanırlar və aşağıdakı birinci tərtib diferensial operator kimi təyin olunurlar:

$$a^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}\lambda_0} \left(\lambda_0^2 x \mp \frac{d}{dx} \right). \quad (6)$$

(6) operatorları (3) ilə təyin olunan stasionar halların $\psi_n(x)$ dalğa funksiyasına aşağıdakı şəkildə təsir edərək dalğa funksiyasını bir səviyyə yüksəldib endirirlər:

$$a^- \psi_n(x) = \sqrt{n} \psi_{n-1}(x), \quad (7a)$$

$$a^+ \psi_n(x) = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}(x). \quad (7b)$$

Buradan asanlıqla tapmaq olar ki,

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \psi_0(x). \quad (8)$$

Nəzərə alsaq ki, impuls operatoru $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$, onda (4) Heyzenberq-Li cəbri kommutasiya münasibətlərindən aşağıdakı Heyzenberq-Li tənliklərini alırıq:

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = im_0 \hbar \omega^2 x, \quad (9a)$$

$$[\hat{H}, x] = -i \frac{\hbar}{m_0} \hat{p}_x. \quad (9b)$$

KOORDİNATDAN ASILI KÜTLƏLİ YARIMSONSUZ HARMONİK OSSİLYATORUN DİNAMİK SİMMETRİYA CƏBRİNİN QURULMASI

İndi isə, yarımsonsuz harmonik ossilyatorun dinamik simmetriya cəbrini quraq. Əvvəlcə bir daha qeyd edək ki, harmonik ossilyator problemi tam sonsuz hal-dan yarımsonsuz hala keçməsi üçün, onun da kütləsi koordinatdan asılı olaraq, koordinatın mənfəi sonlu qiymətində sonsuz ağır olmalıdır. Yəni, baxılan qeyri-relyativistik kvant sisteminin həm kinetik, həm də potensial enerji operatorlarına daxil olan biricins kütlə m_0 koordinatdan asılı kütlə $M(x)$ ilə əvəz edilməlidir və $M(x)$ koordinatın $x = -a$ qiymətində sonsuz olmalıdır. Kinetik enerji operatorunun isə konfigurasiya fəzasında ermitlik şərtinin saxlanması üçün ən sadə kinetik enerji operatoru olan BenDaniel-Dyuk ümumiləşməsindən istifadə edilir və aşağıdakı Şredinger tənliyi yazılır:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{M(x)} \frac{d}{dx} + \frac{M(x)\omega^2 x^2}{2} \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (10)$$

$M(x)$ funksiyası üçün

$$M(x) = \begin{cases} \frac{am_0}{x+a}, & -a < x < +\infty, \\ +\infty, & x \leq -a, \end{cases} \quad (11)$$

şəklindəki ifadə daxil edilməklə, (10) tənliyi ikinci tərtib diferensial tənlik olaraq dəqiq həll edilə bilər və tapılır ki, onun enerji spektri (2) ilə tam olaraq üst-üstə düşür, yəni

$$E \equiv E_n^{ys} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (12)$$

dalğa funksiyası isə aşağıdakı şəkildə ümumiləşmiş Lager çoxhədliləri ilə ifadə edilirlər [7]:

$$\psi(x) \equiv \psi_n^{ys}(x) = C_n [2\lambda_0^2 a(x+a)]^{\lambda_0^2 a^2} e^{-2\lambda_0^2 a(x+a)} L_n^{(2\lambda_0^2 a^2)}(2\lambda_0^2 a(x+a)). \quad (13)$$

Burada,

$$C_n = (-1)^n \lambda_0 \sqrt{\frac{2n!}{\Gamma(n + 2\lambda_0^2 a^2 + 1)}}$$

əmsalı $L_n^{(\alpha)}(z)$ ümumiləşmiş Lager çoxhədlilərinin məlum ortoqonallıq şərtindən tapılır. Əgər biz qurulacaq cəbrin bir generatorunun Hamilton operatoru olduğunu nəzərə alsaq, onda bu generator üçün yazıla bilər ki,

$$\hat{H}^{ys} = -\frac{\hbar^2}{2am_0} \frac{d}{dx} (x+a) \frac{d}{dx} + \frac{m_0 a \omega^2 x^2}{2(x+a)}. \quad (14)$$

Əlavə olaraq, aşağıdakı iki yeni operator daxil edək:

$$\hat{A}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}\lambda_0} \left(\lambda_0^2 \sqrt{\frac{a}{x+a}} x - \frac{d}{dx} \sqrt{\frac{x+a}{a}} \right), \quad (15a)$$

$$\hat{A}^- = \frac{1}{\sqrt{2}\lambda_0} \left(\lambda_0^2 \sqrt{\frac{a}{x+a}} x + \sqrt{\frac{x+a}{a}} \frac{d}{dx} \right). \quad (15b)$$

(14) və (15) operatorlarının qarşılıqlı kommutasiyası aşağıdakı münasibətlərə gətirib çıxaracaq:

$$\begin{aligned} [\hat{A}^-, \hat{A}^+] &= 1 - \frac{1}{2\lambda_0 \sqrt{2a(x+a)}} (\hat{A}^+ + \hat{A}^-), \\ [\hat{H}^{ys}, \hat{A}^+] &= \hbar\omega \hat{A}^+ - \frac{\hbar\omega}{2\lambda_0 \sqrt{2a(x+a)}} [\hat{A}^+ \hat{A}^- + (\hat{A}^+)^2] - \frac{\hbar\omega}{8\lambda_0^2 a(x+a)} (\hat{A}^+ + \hat{A}^-), \\ [\hat{H}^{ys}, \hat{A}^-] &= -\hbar\omega \hat{A}^- + \frac{\hbar\omega}{2\lambda_0 \sqrt{2a(x+a)}} [\hat{A}^+ \hat{A}^- + (\hat{A}^-)^2]. \end{aligned}$$

Bu kommutasiya münasibətləri aydın olaraq göstərir ki, \hat{H}^{ys} , \hat{A}^+ və \hat{A}^- generatorları birlikdə yarımsonsuz kvant harmonik ossilyatoru üçün qapalı dinamik simmetriya cəbri təşkil etmirlər. Bu model üçün (9) Heyzenberq-Li tənliklərinin hansı ümumiləşmiş şəkllə düşdüyünü yoxladıqda isə alırıq ki:

$$[\hat{H}^{ys}, \hat{p}_x] = im_0 \hbar \omega^2 x \left[\frac{a}{x+a} + \frac{ax}{2(x+a)^2} \right] + i\hbar \frac{\hat{p}_x^2}{2am_0}, \quad (16a)$$

$$[\hat{H}^{ys}, x] = -i \frac{\hbar}{m_0} \frac{x+a}{a} \left[\hat{p}_x - \frac{i\hbar}{2(x+a)} \right]. \quad (16b)$$

Əgər aşağıdakı yeni bir \hat{P}_x operatoru daxil etsək:

$$\hat{P}_x = \frac{x+a}{\hbar} \hat{p}_x, \quad (17)$$

onda alırıq ki:

$$[\hat{H}^{ys}, \hat{P}_x] = i(m_0 \omega^2 ax - \hat{H}^{ys}), \quad (18a)$$

$$[\hat{H}^{ys}, x] = -\frac{\hbar^2}{am_0} \left(i\hat{P}_x + \frac{1}{2} \right). \quad (18b)$$

Beləliklə, (18) tənliklərinin əslində tərəfimizdən dinamik simmetriyası tədqiq edilən yarımsonsuz kvant harmonik ossilyatoru modeli üçün Hamilton-Li tənliklərinin ümumiləşmiş şəkilləri olduqları məlum olur.

Növbəti mərhələdə, biz (15) və (17) operatorları əsasında aşağıdakı üç yeni K operatorları daxil edək:

$$K_0 = \hat{A}^+ \hat{A}^- + \lambda_0^2 a^2 + \frac{1}{2},$$

$$\begin{aligned} K_1 &= \lambda_0^2 ax - \hat{A}^+ \hat{A}^- - \frac{1}{2}, \\ K_2 &= \frac{i}{2} - \hat{P}_x. \end{aligned}$$

Sadə hesablamalar apararaq, asanlıqla göstərmək olar ki, bu üç operator $\mathfrak{su}(1,1)$ Li cəbrinin generatorlarıdır, yəni onların aşağıdakı kommutasiyaları qapalı cəbri yaradır:

$$\begin{aligned} [K_0, K_1] &= iK_2, \\ [K_2, K_0] &= iK_1, \\ [K_1, K_2] &= -iK_0. \end{aligned} \quad (19)$$

Əlavə olaraq, $\mathfrak{su}(1,1)$ Li cəbrinin riyazi əsaslarından yaxşı məlum olan aşağıdakı iki K_{\pm} operatorları daxil edək:

$$K_{\pm} = K_1 \pm iK_2. \quad (20)$$

Onda, K_0 və K_{\pm} operatorları arasındakı kommutasiya münasibətləri (19) kommutasiya münasibətlərini aşağıdakı şəkildə qismən dəyişəcək:

$$[K_-, K_+] = 2K_0, \quad [K_0, K_{\pm}] = \pm K_{\pm}. \quad (21)$$

$$K_- \cdot \psi_n^{ys}(x) = \varepsilon_n \psi_{n-1}^{ys}(x), \quad K_+ \cdot \psi_n^{ys}(x) = \varepsilon_{n+1} \psi_{n+1}^{ys}(x). \quad (22)$$

Burada, $\varepsilon_n = -\sqrt{n(n + 2\lambda_0^2 a^2)}$.

(22) münasibətlərindən istifadə edərək, asanlıqla yazmaq olar ki,

$$\psi_n^{ys}(x) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!(2\lambda_0^2 a^2 + 1)_n}} (K_+)^n \psi_0^{ys}(x). \quad (23)$$

Başqa sözlə, (23) ifadəsi əslində yarımsonsuz ossilyator üçün adı harmonik ossilyatorun dalğa funksiyası üçün doğru olan (8) ifadəsinin ümumiləşməsidir və $a \rightarrow \infty$ limit halı üçün bu ifadəni tam bərpa edir. Həm də, asanlıqla göstərmək olar ki, (21) münasibətləri də

Buradan isə asanlıqla məlum olur ki, K_{\pm} operatorları əslində kütləsi koordinatdan asılı olaraq dəyişən yarımsonsuz kvant ossilyatoru modelinin yüksəldici və endirici operatorlarıdır və onların (13) dalğa funksiyalarına təsirləri aşağıdakı cəbri ifadəyə tabedir:

bu limitdə Heyzenberq cəbrinin əsasını təşkil edən (4) münasibətlərini tam olaraq bərpa edirlər.

Bu iş Azərbaycan Elm Fondunun maliyyə dəstəyi ilə yerinə yetirilmişdir – **Grant № AEF-MCG-2022-1(42)-12/01/1-M-01**.

[1] *M. Moshinsky and Y.F. Smirnov*. The harmonic oscillator in modern physics New York: Harwood Academic, 1996.
 [2] *S.C. Bloch*. Introduction to classical and quantum harmonic oscillators. Wiley, New-York, 1997.
 [3] *L.D. Landau and E.M. Lifshitz*. Quantum mechanics (Non-relativistic Theory) Oxford: Pergamon, 1991.

[4] *E.I. Jafarov and J. Van der Jeugt*. 2021 Eur. Phys. J. Plus 136 758.
 [5] *E.I. Jafarov and J. Van der Jeugt*. 2022 Pramana J. Phys 96 35.
 [6] *E.I. Jafarov, A.M. Jafarova and S.M. Nagiyev*. 2022 Int. J. Mod. Phys.B 36 2250227.
 [7] *R. Koekoek, P.A. Lesky and R.F. Swarttouw*. Hypergeometric orthogonal polynomials and their q-analogues (Springer Verslag, Berlin), 2010.

S.M. Nagiyev, E.I. Jafarov

EXACT REALIZATION OF THE $\mathfrak{su}(1, 1)$ DYNAMICAL SYMMETRY ALGEBRA FOR THE SEMIINFINITE HARMONIC OSCILLATOR WITH THE POSITION-DEPENDENT MASS

The $\mathfrak{su}(1,1)$ dynamical symmetry algebra is constructed and obvious expressions of all three generators forming this algebra are computed for the quantum system behaving itself as a semiinfinite harmonic oscillator due to that its mass varies with position.

Ш.М. Нагиев, Э.И. Джафаров

ТОЧНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГЕБРЫ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ $\mathfrak{su}(1, 1)$ ДЛЯ ПОЛУБЕСКОНЕЧНОГО ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА С МАССОЙ ЗАВИСЯЩЕЙ ОТ КООРДИНАТЫ

Алгебра динамической симметрии $\mathfrak{su}(1,1)$ построена и явные виды всех трех генераторов образующих эту алгебру вычислены для квантовой системы ведущей себя как полубесконечный гармонический осциллятор из-за того что его масса меняется в зависимости от координаты.

Bi₂Te_{2,7}Se_{0,3}<Ni> KRİSTALLARINDA İŞIĞIN UDULMA DİNAMİKASI

N.M. ABDULLAYEV, S.R. ƏZİMOVA

Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu,
H. Cavid prospekti 131, Bakı, Azərbaycan AZ 1143
sevinc.azimova.82@mail.ru

Laylı, termoelektrik Bi₂Te_{2,7}Se_{0,3}<Ni> monokristalları spektroskopik üsulla geniş diapazonda tədqiq edilmişdir. Nikel aşqarının materialın işıq enerjisinin udulma əmsalına təsirinin dinamikası öyrənilmiş, defektlərin mövcudluğu ilə bağlı xüsusiyyətlər aşkar edilmiş və infraqırmızı oblastda elektron keçidləri Ni²⁺ aşqar ionlarının koordinasiya xüsusiyyətləri təsdiqlənmişdir.

Açar sözlər: xalkogen, klaster, vakansiya, kvintet, IQ udulma.

PACS: 02.70Hm

1. GİRİŞ

Laylı, termoelektrik Bi₂Te_{2,7}Se_{0,3} monokristalının nikellə aşqarlanması elektroliz üsulu ilə mümkündür. Bu halda biz göstərdik ki, nikelin əvəzlənməsi strukturda NiTeSe zəncirləri əmələ gətirir. Eyni zamanda, Van-der-Vaals təbəqələrində Ni_{1,7}Te klasterləri əmələ gəlir.

Bənzər texnoloji təcrübələrdən məlumdur ki, PbTe kristallarında artıq tellur, əlavə buxar təzyiqi yaradır ki, bu da Raul qaydasına tabedir. Bu, p-tipli PbTe-nun bərk məhlul kimi təqdim edilməsinin qanunauyğunluğunu göstərir. İndium ilə aşqarlanmış qurğuşun telluridin kvazi qapalı həcmində tavlama təcrübələri göstərmişdi ki, kristal səthinin üzərində tellur buxarı yoxdur. Stexiometrik xalkogendən qalıq tellur indium atomlarına güclü şəkildə bağlanır. Bu, mahiyyətə kovalent əlaqə ilə InTe aşqar komplekslərinin əmələ gəlməsinin dolayı, lakin inandırıcı sübutudur [1]. Böyümə zamanı kristala daxil olan elektro-aktiv indiumun məhdudlaşdırıcı konsentrasiyası effektiv əmsalının - K_{eff} qiyməti ilə dəyişir. Eyni zamanda, komplekslərdə indium aşqarının azalmasına gətirib çıxara bilər ki, bu da cərəyanın artmasına səbəb olur.

Bərk məhlulun ehtimalını pozan müxtəlif struktur vahidlərinin olması ilə izah edilən IQ spektrlərində incə quruluşu izah etmək üçün klaster modelləri təqdim edilmişdir [2]. Tətbiq olunan REI modellərində əsas fərziyyə eyni növə aid ionların kristalların qarışığı vasitəsilə eyni fazada hərəkət etməsi qarışıqlı qəfəsə özəyin daxil olmasını təsdiqləyir.

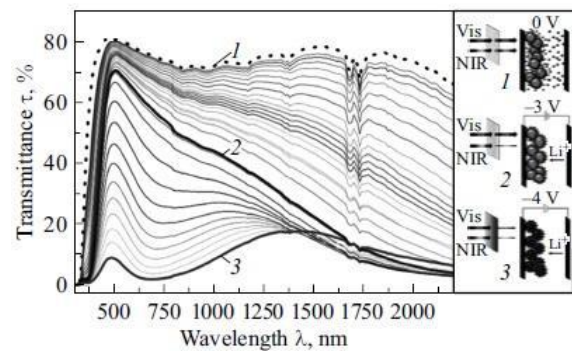
Prosnikov işlərində göstərilmişdir ki, şüşəvari xalkogenidlərdə klasterlərin mövcudluğu fotoinduksiya proseslərini zəiflədir [3].

Yarımqeçiricilərdə işıq udulması müxtəlif proseslərlə əlaqələndirilə bilər: geniş tezlik diapazonunda baş verən udulma, o cümlədən sərbəst yükdaşıyıcılar tərəfindən son dərəcə aşağı tezlikli udulma, kristal qəfəs vibrasiyaları ilə udulma və nəhayət, müxtəlif enerji diapazonlarında elektron halları arasında keçidlərlə əlaqəli infraqırmızı, görünən və ya ultrabənövşəyi diapazonlarda udulma və s. Nəhayət, bu, atomun təbəqələrdə elektronları həyəcanlandıran və praktiki olaraq fərdi həyəcanlanmış atomlarında lokallaşdırılmış rentgen şüalarının udulmasıdır [4].

Biz orta infraqırmızı udulma zolağının aşağı tezliklərə uyğun diapazonunda araşdırma aparacağıq. Udulma spektrindəki bu zolaq valent zolağı ilə keçiricilik zolağının enerji səviyyələri arasında optik keçidlərlə bağlıdır.

İnterferensiya minimumunun və maksimumlarının buraxma əmsalı nümunənin qalınlığından, həmçinin nümunəyə düşən radiasiya şüasının eninin ölçüsünün tərtibindən, ölçülərinin dəyişməsindən çox asılıdır. Otaq temperaturunda nümunə 600-2430 sm⁻¹ oblastda şəffafdır. Aşağı tezlikli udulma və interferensiya zolaqlarının şüa dəstəsinin amplitudasının azalması sərbəst yükdaşıyıcılarla əlaqələndirilir. Yüksək tezlikli udulma və interferensiya zolaqlarının amplitudasının azalması valent zolağı ilə Fermi səviyyəsi arasında keçidlə bağlıdır. Beləliklə, onlar zolağın enerjisini qiymətləndirirlər. Müəyyən edilmişdir ki, temperatur aşağı düşdükcə yüksək tezlikli udulma kənarı daha yüksək tezlikli oblasta keçir və bu, zolağın eninin artdığını göstərir [5].

Mayorovun tədqiqatlarında 10% tərkibli TiO₂ nanokristallarından Nb şəffaf 2.1 mkm qalınlığında elektrod hazırlanmışdır. Elektroxrom təbəqəsi elektrolit-dimetil sulfoksiddə 1 M LiCl + 0,1 M LiI məhlulu istifadə edilmişdir. Belə bir elektroxrom təbəqənin optik xüsusiyyətlərinin katod potensialının 0÷4V intervalında dəyişməsi nəticəsində alınan spektri şəkil 1-də göstərilmişdir.



Şəkil 1. Qalınlığı 2,1 mkm olan birkomponentli elektroxrom nazik təbəqəli 10% niobium tərkibli TiO₂ legirə olunmuş nanokristallarında katod potensialının 0 ÷ 4V (-0 (1), -3 (2), -4V (3)) intervalında spektral xüsusiyyətlərin tədricən dəyişməsi [6].

Binar monokristallar və optik buraxma spektrləri haqqında yuxarıda deyilənləri nəzərə alaraq, məqalədə $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ - ün nikellə birləşmiş laylı bərk məhlulları tədqiq edilir.

İşin məqsədi nikellə interkalyasiya olunmuş laylı $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ kristallarında orta udulma spektrini öyrənməkdir.

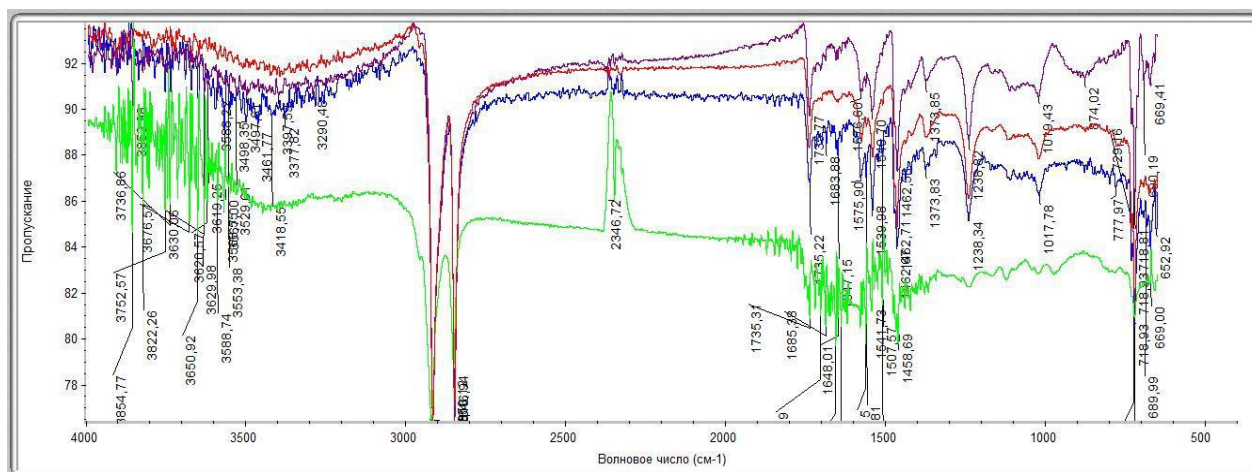
2. TƏCRÜBƏ

Təcrübə üçün laylanmış $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ və aşqarlanmış $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}<\text{Ni}>$ nümunələri Qeym üsulu ilə

aşındırılır, bu da eyni zamanda bütün laylı kristalların aşqarlanması prosesini idarə etməyə imkan verir.

Şəkil 3-dən görüldüyü kimi, $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ monokristalının buraxma spektrində bütün tədqiq olunan oblastda işığın buraxılmasının spektral xətləri aydın müşahidə olunur.

Göründüyü kimi, nümunələrin aşqarlanma müddəti artdıqca, qrafiklər aşağı sürüşür. Işıq keçiriciliyi ümumiyyətlə azalır. Həm monokristal kvintetlərdəki boş yerlərin doldurulması, həm də ehtimal olunur ki, Van- der Vaals laylarında klasterlərin formalaşması ilə piklərin eni azalır.



Şəkil 2. Spektrin görünən və orta infraqırmızı hissələrində təmiz $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ (bənövşəyi) və nikel qatqılı $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}<\text{Ni}>$ -nin laylı bərk məhlulunun işıq buraxma spektrləri (1 sm qalınlığında, 1 dəq. (qırmızı), 3 dəq. (mavi), 5 dəqiqə. (yaşıl)).

İşığın maksimum udulması $2806\text{--}2920\text{ cm}^{-1}$ intervalına uyğun dalğa oblastına düşür. Şəkildə, spektrin yaşıl hissəsində $2806\text{--}2920\text{ cm}^{-1}$ - dalğa ədəmində ensiz udma xətti üçün 65-68%-ə uyğun gələn buraxa zolağı müşahidə edilmişdir.

3. Nəticə.

Defektlərin paylanması ilə əlaqədar aşqarlı Ni^{2+} ionlarının 5 dəqiqə ərzində aşqarlanmasına uyğun gələn dalğa ədədi $2806\text{--}2920\text{ cm}^{-1}$ olan interval oblastında işığın maksimum udulması aşkar edilmişdir.

- [1] Т.А.Смородина, Н.Н.Шефталъ, А.П.Цуранов. Вхождение примесных центров в кристаллический слой полупроводника. Ленинград. Издательство Наука. 1986 с. 104.
- [2] W.Richter, H.Kohler, C.R. Becker. Phys. Stat. Sol. (b), 84, 1977, p. 619. структуры.
- [3] М.А. Просников, А.Д. Молчанова, Р.М. Дубровин, К.Н. Болдырев, А.Н. Смирнов, В.Ю. Давыдов, А.М. Балбашов, М.Н. Попова, Р.В. Писарев. Динамика решетки и электронная струк-

- тура кобальт-титановой шпинели Co_2TiO_4 , твердого тела, 2016, том 58, вып. 12, с.150.
- [4] [http://www.ioffe.ru/coherent/index.html/Cohere nt/Lectures_files/Lect_opt.pdf].
- [5] Ю.А.Алеценко, А.В.Муратов, В.В.Павлова, Ю.Г.Селиванов, Е.Г.Чижевский. Инфракрасная спектроскопия $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$, Письма в ЖЭТФ, 2014, том 99, вы-пуск 4, 213–217.
- [6] В.А. Майоров. Оконные стекла - состояние и перспективы. Оптика и спектроскопия, 2018, том 124, вып. 4. с.25.

N.M. Abdullaev, S.R. Azimova

DYNAMICS OF LIGHT ABSORPTION IN CRYSTALS $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}<\text{Ni}>$

Layered thermoelectric single crystals of $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}<\text{Ni}>$ were investigated using the spectroscopic method in a wide interval. The dynamics of the effect of nickel impurity on the absorption coefficient of light energy by the material were studied, the features associated with the presence of the ordering of defects were found, the electronic transitions in the infrared region confirm the coordination features of impurity ions Ni^{2+} .

N.M. ABDULLAYEV, S.R. ƏZİMOVA

Н.М. Абдуллаев, С.Р. Азимова

ДИНАМИКА ПОГЛОЩЕНИЯ СВЕТА В КРИСТАЛЛАХ $\text{Bi}_2\text{Te}_{2,7}\text{Se}_{0,3}\langle\text{Ni}\rangle$

Исследовались слоистые термоэлектрические монокристаллы $\text{Bi}_2\text{Te}_{2,7}\text{Se}_{0,3}\langle\text{Ni}\rangle$ с использованием в широком интервале метода спектроскопии. Изучена динамика влияния примеси никеля на коэффициент поглощения энергии света материалом, обнаружены особенности, связанные с наличием упорядочения дефектов, электронные переходы в инфракрасной области подтверждают координационные особенности примесных ионов Ni^{2+} .

Sn_{1-x}Tb_xSe MONOKRİSTALLARININ TERMOELEKTİK HƏRƏKƏT QÜVVƏSİNƏ γ -ŞÜALARIN TƏSİRİ

T.A. CƏFƏROV, C.İ. HÜSEYNOV

Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti, Bakı, Azərbaycan
tapd75@mail.ru, cahangir.adpu@mail.ru, kafedra.uf@adpu.edu.az

İşdə Sn_{1-x}Tb_xSe sistemdə bərk məhlullar alınmış, onların tərkib-xassə xarakteristikaları öyrənilmiş, termo-e.h.q.-si əmsalının temperatur asılılığı və bu xassələrə kiçik dozalı ionlaşdırıcı şüalarının tətəqiq olunmuşdur. Şüalanma zamanı yaranan akseptor tipli nöqtəvi radiasiya defektlərin konsentrasiyası x=0,05 tərkibli nümunədəkinə nisbətən daha azdır və radiasiyaya qarşı daha davamlıdır.

Aşar sözlər: Nadir torpaq elementləri, udulma dozası, elektrik keçiriciliyi, Holl əmsalı, yüklük, istilik keçiriciliyi, termo elektrik hərəkət qüvvəsi

A^{VI}B^{VI} tipli birləşmələrdən olan qurğuşun xalkogenidləri (PbX) və nadir torpaq metallarının iştirakı ilə onlar əsasında alınmış bərk məhlullar termoelektrik soyuducuların p budağındakı materiallar kimi [4], laylı quruluşa malik olan germanium sulfid (GeS) monokristallarından holoqrafiya yazılışlarında, elektrik yaddaş qurğularında, günəş batareyalarının hazırlanmasında istifadə olunur [3]. SnSe binar birləşməsi həm termoelektrik, həm də optik xassələrə meyillidir [7]. İon-kovaleent kimyəvi rəbitəyə malik olub, deformasiya olunmuş NaCl tipli quruluşda kristallaşan SnSe binar birləşməsinin əsas xüsusiyyətlərindən biri müəyyən dərəcədə defektlərə malik olamsıdır. Hər iki altqəfəsdə vakansiyaların mövcudluğu və onların qarşılıqlı təsirinin antiquruluş defektlərinin əmələ gətirdiyindən məlum olmuşdur. Nadir torpaq metal (NTM) elementlərinin daxil edilməsi qalay monoselenidində defektəmələgəlmənin təbiəti və defektlərin qarşılıqlı təsiri ilə bağlı olan bir sıra fiziki xüsusiyyətlərin yaranmasına səbəb olur [6]. Sn_{1-x}Tb_xSe sistem ərintilərinin bəzi elektrofiziki xassələrinə ionlaşdırıcı şüaların təsiri qismən tədqiq olunsada, γ - şüalanmanın termo-e.h.q.-nə təsiri öyrənilməmişdir.

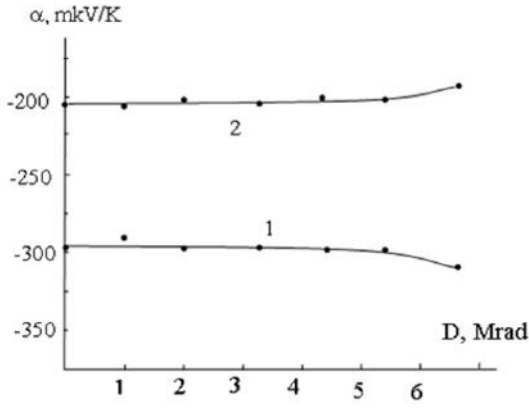
SnSe-TbSe sisteminin hal qiaqramı [1] işlərində ətraflı tədqiq edilmiş, SnSe – TbSe sisteminin faza tərzliyinin tədqiqi SnSe əsasında 3,2 mol %-ə qədər həll olma oblastının mövcud olduğu və komponentlərin 1:1 nisbətində inkonkuriyent əriyən yeni TbSnSe₂ üçlü birləşməsinin alındığı aşkar edilmişdir. SnSe-TbSe sisteminin bərk məhlul oblastından yuxarıda qeyd etdiyimiz üsulla alınmış kristallik nümunələrinin termo-e.h.q.-nin və Holl əmsalının tərkib asılılığı tədqiq olunmuşdur. Terbiumun konsentrasiyasının artımı ilə termo-ehq.-si (α) azalır və $x \geq 0,001$ % də işarəsini p-tipdən π -tipə dəyişərək maksimumdan keçməklə Tb_xSn_{1-x}Se bərk məhlullarında mütləq qiyməti stabilləşir. Holl əmsalının qiyməti də termo.e.h.q.-nin qiymətinə analogi dəyişir. TbSe-də kation atomları arasında metallik rəbitə yaranır ki, bunun hesabına terbium 3+ oksidləşmə dərəcəsinə malik olur [5]. Elektrofiziki xassələri terbium monoselenidinin (TbSe) metallik xarakterə malik olduğunu göstərir. Bu nöqtəyi nəzərdən (SnSe)_{1-x}(TbSe)_x sistem ərintilərində TbSe-nin miqdarının artımı ilə n-tip keçiriciliyin yaranması qanunauyğun haldır.

Hər hansı sistemi öyrənərkən adətən ilk növbədə onun termoelektrik və qalvanomaqnit xassələrinin temperatur asılılığı tədqiq edilir. Bu məqsədlə x=0,25; 0,50; 2; 3; 4 mol % TbSe tərkibli monokristallik nümunələri ölçmə aparmaq üçün həndəsi ölçüləri 3x5x20mm olan xüsusi paralelopiped şəklinə salınmışdır. Sonra nümunələrin üzərində omik kontaktlar qoyulmuş və ölçmə aparmaq üçün qurğuya yerləşdirilmişdir. Ölçmə 77÷320K temperatur intervalında aparılmış və alınan nəticələr analiz edilmişdir.

Sn_{1-x}Tb_xSe sistem ərintilərinin şüalanmadan əvvəl və sonra bir sıra elektrofiziki parametrləri 300 K temperaturda ölçülməklə tərkib-xassə asılılıqları müəyyən edilmiş, geniş temperatur intervalında termo-e.h.q.-si tədqiq olunmuş və bu xassələrə γ - şüaların təsiri araşdırılmışdır. γ - şüaların mənbəyi kimi kvantının enerjisi 1,25 MeV olan ⁶⁰Co izotopundan istifadə olunmuşdur. Şüalanma $D = 0,6 \frac{Qr}{san}$ dozada, 30 saat ərzində aparılmışdır.

Sn_{1-x}Tb_xSe sistem ərintilərindən Sn_{0,99}Tb_{0,01}Se və Sn_{0,95}Tb_{0,05}Se tərkibli kütləsi 2 qram olan nümunələrin şüalanmadan əvvəl qalvanomaqnit, termoelektrik və istilik xassələri geniş temperatur intervalında tədqiq olunmuşdur. Sonra nümunələr qamma şüalarla şüalandırılmış və bu xassələr yenidən tədqiq olunmuşdur. Şüalanma dozasını müəyyən etmək üçün nümunələr t=5, 10, 15, 20;25 və 30 saat müddətində (uyğun olaraq D = 1,08; 2,16; 3,24; 4,32; 5,4; 6,48 Mrad dozalarda) şüalandırılmış və T=300K temperaturda kinetik parametrlər ölçülmüşdür. Müəyyən edilmişdir ki, kiçik dozalı şüalanmalar kristalın kinetik parametrlərinin qiymətini çox cüzi dəyişir. Hətta demək olar ki, bu dəyişməni ölçmə xətası daxilində nəzərə almamaq olar. Beləliklə nümunələr şüalanma gücü 0,6 Qr/san, kvantının enerjisi 1,25 MeV olan γ - şüalarla 30 saat ərzində (6,5Mrad) şüalandırılmışdır. Şüalanma mənbəyi kimi ⁶⁰Co izotopundan istifadə olunmuşdur. Alınan nəticələrin müqayisəli şəkildə təhlili aparılmış və Sn_{0,99}Tb_{0,01}Se və Sn_{0,95}Tb_{0,05}Se bərk məhlulların elektrofiziki xassələrinə γ - şüaların təsiri araşdırılmışdır.

Şəkil 1-də Sn_{0,99}Tb_{0,01}Se və Sn_{0,95}Tb_{0,05}Se sistem ərintilərinin T=300K temperaturda termo. e.h.q.-nin şüalanma dozasından asılılıq qrafikləri verilmişdir.



Şəkil 1. $\text{Sn}_{1-x}\text{Tb}_x\text{Se}$ sistem ərintilərdə termo.e.h.q şüalanma dozəsindən asılılığı. 1- $x=0,01$; 2- $x=0,05$, $T=300\text{K}$.

Göründüyü kimi termo e.h.q hər iki nümunədə kiçik dozalarda demək olar ki dəyişmiş. 6,5Mrad dozada isə $\text{Sn}_{0,99}\text{Tb}_{0,01}\text{Se}$ nümunəsində 7% artır, $\text{Sn}_{0,95}\text{Tb}_{0,05}\text{Se}$ nümunədə şüalanmadan sonra 10% azalır. Ana maddədən (p-SnSe) onun terbiumlu bərk məhlullarına keçdikdə α -nın həm qiymətinin, həm də işarə-

sinin dəyişməsi müşahidə olunur. Dəyişmə xarakteri tərkibdə TbSe-nin miqdarından asılı olaraq fərqli xarakter daşıyır. $x_2=0.005$ tərkibli nümunənin $\alpha(T)$ asılılığı $T=80-250\text{K}$ temperatur intervalında $500 \frac{\text{mkV}}{\text{K}}$ -dən $1000 \frac{\text{mkV}}{\text{K}}$ -ə qədər artır və temperaturun sonrakı artımında işarəsi müsbət qalmaqla monoton azalma müşahidə olunur. Qeyd edək ki, aşağı temperaturlarda aşqar keçiriciliyi oblastında temperatur artımı ilə termo.e.h.q-si (α) artması, məxsusi keçiricilik oblastıda isə azalması mü-rəkkəb zona qurluşlu birləşmələr və bərk məhlullar üçün xarakterikdir [8].

$\text{Tb}_{0,01}\text{Sn}_{0,99}\text{Se}$ və $\text{Tb}_{0,05}\text{Sn}_{0,95}\text{Se}$ monokristalları istiqamətlənmiş ərimə zonası üsulu ilə alınmışdır və şüalanmadan əvvəl və sonra bir sıra elektrofiziki xassələri 77-320 K intervalında tədqiq olunmuş və bu xassələrə γ - şüaların təsiri araşdırılmışdır. $\text{Sn}_{1-x}\text{Tb}_x\text{Se}$ ($x = 0; 0,01; 0,05$) sistem ərintilərinin 300K temperaturda bəzi kinetik parametrlərinin: xüsusi elektrikkeçiriciliyi (σ), termo.e.h.q (α), yükdaşıyıcıların konsentrasiyası (n) və Holl yürüklüyünün (μ) şüalanmadan əvvəl və şüalanmadan sonra təyin edilmiş qiymətləri cədvəldə verilmişdir.

Cədvəl

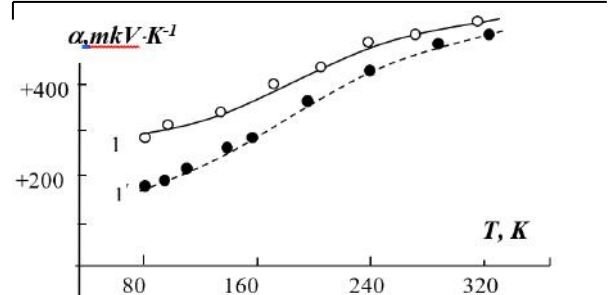
$T=300\text{K}$ -də $\text{Sn}_{1-x}\text{Tb}_x\text{Se}$ ərintilərinin kinetik parametrləri

Tərkiblər	Şüalanmadan əvvəl					Şüalanmadan sonra				
	tip keç	n, $p(n) \text{ sm}^{-3}$	$\sigma, \text{Om}^{-1} \cdot \text{sm}^{-1}$	$\mu, \frac{\text{sm}^2}{\text{V} \cdot \text{san}}$	$\alpha \frac{\text{mkV}}{\text{K}}$	tip keç	n, sm^{-3}	$\sigma, \text{Om}^{-1} \cdot \text{sm}^{-1}$	$\mu, \frac{\text{sm}^2}{\text{V} \cdot \text{san}}$	$\alpha \frac{\text{mkV}}{\text{K}}$
SnSe	p	$7,2 \cdot 10^{17}$	18	156	420	p	$6,8 \cdot 10^{17}$	16,7	153	+465
$\text{Tb}_{0,01}\text{Sn}_{0,99}\text{Se}$	n	$6 \cdot 10^{15}$	$6,3 \cdot 10^{-3}$	6,5	-297	n	$6,9 \cdot 10^{14}$	$8,1 \cdot 10^{-3}$	30	-315
$\text{Tb}_{0,05}\text{Sn}_{0,95}\text{Se}$	n	$9,8 \cdot 10^{16}$	$4,5 \cdot 10^{-2}$	3	-210	n	$4,0 \cdot 10^{17}$	$3,2 \cdot 10^{-1}$	20	-191

Cədvəldən göründüyü kimi şüalanmadan sonra kinetik parametrlərin qiymətlərində xeyli dəyişmələr baş vermişdir. 2-ci nümunədə yükdaşıyıcıların konsentrasiyası bir tərtib azalmış, 3-cü nümunədə isə əksinə yükdaşıyıcıların konsentrasiyası bir tərtib, yürüklüyü isə 6 dəfə artmışdır. $T=300\text{K}$ -də termo e.h.q. (α) şüalanmadan sonra 2-ci nümunədə, $\Delta\alpha=18\text{mkV/dər}$ artdığı halda, 3-cü nümunədə $\Delta\alpha=19\text{mkV/dər}$ qədər azalmışdır.

Məlum olduğu kimi yarımkeçirici materiallarda termo e.h.q. (α) yükdaşıyıcıların konsentrasiyasına və defektlərə qarşı çox həssasdır. Ona görə alınmış nümunələrin termo e.h.q-ə γ -şüaların təsirini öyrənmək məqsədi ilə yuxarıda göstərilidiyi kimi $T=77-320\text{K}$ temperatur intervalında $\alpha(T)$ asılılığı şüalanmadan əvvəl və sonra ölçülmüş və analiz edilmişdir.

Şəkil 2-də SnSe, $\text{Tb}_{0,01}\text{Sn}_{0,99}\text{Se}$ və $\text{Tb}_{0,05}\text{Sn}_{0,95}\text{Se}$ nümunələrinin termo e.h.q-nin şüalanmadan əvvəl və sonra temperatur asılılığı verilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, $T=85\text{K}$ temperaturunda α -nın qiyməti SnSe və $x=0,01$ tərkibli nümunədən fərqli olaraq $x=0,05$ tərkibli nümunədə şüalanmadan sonra 16% azalmışdır. Əksinə olaraq $x=0,01$ tərkibli nümunədə -22%, SnSe birləşməsində isə -18% artma müşahidə olunmuşdur [2].



Şəkil 2. Termo.e.h.q - α , temperatur asılılığı 1-SnSe; 2- $\text{Sn}_{0,99}\text{Tb}_{0,01}\text{Se}$, 3- $\text{Sn}_{0,95}\text{Tb}_{0,05}\text{Se}$. 1', 2' və 3' -şüalanmadan sonra

Şüalanma kristallarda bir-birləri ilə və kimyəvi aşqarlarla qarşılıqlı təsirdə olan vakansiyalar, düyünlər-arası atomlar, müxtəlif tip kompleks defektlərin yaranmasına səbəb olur. Radiasiya defektləri öz-özünü kompensasiyaya gətirir və yarımkeçiricinin keçiriciliyi məxsusi keçiriciliyə yaxınlaşır. γ -şüalarının təsiri ilə n-

tip keçiriciliyə malik Sn_{1-x}Tb_xSe (x=0,01; 0,05) kristallarında, donor aşqar mərkəzlərini kompensasiya edən, akseptor tipli radiasiya defektləri yaradır və radiasiya defektləri hesabına yükdaşıyıcıların yüürlüklüyü və elektrik keçiriciliyi artır.

Tədqiqat nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, Sn_{1-x}Tb_xSe sistem ərintilərində şüalanma zamanı yaranan akseptor tipli nöqtəvi radiasiya defektlərin konsentrasiyası x=0,05 tərkibli nümunədə nisbətən daha azdır və radiasiyaya qarşı daha davamlıdır.

-
- [1] *J.I. Huseynov, K.A. Hasanov, T.A. Jafarov & I.I. Abbasov.* Compensating Effect of Terbium Impurity on the Conductivity of Tb_xSn_{1-x}Se Solid Solutions. Ukrainian Journal of Physics, 2020. 65(3), 225.
- [2] *T.A. Jafarov.* The occurrence of defects in hard alloys Tb_xSn_{1-x}Se within the γ -irradiation, Journal of Radiation Researches, vol.6, №2, 2019, Baku, p.p. 126-131.
- [3] *Z. Li, Y. Yang, X. Wang, W. Shi, D.J. Xue, J.S. Hu.* Three-Dimensional Optical Anisotropy of Low-Symmetry Layered GeS. ACS Appl Mater Interfaces. 2019 Jul 10; 11 (27): 24247-24253.
- [4] *Y. Shi, C. Sturm, H. Kleinke.* Chalcogenides as thermoelectric materials. J. Solid State Chem. 2019, 270, 273–279.
- [5] *J.I. Huseynov, T.A. Jafarov.* The influence of γ -irradiation on thermoemf and heat conduction of Ln_{0,01}Sn_{0,99}Se (Ln-Pr, Tb, Er) monocrystals// World Journal of Condensed Matter Physics, 2014, 4, № 1., p. 1-5.
- [6] *J. Chen, J. Zhan, Sh.K. Kolawole, L. Tan et al.* Article Effects of Different Rare Earth Elements on the Degradation and Mechanical Properties of the ECAP Extruded Mg Alloys // Materials. 2022, 15, 627.
- [7] *C. Zhou, Y.K. Lee, Y. Yu, S. Byun, Z.Z. Luo, H. Lee, B. Ge, Y.L. Lee, X. Chen, J.Y. Lee et al.* Polycrystalline SnSe with a thermoelectric figure of merit greater than the single crystal // Nat. Mater. 2021, 20, 1378–1384.
- [8] *Дж.И. Гусейнов, М.И. Мургузов, Ш. С. Исмаилов, О.М. Гасанов, Т.А. Джафаров.* Термоэлектрическая добротность твердых растворов (SnSe)_{1-x}(Er₂Se₃)_x. Прикладная физика, 2016, № 4, с. 87-93.

MİKRODÜNYANIN “QEYRİ-SƏLİS” MAHIYYƏTİNİN DƏRK EDİLMƏSİNDƏ MAKS PLANK VƏ BOLTSMANNIN KOMPLEKSİYONLARI: ARİSTOTEL VƏ LÜTFİ ZADƏ MƏNTİQLƏRİ

E.A. İSAYEVA

Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi
Fizika İnstitutu AZ1143, Bakı ş., H.Cavid pr.,131
e-mail: EAIsaeva@mail.ru

Bu işdə mikrokosmosun mahiyyətinə daha dərindən nəzər salmaqla mütləq qara cismin şüalanması, Lütfizadənin qeyri-səlis çoxluqlar (QSC) nəzəriyyəsində qeyri-adi kvant məntiqinin qeyri-səlis məntiqlə əlaqəsinə baxılır. Maks Plank və Boltsmannın kompleksion anlayışları bu məsələdə fayda verir.

Açar sözlər: Məntiq, mütləq qara cismin şüalanması, sərbəstlik dərəcəsi

PACS: 72.80.Rj, 73.25.+i, 73.61.Wp

GİRİŞ

Bu işdə, Lorentzin “Physics-USpekhi” (1926) jurnalındakı məqaləsi bizə statistikanın köhnə suallarına, Boltsmann kompleksionları və Plankın kvant nəzəriyyəsinə yeni şəkildə baxmağa imkan verdi.

Bildiyiniz kimi, Maks Plank tərəfindən qara cisim şüalanmasının tədqiqi kvant dünyasına qapı oldu. Klassik fizika ilə yanaşı, kombinatorikanın da ona xidmət etdiyi vurğulanmır.

Kirxgof kəşf etdiyi kimi, məlumdur ki, mütləq qara şüalanmanın enerji sıxlığı cismin xüsusiyyətlərindən asılı deyil, yalnız T temperatur və λ dalğa uzunluğundan asılıdır. Boltzmann bu temperaturu şüalanma enerjisi ilə əlaqələndirdi $E = \sigma T^4$ (Stefan-Boltzman qanunu). Win isə bu temperaturu həm də şüanın dalğa uzunluğu ilə əlaqələndirdi, $\lambda_{max} T = const$. Enerjini E eyni zamanda həm temperatur, həm də dalğa uzunluğu ilə birləşdirən bir düstur vermək lazım idi. Elə görünürdü ki, nəzəriyyəçilərin bu son məsələsi klassik fizika çərçivəsində problemsiz həll olunacaq. Amma məlum oldu ki, belə deyil.

Mexanikadan sərbəstlik dərəcələri üzrə enerjinin vahid paylanması qanununu hər kəs bilir. Sərbəstlik dərəcələrinin sayı cismin mövqeyini tam müəyyən etmək üçün lazım olan ən kiçik müstəqil koordinat sayı kimi başa düşülür. Beləliklə, ideal qazdakı bir molekul üçün Boltzmann enerjinin sərbəstlik dərəcələri üzrə vahid paylanması qanununu verdi - bu, molekulun hər bir sərbəstlik dərəcəsi üçün orta hesabla $kT/2$ - enerjiyə malikdir. Amma dalğa üçün bu sərbəstlik dərəcələri k dalğa ədədi deməkdir, yəni 2π intervalına nə qədər dalğa uzunluğu yerləşir, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. Qısa dalğalar üçün k böyükdür, yəni qısa dalğa çox sayda vibrasiya sərbəstlik dərəcəsinə malikdir.

Boltzmannın müəyyən etdiyi kimi, $kT/2$ eyni enerji hər dərəcəyə düşürsə, o zaman ultrabənövşəyi fəlakət (UB) Reyleigh-Jeans düsturunda əks olunur. UB – tamamilə qara cismin sonsuz parlaqlığıdır, lakin təcürbədə müşahidə edilmir. Plankın izah etdiyi kimi, bunun səbəbi qısa dalğanın bütün sərbəstlik dərəcələrinin şüalanma üçün enerji almamasıdır. Beləliklə, hər bir atom müxtəlif uzunluqlu və tezlikli dalğalar yayır ki, bu

da Planka xətti vibratorları, və ya Plank rezonatorlarını müqayisə etməyə imkan verir. Onların hər birinin müəyyən rəqs rəqəmi var -bunlar sürətli və ya yavaş rəqslərdir. Hər bir rezonator həm də məlum elektrik yükünü daşıyır və titrəyərək elektromaqnit dalğalarını şüalandırır və udur. Beləliklə, tamamilə qara cismin boşluğunun daxilindəki şüa enerjisi sahəsi rezonatorlarla qarşılıqlı təsirə girir. Verilmiş T temperaturda bütün rezonatorlar eyni istilik enerjisini alırlar. Amma qara cismin boşluğunun içindəki parlaq enerjiyə gəlincə, mənzərə fərqlidir. Elektrodinamikadan bildiyimiz kimi, rezonatorun rəqs tezliyi nə qədər yüksək olarsa, onun şüalanma tezliyi də bir o qədər yüksək olar. Bu zaman vibrator öz enerjisini itirir. Ancaq eyni zamanda, mövcud şüalar rezonatorun rəqsinə səbəb də ola bilər, onun hərəkətini gücləndirə bilər. Ümumiyyətlə desək, rezonatorun enerjisi U zamanla arta və ya azala bilər. Klassik fizikada termodinamik sərhəddə rezonator enerjisi U üçün orta qiymət tələb edir, çünki proseslərin bütün təsadüfi dəyişən detalları öyrənilmir.

Əgər rezonatorun sərbəstlik dərəcələri üzrə enerjinin vahid paylanması olarsa, bu orta U enerji mümkündür. Lakin, Plankın dediyi kimi: “mikrokosmosun “makroskopik” müşahidəsi vaxtı t , rezonatorun rəqs proseslərinin bir çox dövrlərini əhatə edə bilsə də, lakin bununla belə, əgər enerjinin sərbəstlik dərəcələri üzrə vahid paylanması yoxdursa, bu zaman intervalı t , o qədər kiçikdir ki, bu interval ərzində müşahidə olunan kəmiyyətlərin məruz qaldığı dəyişikliklərə laqeyd qalır”. Məsələn, müşahidə olunan radiasiya sahəsi. Biz rezonatorun özünü deyil, onun yaydığı şüanı müşahidə edirik. Daha doğrusu, bir çox rezonatorlardan N olan şüaları müşahidə edirik. Bu şüaların enerjisinin fərqliliyində Plank xaos, nizamsızlıq, S sisteminin entropiyasını görür. Məşhur

$$dU = TdS \quad (1)$$

düsturundan istifadə etməklə biz şüalanma enerjisini da analiz edə bilərik.

Plank qeyd edir ki, nə qədər yaxşıdır ki istilik tarazlığında onların N rezonatorun ümumi entropiyasının $S_N = NS$ artması, onların ümumi enerjisini $U_N = NU$ ar-

tırır. Bu, ona $dNU=TdNS$ keçidi verir. Beləliklə, kaos S var, ümumi enerjisi U_N olan N rezonatorlar çoxluğu var və bunun W termodinamik ehtimalını tapmaq lazımdır. Termodinamik ehtimalı W tapandan sonra Boltzman prinsipindən istifadə etməklə, rezonatorlar sisteminin S entropiyası tapılır.

$$S=k\log W \quad (2)$$

burada, W statistik çəki də adlanır. Çox adam bilmir ki, W öz tarixini Boltzmann kompleksionları ilə başlayır.

KOMPLEKSİONLAR. BU NƏDİR?

"Complexion" sözü ingilis dilindən tərcümədə "dəri" deməkdir. Cihazın fərqləndirdiyi E enerjisini biz N atomlu sistemin vəziyyəti adlandırırıq və bu sistemin "üzü"dür, yəni bütün N-dən K-nin hansı hissəsi prosesdə iştirak edir ki, bu da özünü göstərir. Amma N-dən K-nin neçə belə kombinasiyası eyni "sifətin" müxtəlif "rəngləri"dür ki, Boltzmann rənglərin sayını kompleksion sayı adlandırır. Bu gün fiziklər bu rəqəmi degenerasiya dərəcəsi, statistik çəki və ya termodinamik ehtimal W adlandırır. Statistik çəki W sistemin entropiyasını $S=k\log W$ təyin edir. Bildiyimiz kimi, sistemin enerjisi entropiyadan asılıdır, $dU=TdS$. Boltzmann üçün onun kompleksionları - təkrar olunmayan kanbinezondur:

$$C_N^k = \frac{N!}{k!(N-k)!}, \quad (3)$$

Boltzmann üçün bir enerji dəyəri var, yəni N-dən K molekulanın malik ola biləcəyi bir növ keyfiyyəti. Məsələn, K sayda molekula, $h\epsilon^+$, verilmiş enerjiyə malikdir, lakin $(N-k)$, yox-. Aristotelin klassik iki qiymətli məntiqi baxımından nə qədər " $h\epsilon^+$ ", nə qədər " yox^- ". Əgər Boltzman obyektin başqa "keyfiyyətləri" ilə də maraqlansaydı, yəni " yox^- " vəziyyətində N atomlarından l, m, .. atomları daha hansı enerji u_2, u_3, u_4, \dots almışdır, onda burada təkrarları olan permutasiya L kombinator düsturundan istifadə edərdi:

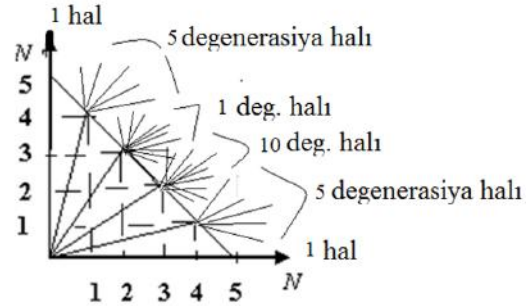
$$L_N^{k,l,m,\dots} = \frac{N!}{k!l!m! \dots}, \quad (4)$$

Bu, Boltzmanı maraqlandırmırdı, amma, Gibbsi maraqlandırdı. Məhz buna görə də Gibbs hesab edir ki, C_N^k təkrarları olmayan kanbinezon yox-, yəni $L_N^{k,l,m,\dots}$ təkrarları olan permutasiyalar termodinamik ehtimal və ya statistik çəkidir. Bunlar Gibbs üçün onun kompleksionlarıdır. İki dəyərli məntiqi qüvvədə qalır. Lakin, Boltzmanın tərəfini tutan Plank Gibbsin yanaşmasının yanlışlığını gördü.

Atomlar dünyası - bu bizim üçün görünməz bir dünyadır, atomlar eynidir, fərqlənməzdilər. Buna görə Plank üçün üç kombinator ölçülərdən - permutasiya, aranjeman və kanbinezondan - yalnız təkrarları olunan kanbinezon qalır:

$$A_P^N = C_{N+P-1}^N = \frac{(N+P-1)!}{(P-1)!N!} \quad (5)$$

O, bizə deyir ki, bir sistemin neçə vəziyyətə yəni enerjiyə malik olacağını bilmək bizə vacibdir. P-nin mənası odur ki, biz atomun keyfiyyətlərini elan edirik - bu, $E_1, E_2, E_3 \dots E_p$ müxtəlif enerjilərdir P sayda.



$$C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!} \quad \text{Bu degenerasiya olunan halların sayıdır}$$

N=5 olduqda degenerasiya hallarının sayı:
1+5+10+10+5+1=32=2⁵.

Şəkil 1.

Deməli, P rəqəmi cismin, "keyfiyyətlərinin" sayıdır, N sayı isə atomların "sayı"dır. Kombinatorikada "kəmiyyət" və "keyfiyyət" kateqoriyaları bütün permutasiya, aranjeman və kanbinezonda yer tapır. Eyni "keyfiyyət" eyni zamanda obyektlərin bütün sayında ola bilər, lakin əksinə ola bilməz, bir obyekt eyni zamanda bütün "keyfiyyətlərə" malik ola bilməz. Gördüyümüz kimi, Aristotelin iki dəyərli məntiqi klassik kombinatorikada mövcuddur. Sadəcə olaraq soruşmaq lazımdır ki, bu digər "yox" halı nədir, onda iki dəyərli məntiqi çərçivəsindən kənara çıxma bilərsiniz. Amma elə deyil. "Keyfiyyətlərinin" sayı P artır, lakin qadağa qalır, hansı bir atomda müəyyən bir zaman anında yalnız bir "keyfiyyət" ola bilər. Soruşuruq: "Hə, yoxsa yox, bu atom bu keyfiyyətə malikdir, $h\epsilon$ ya yox?". Bir çox atom eyni anda bir keyfiyyətə malik ola bilər, əksinə deyil, bir atom eyni anda bir çox keyfiyyətə malik ola bilməz.

Kanbinezondan sonra bir-birindən fərqlənməz atomlar üçün onların yerləşdirilməsi (aranjemanları) və dəyişdirilməsi (permutasiyaları) məsələsinin mənası yoxdur. Boltzmann və Plank məhz buna inanırdılar. Amma, Boltzmann üçün təkrar olunmayan kanbinezon C_N^k (formula 2) olarsa, Plank üçün təkrar olunan kanbinezon A_P^N (formula 3) olur. Plankın A_P^N -sindən Boltzmann birini seçir və bu hall üçün degenerasiya mənasını tapır - bunlar təkrarı olmayan kanbinezonlardı, yəni kompleksionların saylarıdır. Boltzmann eyni hissəciklərə malik gözə görünməz mikrokosmos üçün təkrar olunmayan kanbinezonlardan istifadə edir. "Mən bir obyekt seçmişəm, o, artıq mənim tərəfimdən qeyd olunub və təkrarsız oldu", - Boltzmann belə düşünür. O hər birini ayrıca sistemin istənilən vəziyyətini nəzərdən keçirə bilər, çünki enerjinin sərbəstlik dərəcələri üzrə vahid paylanması mövcuddur. O, seçilmiş vəziyyətinin yalnız içindəki kaosu, degenerasiyanın, yəni kompleksionların sayını müəyyən etməlidir (şəkil 1-də, bütün degenerasiya halları). Atomların sayından asılı olmayaraq, hər bir kompleksionun yaşamaq, enerjinin bərabər hissəsini almaq şansı var. Böyük bir sistemdəki böyük kaos səbəbiylə sistemin enerjisi məhz orada daha güclü şəkildə dəyişəcək $dU=TdS$. Bolts-

mann öz sistemlərinin öyrənilməsinə belə yanaşır. Amma, Plank üçün xaos ən əvvəldən, təkrarlanan kanbinezonlardan başlayır. Əlbəttə, hansı sistem, böyük və ya kiçik olması - rol oynayır. Rezonatorlar enerjini necə alacaqlar, hamısını və ya heç birini, birini, ya ikisini, ... və s. – bunlar hamısı təkrarlanan kanbinezonlardır (formula 5). Plankı da bu – nə qədər belə variantlar olacaq maraqlandırır, amma Boltzmanı yox. Çünki Boltzmanın klassik mikrodünyasında obyektlər fərqlənə bilər, lakin Plankın kvant dünyasında obyektlər, atomlar prinsipial olaraq fərqlənməzdilər. Bu Plankın vizionu çox faydalı oldu.

İdeal kvant qazının molekullarının paylanmasını əldə etməkdə Bose-Einsteinə yalnız Plankın təkrarlanan kanbinezonları faydalı oldu. İ.G.Tamm məqaləsində məhz bunu deyir: “Molekulların fərdiləşdirilməsindən imtina haqqında Plankın ideyasının ardıcıl tətbiqi qaçılmaz olaraq Bose-Einstein nəzəriyyəsinə gətirib çıxarır və onda qəbul edilmiş statistik çəki W düsturu dərin fiziki mənə daşıyır, və maddənin təbiəti ilə bağlı fundamental fikirlərə köklü şəkildə yenidən baxılması ehtiyacını doğurur”. Bu statistik çəki W düsturu Plankın təkrarlanan kanbinezonlarıdır:

$$W = A_P^N = C_{N+P-1}^N = \frac{(N+P-1)!}{(P-1)!N!} \quad (5.1)$$

Bu hamısı kombinator formulalar Aristotelin səlis iki vahidli məntiqi üzərində dayanıblar.

Lakin öz qğara cisimi üçün Plank daha da dərin fikirləşərək bu formulada (5.1) N - nən P –nin yerini dəyişdirərək daha dərin mənaya bizi aparır.

$$W = A_N^P = C_{N+P-1}^P = \frac{(N+P-1)!}{(N-1)!P!} \quad (6)$$

Yuxarıda deyilənlər öz yerində qalır. Mikrobyektlər fərqlənməzdilər, qara cisimdə enerji bərabər paylanmır, qısa dalğalı rezonatorlardan hamısı bu enerjiddən almır. Bunlar qalır, amma əlavə olunur makroskopik müşahidənin mikrodünyada müşahidə zamanı t . Bu zaman kiçik olduğuna görə biz rezonatorun öz orta enerjisinə malik olduğunu görə bilmirik, bilsəydik bu enerji U – ya bərabər olardı və N rezonator üçün $U_N=NU$ olardı. Lakin Plank dediyinə görə: “Rezonatorun enerjisi U kiçilir və böyüyür, lakin termodinamika prinsipində U orta dəyər kimi götürülür. Amma bizim makroskopik müşahidə zamanımız çox kiçik olduğuna görə biz bunu edə bilmirik və bunda xaos, entropiya anlayışına gəlməliyik”. Bir rezonatorun orta enerji yox, eyni zamanda bir neçə sayda kvant enerjisi

$\varepsilon : U=A\varepsilon$. Bu, yeni anlayış səviyyəsinə keçid deməkdir ki, bu mikro-obyekt eyni vaxtda $1\varepsilon, 2\varepsilon, 3\varepsilon, \dots$ enerjilərinə sahib ola bilər. Hegel öz “Məntiq” kitabında yazırdı ki, bizim dünyanı anlamaq üçün 3 kategoriya var: Kəmiyyət, keyfiyyət və ölçü. Ölçü - keyfiyyətli kəmiyyətdir. Burada biz hansısa bir orta keyfiyyətdən deyirik, keyfiyyətin fluktuasiyaları az olmalıdır. Lakin bu olmayanda ölçü itir və dünyanın mahiyyəti itir. Bu o deməkdir ki, klassik dünyanın yerinə kvant dünyası gəlir. Burada kəmiyyət, keyfiyyət yerlərini dəyişərək yeni ölçü - kəmiyyətli keyfiyyət gəlir.

Plank deməyə məcbur oldu: “ U_N enerjini davamlı, çox sayda bölünə bilən kəmiyyət kimi deyil, diskret kəmiyyət kimi təsəvvür etmək lazımdır. Belə hissələrdən birini, enerji kvantı ε adlandırsaq, onda alırıq

$$U_N=NU=P\varepsilon,$$

burada P tam ədəddir, ümumiyyətlə desək, böyük rəqəmdir, halbuki biz ε dəyəri məsələsini hələlik açıq qoyuruq”. Bu Plankın mövqeyində kvant nəzəriyyəsinin əsası dayanır. Amma Plank bunu bəyənirdi. ε bölünməz bərabər enerji kvantı anlayışı onun üçün çox süni idi.

Niyə P böyük rəqəmdir? Çünki $P=A*N$, və N ümumi bu ε kvant enerjisini daşıyan rezonatorların çox olduğu saydır. Niyə ε bərabər olmalıdır, yəni $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots$ kvantları yox, amma eyni $1\varepsilon, 2\varepsilon, 3\varepsilon, \dots$ Buna səbəb, yeni ölçü - kəmiyyətli keyfiyyət ortaya çıxıb, onun adı kvant enerjisidir. Buna görə də, yeni fizika – kvant fizikası gəlir. Klassik fizikadan çox fərqli olduğuna görə o özünə ad qazanır. Klassik fizikada cismin superpozisiya vəziyyətinə, yəni eyni zamanda iki fərqli vəziyyətdə olmasına, rast gəlinirmi? Heyzenbergin geyri-müəyyənlik prinsipləri, Şredinger pişiyinin eyni zamanda sağ və ölü olmağı bizim klassik aristotel məntiqinə sığa bilirmi? Əlbəttə, yox. Bu suallardan qabaq Plank var idi və onun gecə-gündüz düşündüyü problem var idi – mütləq qara cismin şüalanması.

NƏTİCƏ

Adi klassik Aristotel məntiqi çərçivəsinə sığmaz idi Plankın bu $U_N=P\varepsilon$ kvant nəzəriyyəsinin əsası. Ona görə də Plank heç sevmədi özünün bu kvant nəzəriyyəsinə. Lakin Lütfi Zadənin qeyri-səlis çoxluqlar nəzəriyyəsinə qeyri-səlis məntiq çərçivəsinə Plankın dəyərli düşüncələri sığardı çünki, bu yeni paradigmadır. Burada Lütfizadə ehtimal ölçüdə fərqli olaraq mümkünlük ölçüsünə baxır və bu bizə mikrobyektdə halların superpozisiyasına malik olmağına imkan verir.

- [1] G.A.Lorents. «Макс Планк и теория квантов», UFN (УФН), 1926, том 6, 2, səh. 118-146
- [2] N.Y.Vilenkin. «Комбинаторика». Изд. Наука 1969. 323 səh. (rus dilində)
- [3] L.Zade. «Fuzzy Sets». Information and Control Journal, 1965, 8, p.338 – 353.
- [4] İ.G.Tamm. «Новые принципы статистической механики Бозе-Эйнштейна в связи с

вопросом о физической природе материи» UFN (УФН), 1926, том 6, 2, səh. 112- 141.

- [5] E.A.İsayeva. “Human perception of Physical Experiment and the Simplex Interpretation of Quantum Mechanics”, Progress in Physics, 2008, №1, pp.47-52.
- [6] E.A. İsayeva. “On the Necessity of Aprioristic Thinking in Physics”, Progress in Physics, 2008, №3, p.84 -86.

- [7] *E.A. İsayeva*. “The Perception of Micro-and Macrocosms and the Conception of Number in Physics, Quantum Mechanics” Nova Science Publishing, USA, 2011, Editors: Jonathan P. Groffe, pp. 353-362.
- [8] *E.A. İsayeva*. “Запутанность в шредингеровском эксперименте”, Письма в ЭЧАЯ, 2007, т.4, №2(138), с. 312-318
- [9] *E.A. İsayeva*. “Rational Thinking and Reasonable Thinking in Physics: The Einstein’s Relativity Theory as achievement of reasonable thinking”. International Scientific Conference “Physical Interpretations of Relativity Theory”, PIRT-2017, Bauman Technical University, Moscow, 3 – 6July, 2017, p.69
- [10] *E.A. İsayeva*. “The role of fluctuations in artificial intelligence from Zadeh’s fuzzy sets point of view”, IFAC Paper on Line, 51-30, p.812-815, 2018.

NANO ÖLÇÜLÜ AL NAZİK TƏBƏQƏLƏRİNİN ALINMASI VƏ ONLARIN QURULUŞ XÜSUSİYYƏTLƏRİ

X.N. ƏHMƏDOVA^{1,2}, S.H. CABAROV¹, Ş.N. ƏLİYEVƏ^{1,2}, X.O. SADIQ²

¹ Azərbaycan Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutu, Bakı, AZ-1143, Azərbaycan

² Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti, Bakı, AZ1010 Azərbaycan

x.khalilova@rambler.ru

Termiki tozlandırma metodu ilə vakuum şəraitində Al nazik təbəqələri sintez edilmişdir. Nazik təbəqələr hissəciklərinin ölçüsü 40-60 nm olan nanotozdan alınmışdır. Müxtəlif qalınlıqlarda alınmış nazik təbəqələrin kristal quruluşu və səth quruluşu tədqiq edilmişdir. Nazik təbəqənin kristal quruluşunun, toz halında Al nanohissəciklərinin kristal quruluşu ilə müqaisəsi aparılmışdır. Tədqiqatlar rentgen difraksiyası metodu ilə aparılmışdır. Al nazik təbəqələrinin səth quruluşu və tərkib analizi Skanedic Elektron Mikroskopunda aparılmışdır. Tərkib analizlərindən məlum olur ki, nazik təbəqələr əsasən Al-dan ibarətdir. Alınmış nazik təbəqələrin səth quruluşu Atom Qüvvə Mikroskopunda da tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, alınmış təbəqələr kifayət qədər bircins alınmışdır. Nazik təbəqələrin 2D və 3D formatlarda səthi tədqiq edilmiş və müəyyən edilmişdir ki, bu təbəqələrin qalınlığı 15, 20 və 40 nm-dir.

Açar sözlər: Kristal quruluş, SEM analiz, AQM.

PACs: 78.66.Sq 73.50.-h, 73.61.-r

1. GİRİŞ

Nano ölçülü materiallarda müxtəlif maraqlı fiziki xassələrin müşahidə edilməsi, onların öyrənilməsi istiqamətində aparılan tədqiqatları sürətləndirmişdir [1,2]. Məlumdur ki, materialların ölçülərində kiçilmə baş verdikcə bir çox fiziki xassələri dəyişir. Ona görə də nano ölçülərdə materialların tədqiq edilməsi onların tətbiq imkanlarını daha da genişləndirir. Nanomateriallar arasında metal və metal oksidləri xüsusi yer tuturlar. Müəyyən edilmişdir ki, metal nanohissəcikləri əsasında alınmış kompozit materiallarda müxtəlif yeni funksional xassələr müşahidə edilir [3, 4].

Nano ölçülü Al son zamanlarda ən geniş tədqiq edilən nanomateriallardandır [5]. Onların belə geniş tədqiq edilməsinin səbəbi tətbiq imkanlarının geniş olması ilə əlaqədardır. Müəyyən edilmişdir ki, normal halda açıq havada Al nanohissəcikləri su molekulları ilə birləşərək Al(OH)₃ əmələ gətirirlər. Quruluş tədqiqatları nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, Al nanohissəciklərinin kristal quruluşu Fm-3m fəza qruplu kubik sinqoniya malik olur. Al(OH)₃ birləşməsinin kristal quruluşu isə P₁2₁/a₁ fəza qruplu monoklin simmetriyalı kristal quruluşu uyğun gəlir. Bu birləşmə xarici təsirlərə qarşı davamlı olmur. Müəyyən edilmişdir ki, elektron şüalanması zamanı alüminium hidrokسيد parçalanır və su molekulları ayrılır. $\Phi = 1.03 \times 10^{18} \text{ sm}^{-2}$ fluence qədər elektron şüası ilə şüalanmış nümunələrdə təmiz alüminium nanohissəcikləri alınmışdır. Tədqiqat nəticələri rentgen difraksiyası və Raman spektroskopiyası metodları ilə alınmışdır [6].

Al nanohissəciklərinin müxtəlif fiziki xassələrinin tədqiq edilməsinə baxmayaraq, nano ölçülü nazik təbəqələri kifayət qədər tədqiq edilməmişdir. Son zamanlarda ölçülərin kiçildilməsi istiqamətində aparılan tədqiqatlar arasında nazik təbəqələrin öyrənilməsi xüsusi yer tutur. Məlumdur ki, nazik təbəqələr halında materiallar fərli xüsusiyyətlərə malik olurlar. Onların fiziki xassələri toz və kristal halında olan xassələrindən fərqlənirlər. Yarımqeçirici materialların nazik təbəqələrinin

də yeni elektrik və optik xüsusiyyətlər müşahidə edilmişdir [7-11]. Metallar yarımqeçirici materiallarla müqayisədə fiziki proseslərə daha həssas olurlar. Ona görə də, onlarda ölçü effektlərinin tədqiq edilməsi vacibdir. Al nazik təbəqələrinin alınması, quruluşunun və fiziki xassələrinin tədqiq edilməsi bu materialın müxtəlif sahələrdə tətbiq imkanlarını daha da genişləndirəcəkdir. Bu işdə Al nazik təbəqələri alınmış, onların səth və kristal quruluşları, kimyəvi tərkibi tədqiq edilmişdir. Tədqiqatlar rentgen difraksiyası, Skanedic Elektron Mikroskop və Atom Qüvvə Mikroskopu metodları vasitəsilə otaq temperaturunda və normal şəraitdə yerinə yetirilmişdir.

2. TƏCRÜBƏLƏR

Nazik təbəqələrin alınması. Tədqiq obyektini olaraq $d = 40-60$ nm ölçülü Al nano hissəcikləri götürülmüşdür (SkySpring Nanomaterials, Inc. 2935 Westhollow Drive, Houston, TX, 77082, USA, <https://www.ssnano.com/>). Nano tozlardan termik tozlandırma metodu ilə nazik təbəqələr alınmışdır. Termiki tozlandırma təcrübəsi Leybold-Herause L-560 markalı vakuum qurğusunda aparılmışdır. Vakuum kamerasında işçi təzyiq $2 \cdot 10^{-5}$ mbar qeydə alınmışdır. Altıq qismində səthi kimyəvi təmizlənmiş 25×19 mm ölçülü şüşə lövhədən istifadə olunmuşdur. Termiki tozlandırmadan əvvəl şüşə altıqın səthində 800 Vt gücündə ion təmizlənməsi aparılmışdır. Tozlanma prosesini yaxşılaşdırmaq məqsədilə şüşə altıq vakuum kamerasında 100 °C-ə qədər qızdırılmışdır. Termiki tozlandırma prosesi 25 san müddətində aparılmışdır. Müxtəlif qalınlıqlarda alınmış a , b və c nümunələrinin foto şəklilə şəkil 1-də göstərilmişdir.

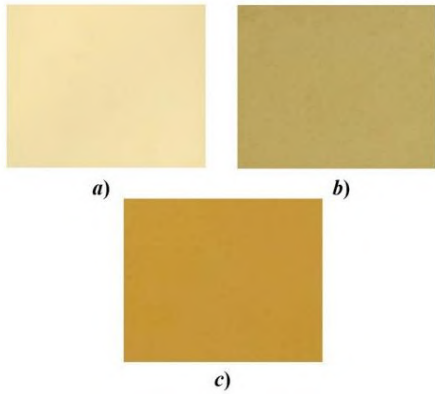
Nümunələrin SEM analizləri Scanning Electron Microscope (ZEISS, SIGMA VP)-unda yerinə yetirilmişdir [9]. Bu mikroskopda otaq temperaturunda materialların səth quruluşunu tədqiq etmək mümkündür. Bununla yanaşı, elektronların elementlərin elektron bulundundan səpilməsinə əsasən kimyəvi element analizi də aparmaq mümkündür. Bu işdə Al nazik təbəqələrində

element analizi aparılmış və faizlərlə miqdarı göstərilmişdir.

Al nazik təbəqələri N8 NEOS Atom Qüvvə mikroskopunda tədqiq edilmişdir. 2D və 3D formatında alınmış şəkillərdən və histogramlardan səth quruluşu haqqında məlumatlar əldə edilmiş, nazik təbəqələrin qalınlığı müəyyən edilmişdir.

3. NƏTİCƏLƏR VƏ MÜZAKİRƏLƏR

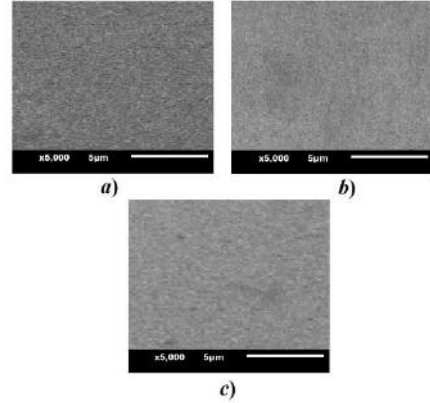
Şüşə altlıqlar üzərində termik tozlandırma üsulu ilə alınmış nazik təbəqələrindən görünür ki, alüminium nanohissəcikləri kifayət qədər bircins formada çökdürülmüşdür (şəkil 1). Lakin nümunələrin quruluşunda rəng fərqi yaranmışdır ki, bu da onların qalınlığında və səth quruluşundakı fərqlərlə əlaqədardır. Alınmış nazik təbəqələrin bircinsliyinin daha dəqiq öyrənilməsi üçün səth quruluşunun tədqiq edilməsinə ehtiyac vardır. Bu məqsədlə, Skanedici Elektron Mikroskopunda səth quruluşu tədqiq edilmişdir. Nümunələrin otaq temperaturunda və normal şəraitdə alınmış səth quruluşları şəkil 2-də verilmişdir. 5000 dəfə böyüdülmüş səth quruluşu mkm miqyasında alınmışdır. Şəkildən görüldüyü kimi, nazik təbəqələr alınmışdır və 5 mkm ölçüdə səthdə xırda çıxıntılardan ibarət olması hiss olunur ki, bu da daha kiçik ölçülərdə səth effektlərinin olmasının göstəricisidir.



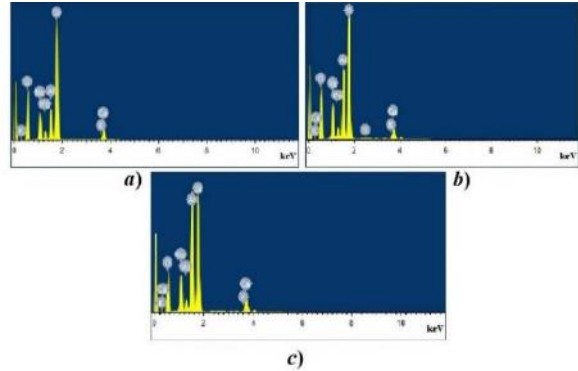
Şəkil 1. Müxtəlif qalınlıqlı Al nazik təbəqələri.

SEM analiz nəticəsində həm də nazik təbəqələrin kimyəvi tərkib analizi də aparılmışdır. Alınmış analiz nəticələri şəkil 3-də verilmişdir.

Şəkil 3-də verilmiş tərkib analizlərindən görünür ki, əsasən Si atomları aşkar edilmişdir. Bu Al nazik təbəqələrinin alındığı şüşə altlığa uyğun gəlir. Analizlərdən görünür ki, Al elementi ilə yanaşı O elementinin də miqdarı yüksəkdir. Oksigen atomlarının konsentrasiyasının yüksək olması, şüşənin tərkibində olması və səthdə olan Al atomlarının O atomları ilə birləşərək Al₂O₃ əmələ gətirməsidir. a, b və c analizlərindən görünür ki, təbəqələrin qalınlığından asılı olaraq nümunələrdə Al atomlarının konsentrasiyası artır.



Şəkil 2. Al nazik təbəqələrinin SEM şəkliləri.



Şəkil 3. Al nazik təbəqələrinin kimyəvi tərkib analizi.

Bu da ondan irəli gəlir ki, oksidləşmə yalnız təbəqələrin səthində gedir. Elementlərin faizlə miqdarları cədvəl 1-də verilmişdir.

Cədvəl 1.

Şüşə altlıq üzərində alınmış Al nazik təbəqələrinin kimyəvi tərkib analizi.

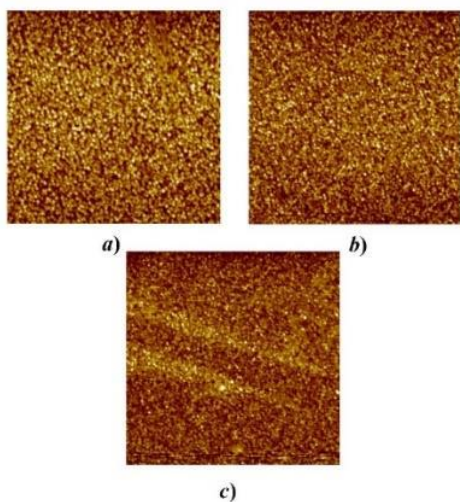
a nümunəsi		b nümunəsi		c nümunəsi	
Element	%	Element	%	Element	%
O	47.30	O	46.87	O	46.64
Si	30.37	Si	26.54	Si	21.90
Na	8.84	Al	12.05	Al	18.51
Al	7.09	Na	8.40	Na	7.47
Ca	4.31	Ca	4.01	Ca	3.51
Mg	2.14	Mg	2.01	Mg	1.81
K	0.12	K	0.13	K	0.16
Cəmi	100	Cəmi	100	Cəmi	100

Cədvəldə verilmiş qiymətlərdən görüldüyü kimi nümunələrdə Al elementinin miqdarı müxtəlifdir. Bu

onunla əlaqədardır ki, Al təbəqəsinin qalınlığı artdıqca daha çox nazik təbəqə analiz edilir. Al təbəqəsinin

qalınlığı az olduqda isə daha çox şüşənin tərkibi analiz edilir. Bu analiz nəticəsində məlum olmuşdur ki, nümunələrin nazik təbəqələrinin qalınlıqları $d_a < d_b < d_c$. Lakin skanedici elektron mikroskopunda təbəqələrin qalınlıqlarını dəqiq təyin etmək mümkün deyildir. Al nazik təbəqələrinin qalınlığını təyin etmək üçün Atom Qüvvə Mikroskopunda tədqiqatlar aparılmışdır.

Al nazik təbəqələrinin qalınlığını və səthin hamarlığını öyrənmək məqsədi ilə Atom Qüvvə Mikroskopunda tədqiqatlar aparılmışdır. 2D formatında nümunələrin səth quruluşu şəkil 4-də verilmişdir.



Şəkil 4. Al nazik təbəqələrinin 2D formatda AFM şəkli.

Şəkil 4-də verilmişdir səth quruluşundan görünür ki, alınmış nazik təbəqələrin səthi ideal hamar alınmışdır. Bu şəkillər 98×98 nm ölçüdə a , b və c nümunələri üçün 2D formatında alınmış səth quruluşlarıdır. Al nazik təbəqələri müxtəlif qalınlıqlarda alınmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, a nümunəsinin qalınlığı: $d_a = 15$ nm, b nümunəsinin qalınlığı: $d_b = 20$ nm, c nümunəsinin qalınlığı isə: $d_c = 40$ nm alınmışdır. AQM tədqiqatları zamanı nümunələrin qalınlıqları haqqında alınmış nəticələr SEM tədqiqatları zamanı səth quruluşu və tərkib analizlərindən alınmış nəticələrə tamamilə uyğun gəlir.

Nümunələrdə Al nazik təbəqəsinin qalınlığı artdıqca tərkib analizlərində Al elementinin miqdarı da artmışdır. AQM məlumatlarına əsasən səthdəki çıxıntıların Z_{ij} maksimum qiyməti alınmışdır. Bu qiymətlərə əsasən səthin orta kvadratik kələkötürlüyü

$$S_q = \sqrt{\frac{1}{N_x N_y} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{i=1}^{N_x} Z_{ij}^2}$$
 və asimmetriya əmsalını

$$S_{sk} = \frac{1}{S_q^3 N_x N_y} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{i=1}^{N_x} Z_{ij}^3$$
 təyin etmək mümkündür.

Burada $Z_{ij} = Z(x_i \cdot y_j)$ səthin orta səviyyəsinə əsasən hesablanır. Göründüyü kimi təcrübədən Z_{ij} qiymətini müəyyən etməklə ona əsasən səth quruluşu haqqında digər məlumatları əldə etmək mümkündür. Müxtəlif qalınlıqlarda alınmış Al nazik təbəqələrinin səth parametrləri cədvəl 2-də verilmişdir.

Cədvəl 2.

Al nazik təbəqələrinin səth parametrləri.

a nümunəsi		b nümunəsi		c nümunəsi	
Z_{ij}	15 nm	Z_{ij}	20 nm	Z_{ij}	40 nm
S_q	8.81 nm	S_q	11.74 nm	S_q	32.86 nm
S_{sk}	0.05	S_{sk}	0.07	S_{sk}	0.14

4. NƏTİCƏLƏR

Şüşə altlıqlar üzərində 15, 20 və 40 nm qalınlıqlı Al nazik təbəqələri alınmış, onların səth quruluşu tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, qalınlıq artdıqca səthdə hamarlaşma baş verir. AQM məlumatlarına əsasən Z_{ij} maksimum qiyməti alınmış, səthin orta kvadratik kələkötürlüyü və asimmetriya əmsalını təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, nazik təbəqənin qalınlığı artdıqca təbəqənin səthi daha hamar olur və keyfiyyəti artır. SEM və AQM analizləri nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, termiki tozlandırma metodu ilə vakuum şəraitində Al nanotəbəqələrinin alınması mümkündür və bu təbəqələr kifayət qədər bircinsliyə malik olurlar.

- [1] T.G. Naghiyev. Neutron-alpha reactions in nano α - Si_3N_4 particles by neutrons, Modern Physics Letters A, 36, 24, P.2150181, 2021.
- [2] E.M. Huseynov, T.G. Naghiyev, A.A. Garibov, N.R. Abbasov, O.A. Samedov, R.C. Gasimov, M.A. Bayramov, EPR spectroscopy of neutron irradiated nanocrystalline boron nitride (h-BN) particles, Ceramics International, 47, 5, P.7218-7223, 2021.
- [3] Y. Zhou, X. Peng, F. Wang. Oxidation of a novel electrodeposited Ni-Al nanocomposite film at 1050 °C, Scripta Materialia, 50, 12, P.1429-1433, 2004.
- [4] J. Musil, P. Zeman, H. Hrubý, P.H. Mayrhofer. ZrN/Cu nanocomposite film - a novel superhard material, Surface and Coatings Technology, 120-121, P.179-183, 1999.
- [5] S. Cheng, Y.H. Zhao, Y.T. Zhu, E. Ma. Optimizing the strength and ductility of fine structured 2024 Al alloy by nano-precipitation, Acta Materialia, 55, 17, P.5822-5832, 2007.
- [6] S.H. Jabarov, T.T. Abdullayeva, S. Huseynli, M.N. Mirzayev, A.S. Abiyev, E. Demir, M.Yu. Tashmetov, B.A. Abdurakhimov. Comparative properties of irradiated Al nanoparticles via vibrational spectroscopy and X-ray diffraction method, Modern Physics Letters B, 35, 34, P.2150512, 2021.
- [7] Sh.O. Eminov. Study of the impurity photoconductivity in p -InSb using epitaxial p^+ contacts, Semiconductors, 50, 8, P.1005-1009, 2016.
- [8] A.I. Bayramov, N.T. Mamedov, T.D. Dzhaifarov, Y.N. Aliyeva, Kh.N. Ahmadova, E.H. Alizade, S.Q. Asadullayeva, M.S. Sadigov, Sh.Kh. Ragi-mov. Photoluminescence and optical transitions in C60 fullerene thin films deposited on glass,

- silicon and porous silicon// Thin Solid Films 690 (2019) 137566.
- [9] Ayaz Bayramov, Elvin Alizade, Samir Mammadov, Avtandil Tavkhelidze, Nazim Mamedov, Yegana Aliyeva, Khuraman Ahmedova, Saida Asadullayeva, Larissa Jangidze, and Givi Skhiladze. Optical properties of surface grated Si-based multilayer structure, J. Vac. Sci. Technol. B, Vol. 37, No. 6, Nov/Dec 2019
- [10] T. K. Nurubeyli, Kh. N. Ahmadova. The role of the spectral matrix effect in the element analysis of biological fluids in ICP-MS, Modern Physics Letters B Vol. 35, No. 05, 215009, 2021
- [11] Masahiro Nakajima, Ryo Asaba, Akinori Suzuki, Yong-Gu Shim, Kazuki Wakita, Kh. Khalilova, Nazim Mamedov, Ayaz Bayramov and Emil Huseynov. Structure and optical properties of CdS:O films by cathode sputtering, Phys. Status Solidi, 2015, C 12, № 6, pp. 781-784.

In_{1-x}Sm_xSe MONOKRİSTALLARINDA In ATOMLARININ Sm ATOMLARI İLƏ ƏVƏZ EDİLMƏSİNİN ELEKTRİK XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ

Q.İ. İSAQOV, A.A. İSMAYILOV*, M.C. NƏCƏFZADƏ, V.I. EMİNOVA,
A.A. İSMAYILOV, Ə.B. MƏHƏRRƏMOV

Azərbaycan Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutu,
Bakı-1143, H.Cavid pr. 131
gudrat.isakov@gmail.com

* Azərbaycan Texniki Universiteti, Bakı-1073, H.Cavid pr. 25

Müəyyən edilmişdir ki, 142-294K temperatur intervalında In_{1-x}Sm_xSe (x=0,01; 0,03; 0,05; 0,07) kristallarının elektrikkeçiriciliyi $\sigma = \sigma_0 e^{-\Delta E/KT}$ qanunu ilə dəyişir. In_{1-x}Sm_xSe monokristallarında In atomları Sm atomları ilə əvəz edildikcə, defekt mərkəzlərinin yerləşmə dərinliyi azalır. Göstərilmişdir ki, Holl əmsalı aşağı temperaturlarda temperaturdan asılı deyil, In_{1-x}Sm_xSe monokristallarında In atomları Sm atomları ilə əvəz edildikcə, Holl əmsalının qiyməti azalır və yükdaşıyıcıların konsentrasiyası artır.

Açar sözlər: In_{1-x}Sm_xSe, monokristalları, Holl əmsalı, yüklənmiş defekt mərkəzi, nadir torpaq elementləri, elektrik keçiriciliyi, təmizlənmə.

PACS: 71.20.Nr Yarımkəçirici birləşmələr; 72.20.Fr Aşağı temperaturlarda daşımalar və yürüklük.

GİRİŞ

A³B⁶ tipli yarımkəçiricilərdə kimyəvi birləşmələrin və onların elektron xassələrinin spesifikliyi valent elektronlarının qoşalaşmamış sayına görə yaranır. CaSe (InSe, CaTe) tipli belə tam valentli olmayan birləşmələr adətən laylı və zəncirvari quruluşda kristallaşır. Öz unikal xassələrinə görə bu kristallar günəş elementləri [1, 2], optik modulyatorlar [3, 4], rentgen detektorları [5, 6], nüvə reaktorlarında radioaktiv ölçmə cihazları [7], təzyiq vericiləri yaratmaq üçün əlverişlidir [8].

[9,10]-a görə, yarımkəçiriciləri nadir torpaq elementləri (NTE) ilə aşqarladıqda aşağı həllolma qabiliyyətinə və NTE materiallarda təmizlənmə qabiliyyətinə malik olur ki, bu da, aşqarlarının konsentrasiyasının azalması və yükdaşıyıcıların yürüklüyünün artması ilə əlaqədardır. Kristallarda indium atomlarının NTE-nin atomları ilə əvəz edildikdə donor tipli səviyyələrin yüksəlməsinə gətirir ki, bu da n –tip keçiriciliyin yaranmasına şərait yaradır. InSe-də In atomlarının koordinasiya ədədi 4, Se atomlarının koordinasiya ədədi isə 3-dür. Uyğun olaraq 4 koordinasiyalı In atomu 3 koordinasiyalı Se atomu ilə tetrayedrik əlaqə yaradır və 1 In atomu s²p elektronu əsasında sp³ hibridlənir [11,12]. Yuxarıda göstərilənlər indium və samarium selenidləri arasındakı

kimyəvi əlaqənin təbiətinin oxşar olduğu qənaətinə gəlməyə imkan verməklə yanaşı InSe və SmSe arasında bərk məhlulların əmələ gəlməsini müəyyənlədirməyə imkan verir.

TƏCRÜBƏ VƏ NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

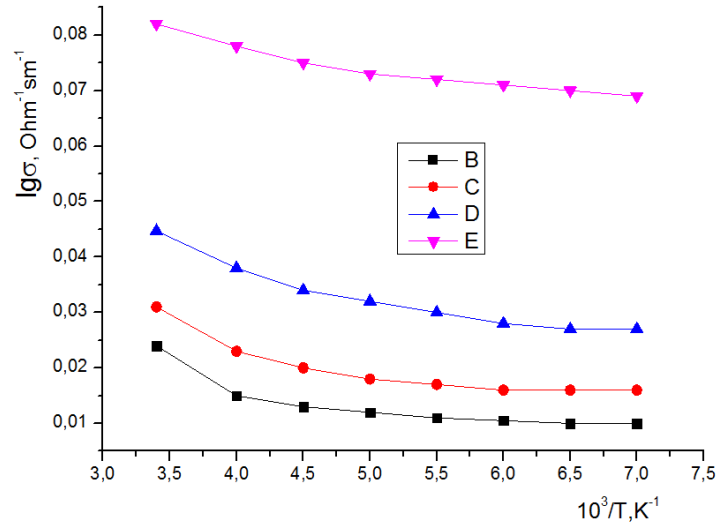
142-294K temperatur intervalında In_{1-x}Sm_xSe (x=0,01; 0,03; 0,05 və 0,07) kristallarının elektrik xassələrinin temperatur asılılığı tədqiq edilmişdir. Bu məqsədlə In-In 000, Se B-3 və Sm CM-1 markalı elementlərdən istifadə olunmuşdur. In, Sm, Se kimyəvi elementləri doğranılaraq, kvarts ampulaya doldurulmuş və 10⁻⁴ Pa təzyiqə qədər havası sorulmuşdur. Bundan sonra ampulanın ağzı lehimlənmişdir. Bunun üçün birbaşa sintez metodundan istifadə edilmişdir. In_{1-x}Sm_xSe (x=0,01;0,03 ; 0,05 və 0,07) monokristalları şaquli Bricmen üsulu ilə yetişdirilmişdir. Ampulanın sobada hərəkət sürəti 0,3 sm/saat olmuşdur. Yaranan kristallar DTA, RFA və mikromöhkəmlik ölçmələri ilə tədqiq edilmişdir. Omik kontaktlar olaraq gümüş pastasından istifadə edilmişdir. Kontaktlar nümunələrin əks səthlərində qarşı-qarşıya yerləşdirilmişdir. Nümunə paralelepiped şəklində və aşağıda göstərilən ölçüdə hazırlanmışdır 10x4x2mm³.

Cədvəl 1.

In_{1-x}Sm_xSe (x=0,01; 0,03; 0,05; 0,07) bərk məhlullarının bəzi xassələri

InSe mol. %	Qəfəs sabitləri Å		c/a	Elementar özəyin həcmi A ³	Koordinasiya ədədi Z	Sıxlıq ρ q/sm ⁻³
	a	c				
100	4,04	16,93	4,18	240,44	4	5,72
99	4,05	16,93	4,18	240,44	4	5,73
97	4,09	16,97	4,15	246,72	4	5,76
95	4,12	16,98	4,12	249,54	4	5,80
93	4,16	17,02	4,09	254,99	4	5,84

Onların elektrik xassələrinin temperatur asılılığı öyrənilmişdir. Göstərilmişdir ki, bütün temperatur intervalında elektrikkeçiriciliyi eksponensial $\sigma = \sigma_0 e^{-\Delta E/KT}$ qanununa tabe olur.



Şəkil 1. Müxtəlif tərkibli In_{1-x}Sm_xSe monokristallarının elektrikkeçiriciliyinin temperatur asılılığı: əyri B- x=0,01; əyri C-x=0,03; əyri D-x=0,05 və əyri E-x=0,07.

Şəkil 1-dən göründüyü kimi In_{1-x}Sm_xSe kristallarının tərkibində Sm atomlarının miqdarı artdıqca, elektrikkeçiriciliyinin qiyməti artır. Hər bir tərkib üçün ayrılıqda samariumun yaratdığı defekt mərkəzlərinin yerləşmə dərinlikləri hesablanmış və cədvəl 2-də verilmişdir.

Cədvəl 2.

Defekt mərkəzlərinin yerləşmə dərinlikləri

Bərk məhlullar	Bərk məhlulların defekt mərkəzlərinin yerləşmə dərinlikləri, eV
In _{0,99} Sm _{0,01} Se	0,09
In _{0,97} Sm _{0,03} Se	0,03
In _{0,95} Sm _{0,05} Se	0,01
In _{0,93} Sm _{0,07} Se	0,01

In_{1-x}Sm_xSe monokristallarında In atomları Sm atomları ilə əvəz edildikcə, defekt mərkəzlərinin yerləşmə dərinliyi azalır.

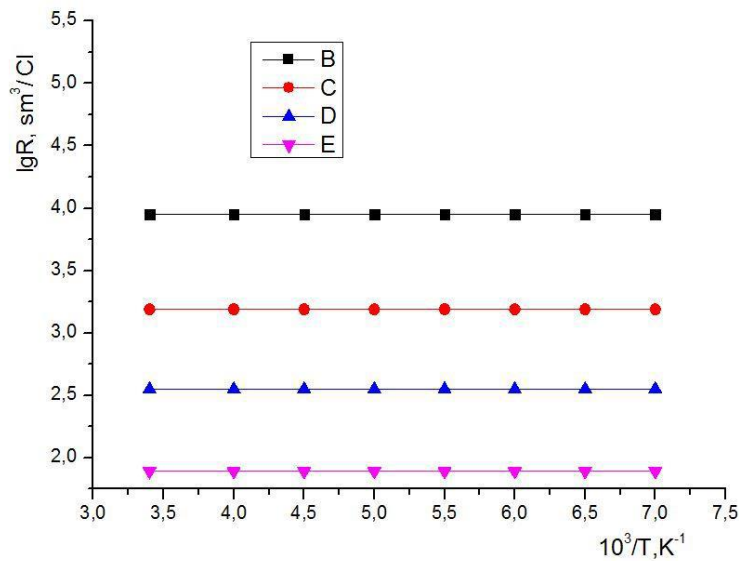
142-294K temperatur intervalında In_{1-x}Sm_xSe (x=0,01, 0,03, 0,05 və 0,07) kristallarının Holl əmsalı təcrübi olaraq müəyyən edilmişdir.

Cədvəl 3.

In_{1-x}Sm_xSe (x=0,01, 0,03, 0,05 və 0,07) yükdaşıyıcıların Holl əmsalı və konsentrasiyası

Kristallar	Holl əmsalı, sm ⁻³ /Kl	yükdaşıyıcıların konsentrasiyası, n sm ⁻³
InSe	6,25·10 ⁴	1·10 ¹⁴
In _{0,99} Sm _{0,01} Se	8,9·10 ³	7·10 ¹⁴
In _{0,97} Sm _{0,03} Se	1,56·10 ³	4·10 ¹⁵
In _{0,95} Sm _{0,05} Se	1,76·10 ²	1,76·10 ¹⁶
In _{0,93} Sm _{0,07} Se	7,8·10 ¹	8·10 ¹⁶

Bu cədvəldən görünür ki, In_{1-x}Sm_xSe monokristallarında In atomları Sm atomları ilə əvəz edildikcə, Holl əmsalının qiyməti azalır və yükdaşıyıcıların konsentrasiyası artır (şək.2).



Şəkil 2. Müxtəlif tərkibli In_{1-x}Sm_xSe monokristallarının Holl əmsalının temperatur asılılığı: B-x=0,01; C-x=0,03; D-x=0,05; E-x=0,07.

NƏTİCƏ

Müəyyən edilmişdir ki, 142-294K temperatur intervalında $\text{In}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Se}$ ($x=0,01; 0,03; 0,05; 0,07$) kristallarının elektrik keçiriciliyi $\sigma=\sigma_0 e^{-\Delta E/KT}$ qanunu ilə dəyişir. $\text{In}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Se}$ monokristallarında In atomları Sm

atomları ilə əvəz edildikcə, defekt mərkəzlərinin yerləşmə dərinliyi azalır. Göstərilmişdir ki, Hall əmsalı aşağı temperaturlarda tərkibdən asılı olduğu halda temperaturdan asılı deyil. $\text{In}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Se}$ monokristallarında In atomları Sm atomları ilə əvəz edildikcə, Hall əmsalının qiyməti azalır və yükdaşıyıcıların konsentrasiyası artır.

- [1] *A.Segura, J.P.Geusdon, J.M.Besson, A.Chevy.* Fotovoltaic effect in InSe. Application to solar energy conversion. "Rev.Phys. appl." 1979, t.14, N1, p.253
- [2] *A.Segura, J.P.Geusdon, J.M.Besson, A.Chevy.* Photoconductivity and fotovoltaic effect in indium selenide. J."Appl. Phys." 1983, t.54, N2, p.876
- [3] Детекторы оптического излучения на основе слоистых кристаллах GaSe и InSe. ЖТФ, 77, 2007, с.80-85.
- [4] *К.Х. Нагиев, В.М. Салманов.* Оптические модуляторы на основе кристаллов GaSe и InSe. Республиканская научная конференция «Актуальные проблемы физики», посвященная 90-летию БГУ. Баку, 16 мая 2009 г., стр.18.
- [5] *Г.Д.Гусейнов, Г.И. Искендеров, Е.М.Керимова.* Взаимодействие мягкого рентгеновского излучения с монокристаллами InSe.
- [6] *С.Н. Мустафаева, М.М. Асадов, А.А. Исмаилов.* Перенос заряда по локализованным состояниям в монокристалле InSe и InSe<Sn>. Физика Низких Температур, 2010, т.36, №4, с.394-397.
- [7] *С.Н. Мустафаева, М.М. Асадов, А.А. Исмаилов.* Влияние γ -облучения на параметры локализованных состояний в монокристаллах p-InSe и n-InSe<Sn>. Физика Низких Температур 2010, т.36, №7, с.805-808.
- [8] *А.А. Исмаилов, Ш.Г. Гасымов, Т.С. Мамедов, К.Р.Аллахвердиев.* Влияние давления на электропроводность и эффект холла селенида индия ФТП, 1992, т.26, в.11, с.1994-1996.
- [9] *В.Ф. Мастеров, Л.Ф. Захаренков.* Редкоземельного элементы A^3B^5 . ФТП, 1990, т. 24 (4), с.610.
- [10] *Б.М. Гольцман, В.А. Кудинов, И.А. Смирнов.* Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе Bi_2Te_3 (М., Наука, 1972).
- [11] Конфигурационная модель вещества, под ред. *Г.Б. Самсонова, И.Ф. Прядко, Л.Ф. Прядко.* (Киев, Наук. думка, 1975).
- [12] *В.Ю. Ирхин, Ю.П. Ирхин.* Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в d-и f-металлах и их соединениях (М., Наука, 2011).

G.I. Isakov, A.A. Ismayilov, M.C. Nejezfzade, V.I. Eminova, A.A. Ismayilov, A.B. Maharramov

EFFECT OF REPLACING IN ATOMS WITH SM ATOMS IN $\text{In}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Se}$ SINGLE CRYSTALS ON ELECTRICAL

It is shown that in the temperature range 142-294K the electrical conductivity of ($x=0.01; 0.03; 0.05; 0.07$) crystals changes according to the law $\sigma=\sigma_0 e^{-\Delta E/KT}$. In $\text{In}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Se}$ single crystals, when In atoms are replaced by Sm atoms, the depth of occurrence of defect centers decreases. At low temperatures, the Hall coefficient does not depend on temperature. As $\text{In}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Se}$ single crystals are replaced by Sm atoms, the value of the Hall coefficient decreases, and the concentration of charge carriers increases properties.

Г.И. Исаков, А.А. Исмаилов, М.Дж. Наджафзаде, В.И. Эминова, А.А. Исмаилов, А.Б. Магеррамов

ВЛИЯНИЕ ЧАСТИЧНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ АТОМОВ In АТОМАМИ Sm В МОНОКРИСТАЛЛАХ InSe НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Показано, что в интервале температур 142-294K.электропроводность кристаллов $\text{In}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Se}$ ($x=0,01; 0,03; 0,05; 0,07$) изменяется по закону $\sigma=\sigma_0 e^{-\Delta E/KT}$. В монокристаллах $\text{In}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Se}$ при замещении атомов In атомами Sm глубина залегания дефектных центров уменьшается. При низких температурах коэффициент Холла не зависит от температуры. По мере замещения монокристаллов $\text{In}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Se}$ атомами Sm значение коэффициента Холла уменьшается, а концентрация носителей заряда увеличивается.

Ümummilli Lider Heydər Əliyevin
100 illiyinə həsr olunmuş

NƏZƏRİ VƏ TƏTBİQİ FİZİKANIN İNKİŞAFI

mövzusunda konfrans

ingilis dilində
məqalələr

08-09 İyun, 2023-cü il

THE COMPLEX INVESTIGATION OF SEPARATE STRUCTURAL ELEMENTS OF COMPOSITIONAL MATERIAL

T.M. KHALINA¹, M.V. KHALIN¹, S.A. GUSEYNOVA²

¹*Altai State Technical University, Barnaul, Russia*

²*Institute of Physics of Ministry of Science and Education, AZ-1143, H.Javid ave., 131, Baku, Azerbaijan*

sabina_guseynova1977@hotmail.com

The investigations of electric conduction of vulcanizing layer of multielectrode electric radiator are carried out by electron diffraction method. It is shown that the black carbon is the main phase of technical one. The average degree of dispersion which is equal to 93, 05% is obtained by investigations and measurements carried out by Leigh-dugmore method on the samples of vulcanizing agent with black carbon in chosen concentrations. The supposed method of regular thermal regime of first kind in plane biocalorimeter with alpha-blocks at cooling of equally heated sample is the closest to the given one in State Standard.

Keywords: compositional materials, optical microscopy, electron microscopy, granulometry, diffraction, rubber and non-vulcanized mixture, technical carbon, microelectronic diffraction pattern.

PACS: 71.21.La; 71.55.Eq; 73.20.D

INTRODUCTION

The known modern and widely used heating technique, having the disadvantages such as: dielectric constant, stable electric resistance, self-regulation possibility don't supply the complex of properties necessary for reliable power-efficient functioning. That's why the technique development of power-efficient surface-distributed electric heating with the given electro-, thermo-physical characteristics in conjunction with the work in the self-regulation regime and functioning possibility in wet and corrosive mediums allows us to solve the problem presenting the important scientific-technical value.

The multielectrode compositional electric radiator (MCER) is supposed in the aim of technique development of power-efficient surface-distributed electric heating with the given electro-, thermo-physical characteristics in the self-regulation regime.

The composites are the heterogeneous solid multicomponent materials consisting in two or more components among which we can emphasize the reinforcing elements supplying the necessary mechanical characteristics (high strength, hardness) of material and matrix which is plastic base supplying the joint work of reinforcing elements.

The electroconductive layer of MCER presents itself the dispersion-filled polymer butyl-caoutchouc matrix with nano-structural filler in the form of technical carbon. The technical carbon supplies the stable temperature on the surface of electroconductive layer without the possibility of its regulation in the dependence of surrounding conditions. The stearin is the plasticizing agent and the additional functional ingredients serve in the capacity of the filler.

The butyl-caoutchouc is the product of low-temperature copolymerization of isobutenyl and 1-5% of any diene, mainly isoprene.

The technical carbon (carbon-black), non-active mineral fillers (chalk, kaolin and etc), high-disperse

SiO₂, their mixtures (50 – 70 mass particles on 100 caoutchouc mass particles) serve as fillers of rubber compounds on the base of butyl-caoutchouc. Only saturated compounds (for example, naphthenic and paraffinic oils, low-molecular polyethylene) are used in the capacity of plasticizers, as the non-saturated plasticizers decelerate the caoutchouc vulcanization.

The technical carbon is the high-disperse amorphous carbonic product produced in industrial scale. The technical carbon particles present themselves the globules consisting in degraded graphite structures. The interplanar spacing between graphite-like layers is 0,35-0,365nm (in comparison in graphite it is 0,335 nm). The particle size (13 – 120nm) defines the technical carbon "dispersion".

The specific surface is the physic-chemical index characterizing the dispersion. The particle surface has the roughness because of the layers overlapping each other.

The technical carbon is applied in the capacity of the reinforcing component in production of rubbers and plastic masses. About 70% whole technical carbon is used in tyre production, about 20% of technical carbon is used in production of rubber-technical products.

EXPERIMENT TECHNIQUE

The composition electric radiator (CER) calculation model consists in long plate put in rectangular isolating material and body with plane surface. The following boundary conditions: the surface between the object of heat removal and isolating cover is isothermal one, surface between the isolating cover and air is impermeable one (adiabatic) for heat flux lines [1,2] are chosen at CER model choice.

The construction of MCER is shown in Fig.1.

The given construction of MCER allows us to regulate the electric energy consumption on local heating in the dependence on heat exchange.

The directed projecting of resistive layer structure can supply MCER operation with both positive and negative temperature coefficients in the dependence on fields of application.

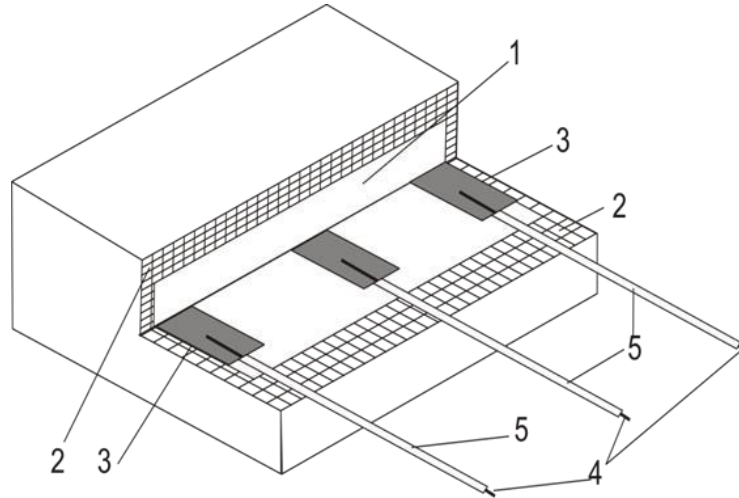


Fig.1. Multielectrode composition electric radiator.

1 is fuel electroconductive layer; 2 are isolating layers; 3 is system of electrodes from metal gauze (copper or brass); 4 are flexible shunts; 5 is isolating membrane of shunts.

The additional function is necessary to introduce into two-dimensional Laplace equation for successful decision of theoretical estimation of complex state of electric and heating parameters of CER. This function corresponding to two-dimensional Laplace equation and boundary conditions of first kind, expresses the

angle value formed by strength vector of plane-parallel field with the one of the axis of Cartesian coordinate system which is harmonic one.

The calculation of MCERs is carried out by the scheme which is given in Fig.2.

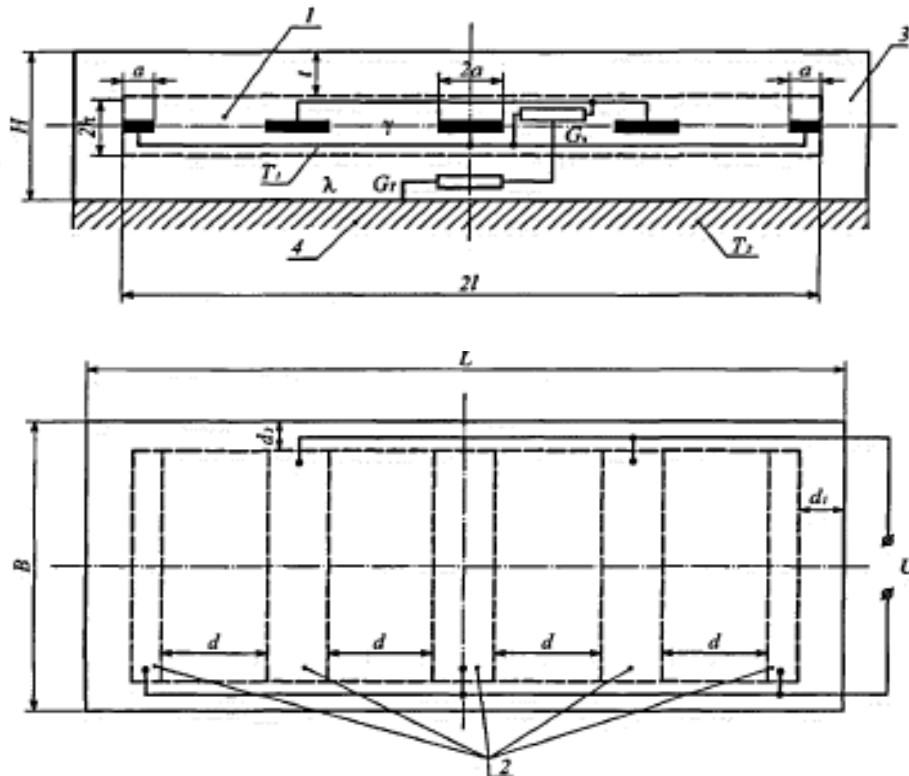


Fig.2. The scheme of 4-electrode plate electric radiator.

1 is resistive material; 2 are electrodes; 3 is isolating layer; 4 is surface of heating recoil.

EXPERIMENTAL PART

The system with concrete boundary conditions is chosen for calculation of electric conduction of multielectrode systems with definite parameters in Fig.2. On the base of this system, the calculative model is chosen so that the system requirements allow us to calculate their parameters with necessary delicacy.

For realization of self-regulation mode the electroconductive layer of MCER should have the negative temperature coefficient of resistance $\alpha\rho$ that corresponds to decrease of specific bulk resistance of electroconductive layer ρ_v with temperature increase on MCER surface. The character of obtained dependences $\rho_v=f(T)$ after the output in the operation regime evidences about the negative temperature

coefficient corresponding to polymer semiconductor materials. This circumstance makes MCER operation possible in power-efficient self-regulation regime.

According to this, MCER made from composition material where the obligatory base of which is butyl-caoutchouc, the filler is technical carbon, stearin is plasticizing agent and additional functional ingredients are supposed.

On the first stage the electroconductive layers are vulcanized at temperatures 172-174⁰C and under the pressure 12-13 MPa during 0,5 – 1 minutes. On the second stage they are vulcanized at temperatures 165-167⁰C under the pressure 11-11.5 MPa during 35 minutes.

The dependence graph of MCER layer sample electric conduction on temperature is shown in Fig.3.

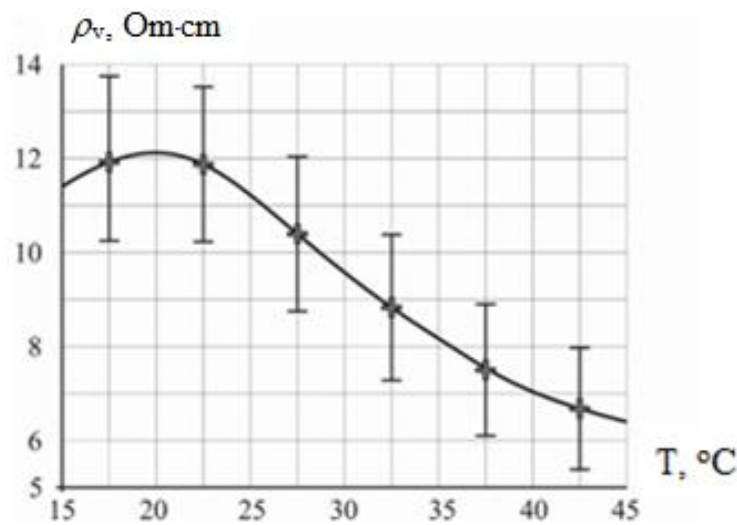


Fig.3. The dependence of electric conduction ρ_v of MCER sample layers on temperature.

The series from 5 MCERs is investigated with the aim of the analysis of the dependence of electric conduction ρ_v of MCER sample layers on temperature (T) in order to obtain the correspondence with the supposed method.

The measurements are carried out at temperature of environment 18 - 20 °C. The sample is put on the wood base at voltage 220v and 50hz. The current strength, voltage and internal temperature of electric radiator are measured each 5 minutes during first hour and each 10 minutes during the second hour.

The investigations are carried out by the means of comprehensive microscopic methods in the different large-scale levels including the scanning microscopy and microscopy of transmission electron, beginning from dimensions of black particles of technical carbon 29 ÷ 42 nm which are used for the series of MCER production.

Using the electron diffraction method, the investigations of electric conduction of MCER vulcanizing layer with the following carbon particles: N-245, N-330, having the diameter 29-32nm are carried out. The investigations are carried out on

transmission microscope EM - 125 sec with increasing up to 125kVt.

The analysis carried out by electron diffractometer shows that the main phase is black carbon taken in the correspondence with exact copy method.

The crystallite sizes are 20÷25 nm. The electron diffractometer gives the evidence to carbon black particles of typical nano-crystalline structure.

The typical image of hexagonal crystal lattice is shown by electron microscope in Fig.4.(a). The carbon black particles are shown by arrows in Fig.4.(a). The image of carbon black particles is shown by electron diffractometer in Fig.4.(b).

The qualitative estimation of dispersion and homogeneity of filler nano-particle distribution in polymer material is carried out by Leigh-dugmore method. The dispersion average degree 93,05% is obtained by investigations and measurements carried out by above mentioned method on 10 samples of vulcanizing butyl caoutchouc (BK) agent - 1675 with black carbon N- 245 in chosen concentrations.

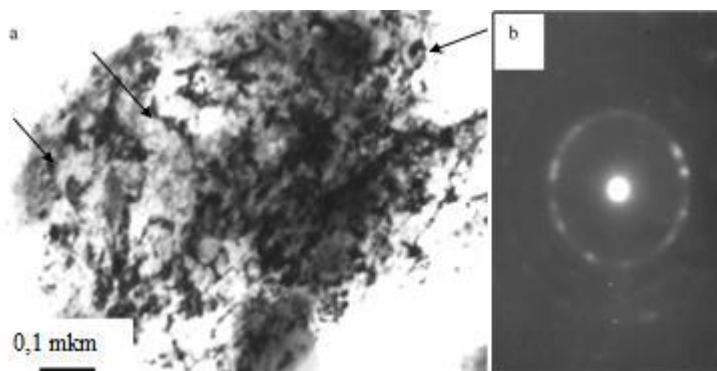


Fig.4. The sample image on electron microscope (a) and electron diffractometer (b) showing the hexagonal lattice of carbon black particles.

The purposeful change in composition of radiator layer electric conduction and its production process parameters allows us to change MCER resistance coefficient $\alpha\rho$ in the dependence on temperature allowing to radiator to operate in self-regulating regime.

It is necessary to know the main material thermo-physical characteristics towards with the material electro-physical ones at construction and production of MCERs.

The main thermo-physical characteristics of material are the thermal capacity, heat conductivity and thermal conductivity. As the materials present themselves the filled polymers used at the MCER production, so State Standard 23630.1 – 79 “Plastics. The methods of specific heat” [3] should be applied to obtain their thermo-physical characteristics.

The three main thermo-physical characteristics of the substances are connected with the following dependence:

$$a = \lambda / \rho \cdot c \quad (1)$$

where: a is thermal conductivity coefficient m^2/c ; λ is heat conductivity coefficient $Wt/(m \cdot ^\circ C)$; ρ is matter density kg/m^3 ; c is specific heat capacity $J/(kg \cdot ^\circ C)$.

The definition of heat conductivity by [5] is carried out by the method of regular heat regime on cylindrical biocalorimeter based on heat regularities of metallic cylinder (nuclear) through the investigated matter layer.

The temperature change character in the space and time is established on the base of the first law of thermodynamics and Bio-Fourier law, which is expressed by heat conductivity differential equation [4]:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\lambda}{c\rho} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right), \quad (2)$$

where: c is specific heat capacity $J/(kg \cdot ^\circ C)$; ρ is density kg/m^3 ; T is temperature $^\circ C$; τ is time sec.

The definition of heat conductivity of the investigated materials is carried out in plane biocalorimeter with alpha-blocks [5]. The possibility of the investigation of the whole class of solid and bulk materials and also the fact that the thermostat becomes unusefull because of the big water discharge

through cooling channels of alpha-blocks are the advantages of this method.

The samples for investigations present themselves the discs by diameter (142 ± 5) mm and thickness $(10 \pm 0,5)$ mm.

The thermal resistance of R_c , $(m^2 \cdot h \cdot ^\circ C)/kcal$ sample is determined in the correspondence with technique [6] given to concrete values of core thermal capacity and biocalorimeter material, its geometric dimensions by the following formula:

$$R_c = \left(\frac{Y}{\Phi} - 5 \cdot 10^{-3} \right). \quad (3)$$

where: Φ is the complex characterizing the radiator core heat exchange with sample surface in contact place, $kcal/m^2 \cdot h$; Y is the parameter taking under consideration the rate of cooling.

Φ complex is calculated by the following formula:

$$\Phi = \Phi_0 \left[0,4 + \frac{0,6}{1 + 2 \frac{\delta}{D}} \right]. \quad (4)$$

where Φ_0 is biocalorimeter constant which is equal to $3,4 kcal/m^2 \cdot h$;

D and δ are diameter and thickness of the sample m , correspondingly.

Y parameter is defined by the following formula:

$$Y = \frac{1}{\frac{m}{B} - A}. \quad (5)$$

where: A is device constant which is equal to $0,32$; B is value depending on form factor and total nuclear heat capacity and the layer of the investigated matter.

B value $(m^2 \cdot ^\circ C)/kcal$ is defined by the following formula:

$$B = \frac{1}{1 + 0,1\delta \cdot c \cdot \rho}. \quad (6)$$

where: δ is the thickness of the investigated sample;

ρ is density of the sample material;

c is specific heat capacity of the sample material;

The heat capacity is defined with accuracy in the correspondence with [7]. The sample density is

defined by the displaced water volume with the correction for its temperature.

The most character experimental dependences of temperature pressures on time for the sample groups from the materials of isolating production rubber

source (PRS) and developed production rubber electroconductive (PRE) layers in different time moments are given in Fig.5.

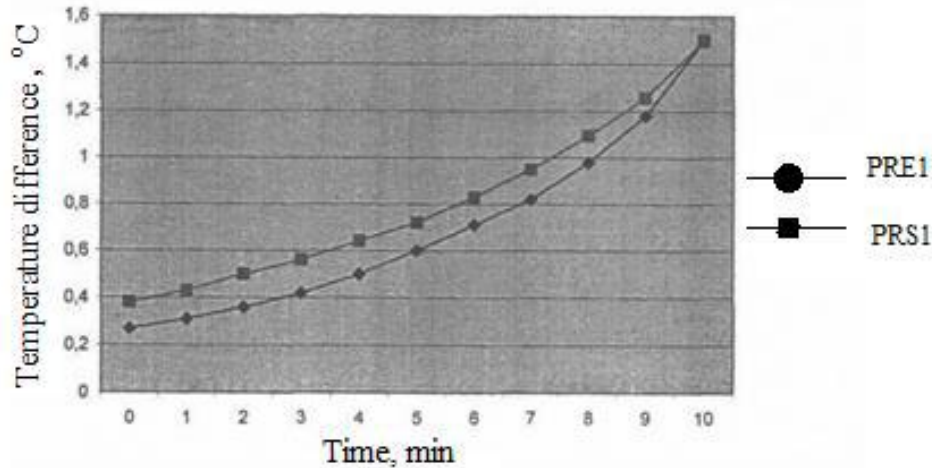


Fig.5. The experimental dependences of the temperature pressures PRS and PRE on time.

Thus, the supposed method of regular regime of the first kind in plane biocalorimeter with alpha-blocks at the cooling of uniformly heated sample is the closest to the given one in State Standard. The average temperature on electric radiator surface after its output on operating regime is obtained with the help of the software including the infrared imager complex and it is 39,1°C for MCER with the inner diameter 24mm at measuring inaccuracy $\pm 0,1$ °C.

The temperature inclination on the surface of electric radiator on average temperature defined on the base of measurements in the points uniformly distributed on the surface is 7,5% for MCER.

The calculations are carried out for MCER with resistive material on the base of technical carbon П-234 with concentration 52,5 mass particles on 100 mass particles of polymer. The obtained results allow us to estimate the thermal conductivity coefficient and specific heat capacity of developed composition materials and use the obtained data for the theoretical calculations.

CONCLUSION

- Using the electron diffraction method the investigations of electric conductivity of vulcanizing layer of MCER with the following carbon particles: N- 245, N- 330 having the diameter 29-32 nm are carried out;

- The diffraction method shows that the main phase is the black carbon taken in the correspondence with method of exact copy. Mainly the carbon black particles have the hexagonal lattice structure, which have the nano-crystalline structure;

- The dispersion quantitative estimation and homogeneity of filler nano-particle distribution in polymer material are carried out by the Leigh-dugmore method. The dispersion average degree 93,05% is obtained by investigations and measurements caused by above mentioned method on 10 samples of vulcanizing BK agent - 1675 with black carbon N-245 in chosen concentrations.

- The definition of the material thermal conduction is carried out by the method of regular heat regime on cylinder biocalorimeter based on the regularities of heating of metallic cylinder (nuclear) through the investigated matter layer. The supposed method of regular heat regime of the first kind in the plane biocalorimeter with alpha-blocks at the cooling of uniformly heated sample is the closest to the given one in State Standard. The average temperature on the electric radiator surface after its output on operating regime is defined with the help of software including the infrared imager complex and it is 39,1°C for MCER with the inner diameter 24mm at measuring inaccuracy $\pm 0,1$ °C.

[1] T.M. Khalina, M.V. Khalin, A.B. Dorosh. Patent 2476033 Russian Federation, MPK H 05 B 3/28. The method of manufacturing a composite electric heater. - No. 2011136621/07; Bull. No. 5, application 02.09.2011; publ. 20.02.2013, p.9

[2] T.M. Khalina, M.V. Khalin, A.B. Dorosh, et al. Development of Energy-Efficient Heating Technologies and Prototypes of Products Based on Multi-Electrode Composite Electric Heaters: Scientific Research and Development Work Energy Effect Technology - GR No.

- 01201164482, GK No. 8796r/6815. - Barnaul, 2012, p.123
- [3] GOST 23630.1-79 "Plastics. «Methods for determining thermal conductivity».
- [4] S.S. *Kutateladze*. Heat transfer and hydrodynamic resistance: Reference manual.-M.: Energoatomizdat, 1990, p.367.
- [5] Thermotechnical beacon. Ed. V.N. Yurenev and P.D. Lebedev. In 2 vols., vol. 2.-M.: Energy, 1976, p. 896.
- [6] *L.I. Durachenko*. Guidelines for the course "Heat transfer". -Barnaul: API, 1978, p.43.
- [7] Methods for determining the specific heat capacity. GOST 23630, p.1-79.

TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE KINETIC COEFFICIENTS OF $\text{Bi}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}$ ALLOY

A.A. MUSAYEV¹, E.R. YUZBASHOV²

¹National Aviation Academy, Mardakan av. 30, Baku, Azerbaijan

²Institute of Physics, Ministry of Science and Education, AZ-1143, H. Javid ave.,131, Baku, Azerbaijan, e-mail: eltaj100@yahoo.com

The temperature dependence (in the 80 K – 300 K range) of the following components of the tensor of electric resistance in low magnetic field – two components of specific resistance (ρ_{11} and ρ_{33}), two components of Hall effect (R_{231} and R_{123}) and, five components of magnetoresistance ($\rho_{11,11}$, $\rho_{11,22}$, $\rho_{11,33}$, $\rho_{33,11}$, $\rho_{33,33}$) – for the alloy of $\text{Bi}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}$ were measured. Due to the calculations the following kinetic parameters were determined: carrier densities of electrons N and holes P ; their mobilities μ_1 , μ_2 , μ_3 and ν_1 , ν_2 , ν_3 , correspondingly; and the tilt angle of electronic isoenergetic ellipsoids to the bisectrix axis (φ_e). Calculations were carried out for two-valley (L electrons and L holes) model. When looking for suitable materials for thermoelectric converters, it is often enough to know the average kinetic parameters for single crystals or parameters for polycrystalline samples of the same composition. So, to estimate the values of some kinetic coefficients we used the averaged values of the measured galvanomagnetic coefficients.

Keywords: narrow-gap semiconductors and semimetals, galvanomagnetic properties, kinetic coefficients of Bi-Sb alloys
PACS:72.15. Gd, 73.50.Jt

INTRODUCTION

Investigation of solid solutions of $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ displays that those solutions are perspective materials for fundamental materials science, condensed matter physics, low temperature thermoelectrics, infrared applications, and beyond. Moreover, those materials are of broad interest from the theoretical aspect. Due to the smallness of the characteristic energetic parameters of solid solutions of Bi-Sb, those materials are very sensitive to the external impacts (temperature, pressure, presence of electroactive impurities, defects, etc.). By varying external influence in comparatively small range, it is possible to investigate topology of Fermi surface, various phase transitions, alter the statistics of charge carriers in rather broad range etc. That is why these materials are still being investigated as bulk materials, thin films and nanoscale structures

[1]. Since then, different types of nano-structured $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ materials, have notably drawn the attention of researchers, including nanowires [2], thin films [3], and nano-particles [4]. Also it was predicted that different kinds of Dirac cone systems can be synthesized based on the single crystal $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ thin films materials, including single-Dirac-cone, bi-Dirac-cone, tri-Dirac-cone, exact-Dirac-cone, semi-Dirac-cone, and quasi-Dirac-cone, and also including Dirac cones with different anisotropic degrees [5]. Fu and Kane predicted the topological insulator phase in $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ surface states [6], which is experimentally proved by Hsieh et al. [7]. These discover in $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ surface states directly leads to the intensively focused area of topological insulator [8], which promises potential applications in spintronics, superconductivity, quantum computing, etc.

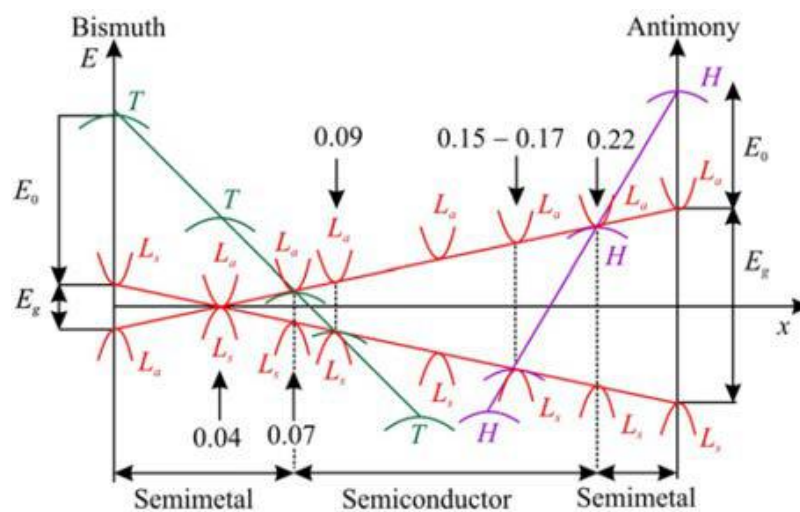


Fig. 1. Schematic representation of the energy bands near the Fermi level for $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ alloys as a function of x at $T=0$ K.

In the early years, researchers found that the variation of the electronic band structure of bulk $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ provided a remarkable richness of electronic properties, when considered as a function of stoichiometry, temperature, strain, pressure, etc. Semimetals, direct band gap semiconducting and indirect band gap semiconducting behaviors have all been observed in this materials class. Furthermore, both parabolically and non-parabolically dispersed charge carriers can be found in this materials class. The high degree of anisotropy in their transport properties also distinguishes the $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ materials from other systems.

The electronic transport properties of bulk $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ have been studied in great detail. The most interesting phenomenon for bulk $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ materials is that when $x < 0.04$ the L-point band gap decreases with antimony composition x , while when $x > 0.04$ the L-point band gap increases with antimony composition x (fig.1). At $x = 0.04$ the conduction band edge and the valence band edge exchange their symmetries at the L points, and the L-point band gap E_{gL} becomes zero, which leads to the formation of three symmetrical three dimensional (3D) Dirac points [9].

In itself studying the transport phenomena in the system of Bi-Sb represents a powerful tool for investigating energetic zone structure and mechanisms of scattering of charged carriers in these materials. But studying galvano- and thermomagnetic effects in these materials at intermediate (80 K-300 K) and high (more than room temperature) temperatures become irreplaceable, because the best powerful methods for investigating energetic zone structure and mechanisms of scattering of charged carriers, as oscillation and resonance methods, are effective only at ultra- and low temperatures.

EXPERIMENT

Investigation of temperature dependence of low-field galvanomagnetic coefficients of the alloy of $\text{Bi}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}$ at the temperature range of 80 K÷300 K was carried out in the paper. Single crystals of

$\text{Bi}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}$ were grown by the method of Chokhralsky in the experimental equipment [10] using solid replenishment. Two types of rectangular samples were cut from the single crystal ingot by electrospark method; large edges of the first group of samples were parallel to binary axis, but the second group ones were aligned parallel to trigonal axis. For diminution of influence of parasite thermomagnetic effects on the precision of measurement of isothermal galvanomagnetic coefficients, the measurements were carried out in special module filled with helium. Due to the precautions the temperature gradient between contact points was reduced up to $0.03 \div 0.05$ K. For reducing of thermal leakage over measuring wires and thermocouples were used thin ones (having diameter less than 0.1 mm). All measuring wires and thermocouples were thermostated. Calculation of the wires' length was carried out according to the work [11]. As known during the measurement of specific resistance of a thermoelectrical specimen an additional error make its appearance due to the Peltier effect. But using a fast-acting, precious digital voltmeter allows to make this error negligible. The measurement of other galvanomagnetic coefficients were conducted by the high-precious D.C. Potentiometer. In every case the fulfillment of the low-field condition ($\mu\text{B} \ll 1$) were tested, because this varies in the rather broad range depending on temperature and orientation of magnetic field with respect to main crystallographic axes (usually its magnitude not exceeds $0.02 \div 0.04$ Tesla at nitrogen temperatures).

The following components of the tensor of electric resistance in low magnetic field for the alloy of $\text{Bi}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}$ - two components of specific resistance (ρ_{11} and ρ_{33}), two components of Hall effect (R_{231} and R_{123}) and, five components of magnetoresistance ($\rho_{11,11}$, $\rho_{11,22}$, $\rho_{11,33}$, $\rho_{33,11}$, $\rho_{33,33}$) – were measured. These coefficients are defined conveniently with respect to the usual orthogonal coordinate system used for the trigonal semimetals Bi, Sb, having 1 along the binary (x) axis, 2 along the bisectrix (y) axis and 3 along the trigonal (z) axis (fig. 2).

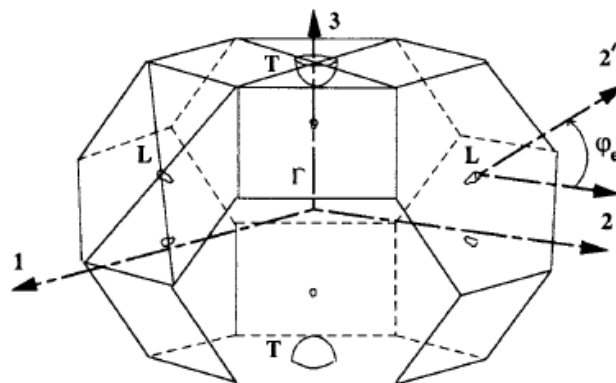


Fig. 2. The Brillouin zone of Bi and Bi-rich alloys showing three L-point electron (hole) pockets and one T-point hole pocket. Axes 1, 2, and 3 are parallel to the binary, bisectrix, and trigonal axes, respectively. r and Pt are the tilt angles of the electron and hole ellipsoids.

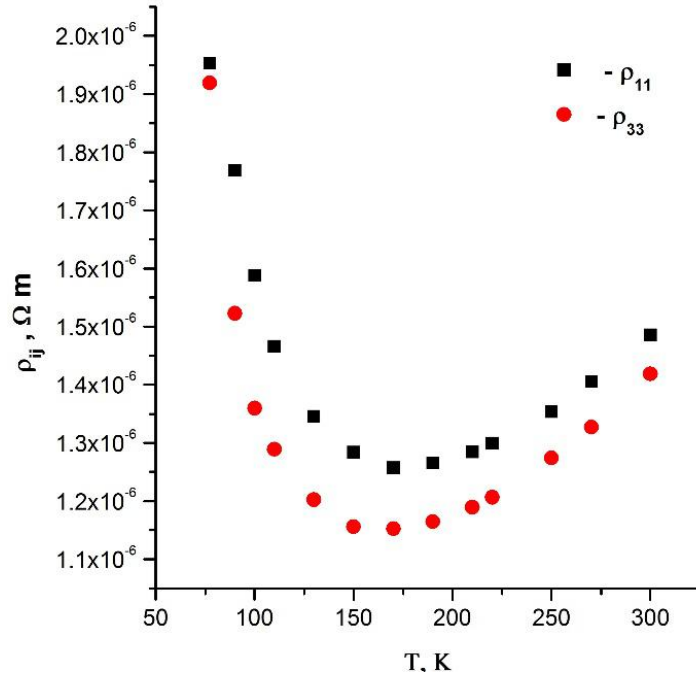


Fig. 3. Temperature dependence of of specific resistance (ρ_{11} and ρ_{33}).

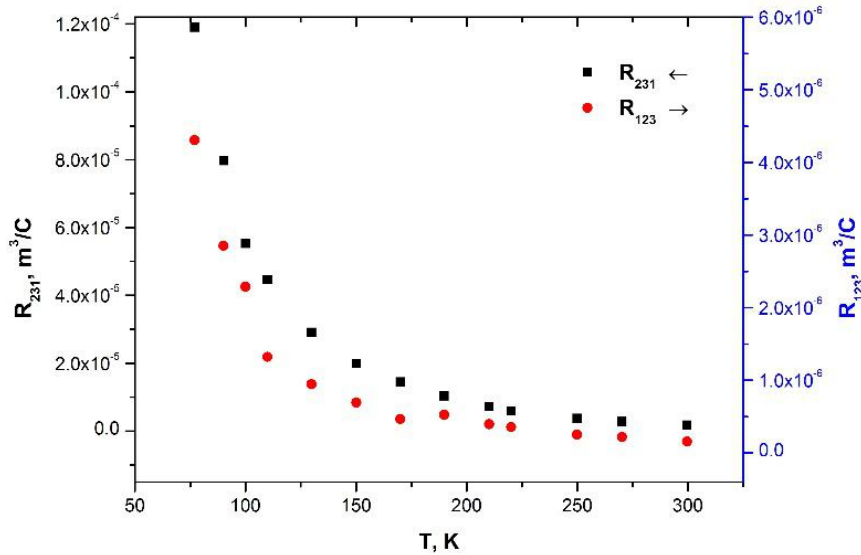


Fig. 4. Temperature dependence of Hall coefficients R_{231} and R_{123} .

The dependence of components of specific resistance (ρ_{11} and ρ_{33}) on temperature at the investigated temperature range is shown in the Fig. 3. As seen from the figure the both components of resistivity show semiconductor behavior in the region 80 K ÷ 170 K and semimetallic one upper 180 K. The temperature dependences of the Hall and magnetoresistance coefficients are shown in the figures 4 and 5, correspondingly.

From the figure 4 it is clear that both Hall components greatly decrease with temperature. Such decreasing may be caused by increasing of the concentration of charge carriers. However, as the conductivity of Bi-Sb alloys is intrinsic at the given temperature range, the changes of Hall coefficients may be related to the alteration of ratio of mobilities

of electrons and holes. Therefore, the temperature dependence of Hall coefficients cannot quantitatively characterize alteration of the concentration of current carriers and more complicated calculations considering of adopted model of energetic spectra must be conducted.

From the figure 5 it is clear that common features of the temperature dependences of all measured components of magnetoresistance are identical. Each line representing the dependence of $\lg \rho_{ij,kl}$ on $\lg T$ may be considered as two nearly linear sections: low-temperature section (from 80 K to 120 ÷ 160 K) which monotonically turn into high-temperature section (from 160 ÷ 200K to 300K). These dependences bear exponential character ($\rho_{ij,kl} \sim T^P$), and index of power P is greater at the high-temperature section than at low-temperature one, and its value depends on the direction of a component.

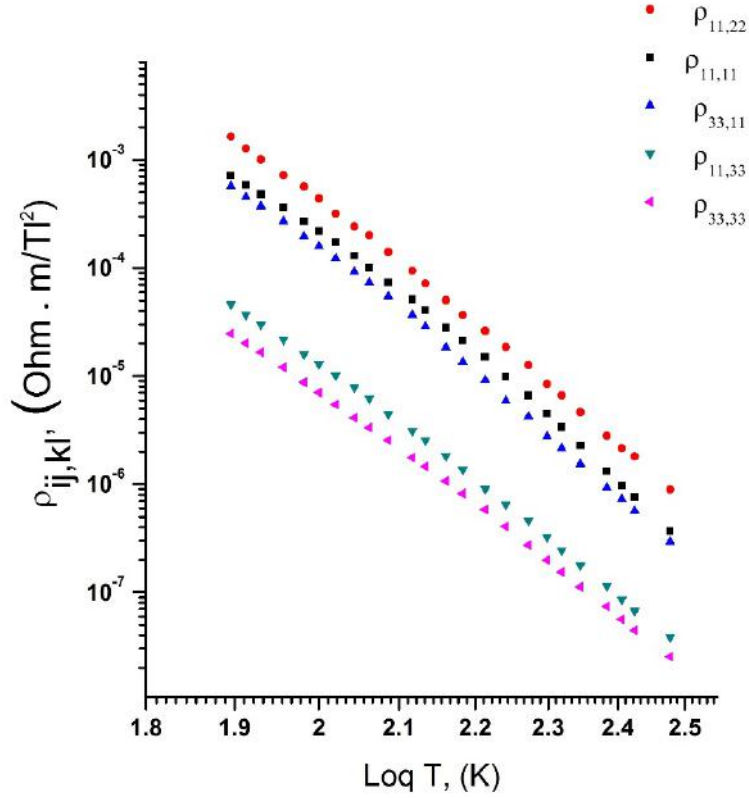


Fig. 5. Temperature dependence of five components of magnetoresistance in double-logarithmic scale.

RESULTS AND CALCULATIONS

For the quantitative interpretation of the obtained experimental results it is needed to adopt appropriate models for energetic band structure and theoretical approximations for calculation kinetic coefficients for BiSb alloys. It is known that in anisotropic mediums, such as Bi, Sb and their solid solutions, with point-group symmetry $R\bar{3}m$, the fundamental equation for the conduction of electricity in a magnetic field B is the generalized form of Ohm's law relating the current density J to the applied field E :

$$J_i = \sigma_{ij}(B)E_j \quad \text{or} \quad E_i = \rho_{ij}(B)J_j \quad (1)$$

where the resistivity tensor $\rho_{ij}(B)$ is the reciprocal of the conductivity tensor $\sigma_{ij}(B)$; both are general

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{11} &= \frac{1}{\rho_{11}}; & \sigma_{33} &= \frac{1}{\rho_{33}} \\ \sigma_{123} &= \frac{R_{123}}{\rho_{11}^2}; & \sigma_{231} &= \frac{R_{231}}{\rho_{11}\rho_{33}} \\ \sigma_{1111} &= \frac{\rho_{1111}}{\rho_{11}^2}; & \sigma_{1122} &= \frac{\rho_{1122}}{\rho_{11}^2} + \frac{R_{231}^2}{\rho_{11}^2\rho_{33}}; & \sigma_{1133} &= \frac{\rho_{1133}}{\rho_{11}^2} + \frac{R_{123}^2}{\rho_{33}^2} \\ \sigma_{3333} &= \frac{\rho_{3333}}{\rho_{33}^2}; & \sigma_{3311} &= \frac{\rho_{3311}}{\rho_{33}^2} + \frac{R_{231}^2}{\rho_{33}^2\rho_{11}} \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

The magnetoconductivity tensor components of a semimetal of crystal class $R\bar{3}m$ with a many-valley band structure are related to the principal carrier mobilities μ_i and ν_i (where i is 1, 2, 3) of electrons and

functions of B and obey the Onsager relation [$\rho_{ij}(B) = \rho_{ij}(-B)$].

Transport phenomena are expressed by the Boltzmann equation. If $\mu B \ll 1$ (μ is the carrier mobility) the solution in the form of power series in B will converge rapidly and only terms to B^2 are required to explain the galvanomagnetic effects in low magnetic fields. Accordingly, $\rho_{ij}(B)$ is defined as follows:

$$\rho_{ij}(B) = \rho_{ij} + R_{ijk}B_k + \rho_{ijkl}B_kB_l \quad (2)$$

While the magnetoresistivity tensor is measured experimentally, theory is more conveniently handled in terms of magnetoconductivity tensor. The formulae that transform from one tensor to the other are the following:

holes respectively by a set of equations. The concrete kind of the set of equations depends on the considered model of energetic band structure extrema laid near Fermi level. In our case according to the Fermi surface

peculiarities (fig. 2) of charge carries we have taken into the account 3 electron and 3 hole ellipsoids (pockets) localized at L point of the BZ. The important assumptions are independent contribution to electric current from each valley and an isotropic relaxation time in k-space. So, $\sigma(\vec{B}) = \sum_s \sigma_s(\vec{B})$. Here $\sigma_s(\vec{B})$ is the contribution of s valley to the common electrical conductivity. In our calculations we considered a model for the Bi_{0.88}Sb_{0.12}:

$$\sigma(\vec{B}) = 3\sigma_s^e(L) + 3\sigma_s^h(L) \quad (4)$$

The set of the equations connecting the magnetoconductivity tensor components with kinetic parameters in our case may be expressed for one ellipsoid as the following:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= \frac{1}{2} Ne[\mu_1 + C^2\mu_2 + S^2\mu_3] \\ \sigma_{33} &= Ne[S^2\mu_2 + C^2\mu_3] \\ \sigma_{231} &= \frac{1}{2} Ne[\mu_2\mu_3 + \mu_1(S^2\mu_2 + C^2\mu_3)] \\ \sigma_{123} &= Ne[\mu_1(C^2\mu_2 + S^2\mu_3)] \\ \sigma_{1133} &= \frac{1}{2} Ne[\mu_1(\mu_1 + C^2\mu_2 + S^2\mu_3)(C^2\mu_2^2 + S^2\mu_3^2)] \\ \sigma_{3311} &= \frac{1}{2} Ne[(S^2\mu_1 + C^2\mu_3) + [\mu_2\mu_3 + \mu_1(S^2\mu_2 + C^2\mu_3)]] \\ \sigma_{1111} &= \frac{1}{8} Ne[S^2\mu_2(\mu_1 - \mu_3)^2 + C^2\mu_3(\mu_1 - \mu_2)^2 + 3S^2C^2\mu_1(\mu_2 - \mu_3)] \\ \sigma_{1122} &= \frac{1}{8} Ne[3S^2\mu_2(\mu_1^2 + \mu_3^2) + 3C^2\mu_3(\mu_1^2 + \mu_2^2) + C^2S^2\mu_1(\mu_2 - \mu_3)^2 + 2\mu_1\mu_2\mu_3] \\ \sigma_{3333} &= Ne[C^2S^2\mu_1(\mu_2 - \mu_3)^2] \end{aligned} \quad (5)$$

Here: $S = \sin \varphi$, $C = \cos \varphi$; φ is the tilt angle of the energetic ellipsoid to the basis surface; for L-type charge carriers $\varphi_e(L) = \varphi_h(L)$.

To obtain a fairer assessment of the experimental data, a computer program producing a least-mean-squares best fit to all nine coefficients were devised. Due to the calculations the following kinetic parameters were determined: carrier densities of electrons N and holes P (in our case $N=P$); their mobilities μ_1, μ_2, μ_3 and v_1, v_2, v_3 , correspondingly; and the tilt angle of electronic isoenergetic ellipsoids

to the bisectrix axis (φ_e, φ_h). It should be noted that not all of these parameters were determined with the same accuracy. The most precisely were determined N, P, μ_1, μ_3 and v_1, v_3 . The contribution of μ_2 and v_2 are small and is almost swamped by μ_1 , and μ_3 . The solution shown in the Table 1 was obtained for the case of equality the carrier densities of electrons N to carrier densities of holes L , localized at L-point of the Brillouin zone.

Table1. Calculated kinetic parameters of Bi_{0.88}Sb_{0.12} alloy obtained for model $N_L=P_L$.

T	N=P	$\varphi_e = \varphi_h$	μ_1	μ_2	μ_3	v_1	v_2	v_3
(K)	(m ⁻³)	(deg)	(m ² /V·s)	(m ² /V·s)	(m ² /V·s)	(m ² /V·s)	(m ² /V·s)	(m ² /V·s)
80	0.24·10 ²³	5.01	182	0.63	92.3	57.4	0.25	29.6
90	0.38·10 ²³	5.03	143	0.82	72.3	49.6	0.064	26.9
110	0.66·10 ²³	5.02	96.9	0.47	52.5	33.3	0.059	18.3
130	0.11·10 ²⁴	5.03	62.4	0.37	36.2	20.7	0.028	11.7
150	0.17·10 ²⁴	5.04	43.3	0.31	26.1	2.80	0.030	8.13
170	0.23·10 ²⁴	5.16	33.9	0.26	18.2	2.11	0.029	5.3
190	0.34·10 ²⁴	5.46	22.8	0.18	13.4	6.63	0.028	3.92
210	0.47·10 ²⁴	5.62	16.5	0.11	9.21	4.51	0.039	2.62
230	0.60·10 ²⁴	5.87	12.3	0.10	7.05	3.51	0.024	2.08
250	1.23·10 ²⁴	6.25	9.5	0.073	5.21	2.52	0.023	1.53
270	4.78·10 ²⁴	6.92	6.0	0.031	3.4	1.62	0.019	0.92
300	0.13·10 ²⁵	8.01	4.9	0.025	2.71	1.33	0.011	0.76

Taking into the account that formulas connecting $\rho_{ij,kl}$ with kinetic coefficients in each concrete case contain different combinations of μ_i, v_i and the temperature dependencies of above mentioned parameters, strictly speaking, do not expressed as

exponential functions, then there is good reason to believe that determined temperature dependencies of kinetic parameters are reasonable.

One of the factors leading to the strong temperature dependencies of the magnetoresistivity

coefficients is the strong temperature dependence of mobility ($\mu \sim T^{-3}$). Such strong dependence of mobility cannot be explained only by scattering of current carriers on intravalley acoustic phonons. It is possible that intervalley scattering by optical phonons may play active role at high temperatures. It should be noted that alteration of the effective mass of current carriers might make contribution to the strong temperature dependency of the mobility.

It is clear that to calculate the temperature dependences of all kinetic parameters of $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ solid solutions in more precious manner, taking into account the complex nature of the energy band structure, dispersion law of charge carriers, a sharp temperature dependence of the energy gaps and the effect effective masses of charge carriers, features of energy ellipsoids and scattering mechanisms (anisotropic case), is very difficult task. But, due to

the lack of reliable parameters for estimation purposes are commonly used simple models. In addition, when looking for suitable materials for thermoelectric converters, it is often enough to know the average kinetic parameters for single crystals or parameters for polycrystalline samples of the same composition.

Hence, the use of polycrystalline materials might be more suitable for practical applications (because single crystals are weak in mechanical strength and require dedicated techniques for synthesis). But there are very limited reports on transport property study of polycrystalline Bi-Sb alloys [13,14].

In our case, to estimate the values of some kinetic coefficients, it is sufficient to use the averaged values of the measured galvanomagnetic coefficients. For this, we used the following general formulas for resistivity, Hall effect and magnetoresistance, respectively [15]:

$$\left. \begin{aligned} \rho &= \frac{1}{3}(2\rho_{11} + \rho_{33}); R = \frac{1}{3}(2R_{231} + R_{123}); \frac{\delta\rho}{B^2} = \frac{1}{15}(\rho_{1111} + 5\rho_{1122} + 4\rho_{1133} + 4\rho_{3311} + 5\rho_{3333}) \end{aligned} \right\} (6)$$

Results of the calculations depicted in the Table 2. Based on the obtained averaged values, it is possible to estimate the concentration and mobility for charge carriers in that alloy. For this, the following simple formulas are used:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{\rho} &= eN\mu \left(\frac{1+b}{b} \right); R = \frac{1}{eN} \left(\frac{1-b}{1+b} \right); \frac{\delta\rho}{R^2 B^2} = \frac{b^2}{(b-1)^2} \end{aligned} \right\} (7)$$

Here N is the electron concentration; μ and ν are the electron mobilities and holes, respectively; b denotes the ratio of the electron-mobility to the holes one, that is, μ/ν . Of course, these formulas correspond to the case degeneracy of charge carriers and $N=P$.

More realistic formulas which cause the nondegeneracy of charge carriers in our case, there are for example, in [16]. The results of calculations by formulas (7) are given in the Table 3.

Table 2. The averaged values of the galvanomagnetic coefficients for $\text{Bi}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}$ at the temperature range of 80 K÷300 K.

T	ρ	R	$\delta\rho/H^2$
(K)	(Ωm)	(m^3/C)	($\Omega m/T^2$)
80	$1.94 \cdot 10^{-6}$	$8.08 \cdot 10^{-5}$	$8.53 \cdot 10^{-3}$
90	$1.69 \cdot 10^{-6}$	$5.41 \cdot 10^{-5}$	$4.05 \cdot 10^{-3}$
110	$1.41 \cdot 10^{-6}$	$3.04 \cdot 10^{-5}$	$1.36 \cdot 10^{-3}$
130	$1.30 \cdot 10^{-6}$	$1.98 \cdot 10^{-5}$	$5.07 \cdot 10^{-4}$
150	$1.24 \cdot 10^{-6}$	$1.35 \cdot 10^{-5}$	$2.08 \cdot 10^{-4}$
170	$1.22 \cdot 10^{-6}$	$9.91 \cdot 10^{-6}$	$1.01 \cdot 10^{-4}$
190	$1.23 \cdot 10^{-6}$	$7.03 \cdot 10^{-6}$	$5.23 \cdot 10^{-5}$
210	$1.25 \cdot 10^{-6}$	$4.91 \cdot 10^{-6}$	$2.47 \cdot 10^{-5}$
230	$1.27 \cdot 10^{-6}$	$4.08 \cdot 10^{-6}$	$2.14 \cdot 10^{-5}$
250	$1.33 \cdot 10^{-6}$	$2.63E-06$	$1.06 \cdot 10^{-5}$
270	$1.38 \cdot 10^{-6}$	$1.94 \cdot 10^{-6}$	$6.79 \cdot 10^{-6}$
300	$1.46 \cdot 10^{-6}$	$1.24 \cdot 10^{-6}$	$3.68 \cdot 10^{-6}$

TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE KINETIC COEFFICIENTS OF Bi_{0.88}Sb_{0.12} ALLOY

Table 3. Kinetic coefficients of Bi_{0.88}Sb_{0.12} alloy obtained from the averaged values of the measured galvanomagnetic coefficients in the temperature range 80-300 K.

T	N	μ	ν
(K)	(m ⁻³)	(m ² /V·s)	(m ² /V·s)
80	3.32·10 ²²	69.3	58.5
90	4.95·10 ²²	53.4	21.4
110	8.80·10 ²²	36.1	14.4
130	1.35·10 ²³	25.5	10.2
150	1.98·10 ²³	18.2	7.28
170	2.70·10 ²³	13.5	5.40
190	3.81·10 ²³	9.51	3.81
210	5.46·10 ²³	6.53	2.61
230	6.57·10 ²³	5.36	2.14
250	1.02·10 ²⁴	3.30	1.32
270	1.38·10 ²⁴	2.35	0.94
300	2.15·10 ²⁴	1.42	0.56

It should be noted that the data given in Table 3 are in fairly good agreement with the corresponding data obtained for polycrystalline Bi_{0.88}Sb_{0.12} samples [17].

-
- [1] S. Tang and M.S. Dresselhaus. J. Mater. Chem. C, (2014), 2, 4710-4726.
- [2] A. Nikolaeva, L. Konopko, T. Huber, P. Bodiul, I. Popov E. Moloshnik. Journal of Electronic Materials, (2012), 1- 4.
- [3] S. Tang and M. S. Dresselhaus. Physical Review B, (2012), 86, 075436.
- [4] B. Landschreiber, E. Gunes, G. Homm, C. Will, P. Tomeš, C. Rohner, A. Sesselmann, P. Klar, S. Paschen, E. Muller and S. Schlecht. Journal of Elec. Materials, (2013), 1-6.
- [5] S. Tang and M. S. Dresselhaus. Nanoscale, (2012), 4, 7786-7790.
- [6] L. Fu and C. L. Kane. Physical Review B, (2007), 76, 045302.
- [7] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. Cava and M. Z. Hasan. Nature, (2008), 452, 970-974.
- [8] F. Nakamura, et al., (2011), Physical Review B, 84, 235308.
- [9] E.I. Rogacheva, A.A. Drozdova, O.N. Nashchekina, M. S. Dresselhaus and G. Dresselhaus. Applied Physics Letters, (2009), 94, 202111-202113.
- [10] A.A. Musayev. Galvanomagnetic effects, dispersion of helicon waves and scattering of charge carriers in the Bi-Sb alloys at 77÷300 K. – Dissertation thesis, Baku, 1981.
- [11] J.G. Hust. Rev. Sci. Instrum. (1970), 41, 622–624.
- [12] M. Vecchi, E. Mendez, M.S. Dresselhaus. “Physics of semiconductors”, Proceedings of the 13-th International Conference, Rome, (1976), p. 459-462.
- [13] K. Malik et al. (2012), Journal of Applied Physics 112, 083706.
- [14] E.I. Rogacheva, A.N. Doroshenko, O.N. Nashchekina. 2021. Materials Today: Proceedings, 44, 3458-3462.
- [15] A.A. Musayev, E.R. Yuzbashov. Micro- and nanotechnologies in electronics. Proc. XI International scientific-technical conference. Nalchik, 3-8 June 2019. Nalchik: Kab.-Balk. University (2019), pp.126-130.
- [16] B.M. Askerov. Electron transport phenomena in semiconductors. Moscow: “Nauka”, 1985.
- [17] Yu.T. Levitski, G.A. Ivanov. Fizika metallov i metallovedeniye, (1969), tom 28, No: 5, pp.126-130.

FEATURES OF DELOCALIZATION OF PARTICLES FROM A RECTANGULAR POTENTIAL WELL AT DECREASE OF ITS DEPTH WITH TIME

A.Ch. IZMAILOV

Institute of Physics, Azerbaijan Republic Ministry of Sciences and Education,

Baku, AZ-1143, Azerbaijan

e-mail: azizm57@rambler.ru

The process of delocalization of particles from the one-dimensional rectangular potential well with a decrease in its depth with time is theoretically investigated. In practice, such a well corresponds, in particular, to a region of a local quasi-homogeneous electric (or magnetic) field created along the direction of particle motion with a dipole electric (or magnetic) moment. It is believed that these particles are in a high vacuum and the electromagnetic forces acting on them are not dissipative. The conditions under which a multiple slowdown (cooling) of delocalized particles is achieved in comparison with their initial state in the potential well are established and analyzed.

Keywords: delocalization and slowdown of particles, rectangular potential well, high vacuum.

PACS: 45.50.-j, 41.20.-q, 42.62.Fi

1. INTRODUCTION

The development of effective methods for slowdown (cooling) of various micro- and nanoparticles in vacuum is important for studying the fundamental problems of gravity and quantum mechanics using these particles, including limits of applicability of the corresponding theories [1, 2]. Moreover, deep cooling of atoms and molecules in vacuum is necessary for precision fundamental research [3].

The author's articles [4, 5] showed the possibility of slowdown and trapping of various particles (including atoms and molecules in their ground quantum state) by means of external electromagnetic fields, which induce potential wells on a path of such particles with a fixed spatial distribution, but deepening with time up to some limit. It is assumed that the considered particles are in high vacuum conditions and forces acting on them are not dissipative, i.e. these particles move without friction. Depending on whether the particles have an electric (magnetic) dipole moment, a controlled electric (magnetic) field can be used to capture or slowdown them by the proposed methods [4, 5].

In the brief communication [6], author showed the possibility of significant slowdown (cooling) of such particles in high vacuum due to their removal from the initial localized state in a similar potential well with a sufficiently slow decrease in the depth of this well by means of a controlled weakening of the corresponding electromagnetic field.

In the general case, for study of such processes, it is necessary to numerically solve the differential equations of particle motion [6]. However, a number of important features of such a deceleration (cooling) of particles will be established in this work on the basis of simple mathematical relations for the one-dimensional rectangular potential well. In practice, such a well corresponds, in particular, to a region of a local quasi-homogeneous electric (or magnetic) field created along the direction of particle flight with a dipole electric (or magnetic) moment.

2. BASIC RELATIONSHIPS

As in articles [4-6], we will conduct theoretical study within the framework of classical mechanics and electrodynamics. Let us assume that a point particle with mass m moves in vacuum, including the region of the potential well $U(\mathbf{r}, t)$, which explicitly depends not only on the coordinate \mathbf{r} , but also on the time t . The total energy of the particle with a nonrelativistic velocity v is described by the well-known formula [7]:

$$E(\mathbf{r}, v, t) = 0.5mv^2 + U(\mathbf{r}, t). \quad (1)$$

We will consider the following potential energy $U(\mathbf{r}, t)$:

$$U(\mathbf{r}, t) = s(\mathbf{r}) * \varphi(t), \quad (2)$$

where the coordinate function $s(\mathbf{r}) \leq 0$ and $\varphi(t)$ is a function of time t . Such a non-stationary potential (2) can be created for particles with an electric or magnetic moment by means of a controlled electromagnetic field (in particular, non-resonant laser radiation) with a time-varying intensity, but with a fixed spatial distribution [4-6]. In this case (2), we obtain the following equation of particle motion [7]:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\varphi(t) \frac{ds(\mathbf{r})}{d\mathbf{r}}. \quad (3)$$

We consider the situation when the force on the right side of equation (3) does not have a dissipative effect on the motion of the particle, i.e. is not a force of friction. Then from relations (1)-(3), the important formula follows for the time derivative of the total particle energy E :

$$\frac{dE}{dt} = s(\mathbf{r}) \frac{d\varphi(t)}{dt}. \quad (4)$$

Further we will consider the one-dimensional rectangular potential well $U(x, t)$, bounded by the coordinates $x = \pm L$, whose depth decreases with time t (Fig. 1):

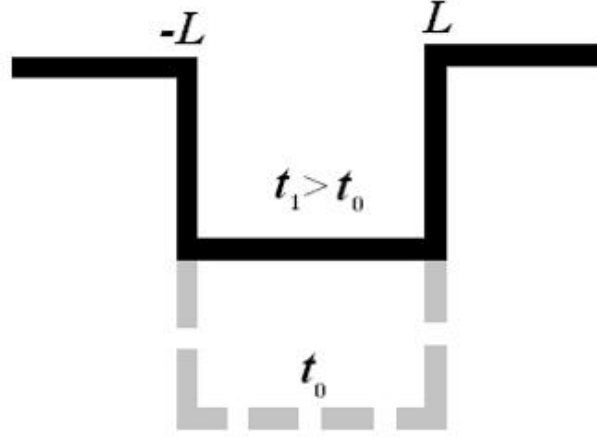


Fig.1. One-dimensional rectangular potential well with the depth decreasing during time t .

$$U(x, t) = -J_0\eta(L^2 - x^2)\varphi(t), \quad (5)$$

where $J_0 > 0$ is the constant with the dimension of energy, $\eta(L^2 - x^2)$ is the step function ($\eta(y) = 1$ for $y \geq 0$ and $\eta(y) = 0$ for $y < 0$), $0 \leq \varphi(t) \leq 1$ is a non-increasing function of time. It is believed that until the moment $t = 0$ the potential well (5) is stationary with the value $\varphi(0) = 1$ and a point particle with mass m and velocity v_0 is localized in it. Then, taking into account (5), the initial total energy E_0 of this particle at $t = 0$ has the form:

$$E_0 = 0.5mv_0^2 - J_0. \quad (6)$$

Localization of the particle in the well (5) is possible only at the energy $E_0 \leq 0$ (6), i.e. under the following limitation on the particle velocity v_0 :

$$|v_0| \leq v_m = \sqrt{\frac{2J_0}{m}}. \quad (7)$$

According to the equation of motion (3), the module $|v_0|$ (7) of the particle velocity will be constant within the one-dimensional rectangular potential well (5) despite the change in its depth. Starting from the moment $t = 0$, the depth of the well (5) starts to decrease. Such a process is accompanied by an increase in the total particle energy $E(t)$, according to relation (4), which in the case of a rectangular well (5) reduces to the following formula for $t \geq 0$:

$$E(t) - E_0 = J_0[\varphi(0) - \varphi(t)] = J_0[1 - \varphi(t)]. \quad (8)$$

From (5)-(8) we obtain the condition when the particle total energy $E(t_1) = 0$ at a moment $t_1 > 0$:

$$\varphi(t_1) = \frac{mv_0^2}{2J_0} = \frac{v_0^2}{v_m^2} \leq 1. \quad (9)$$

At a moment $t_2 \geq t_1$ this particle can already leave this well (Fig.1) with the final speed v_f which are determined on the basis of relations (4) and (5) taking into account that at the moment $t = t_1$ its total energy $E(t_1) = 0$:

$$0.5mv_f^2 = E(t_2) - E(t_1) = J_0[\varphi(t_1) - \varphi(t_2)]. \quad (10)$$

Let's assume that at the initial moment of time $t=0$, the considered particle with the velocity v_0 (7) is within the potential well (Fig. 1) with the coordinate x ($L \geq x \geq -L$). Then it is not difficult to find the moment t_2 when the particle leaves this well:

$$t_2 = \left(\frac{2 \cdot L \cdot k + L \cdot x \cdot v_0 \cdot |v_0|^{-1}}{|v_0|} \right). \quad (11)$$

The value k in (11) is the number of particle collisions with boundaries of the well (Fig. 1) during the localization time $t_2 > t \geq 0$ and is determined by the following formula:

$$k = \text{ceil} \left(\frac{x \cdot v_0}{2L \cdot |v_0|} + \frac{|v_0| \cdot t_1}{2L} - 0.5 \right), \quad (12)$$

where the function $\text{ceil}(z)$ is the minimum integer number $\geq z$, and the time t_1 is found from (9). Now, from relation (10), we find the following expression for the final particle velocity v_f , taking into account its sign, i.e. exit direction from the potential well (Fig. 1):

$$v_f = J_0^{0.5} \cdot [\varphi(t_1) - \varphi(t_2)]^{0.5} \cdot v_0 \cdot |v_0|^{-1} (-1)^k. \quad (13)$$

3. DISCUSSION OF RESULTS

Further, we will carry out research on the example of the following time dependence $\varphi(t)$ (2):

$$\varphi(t) = \exp[-(t/T)^n], \quad (t \geq 0, n > 0), \quad (14)$$

where T is some characteristic time interval.

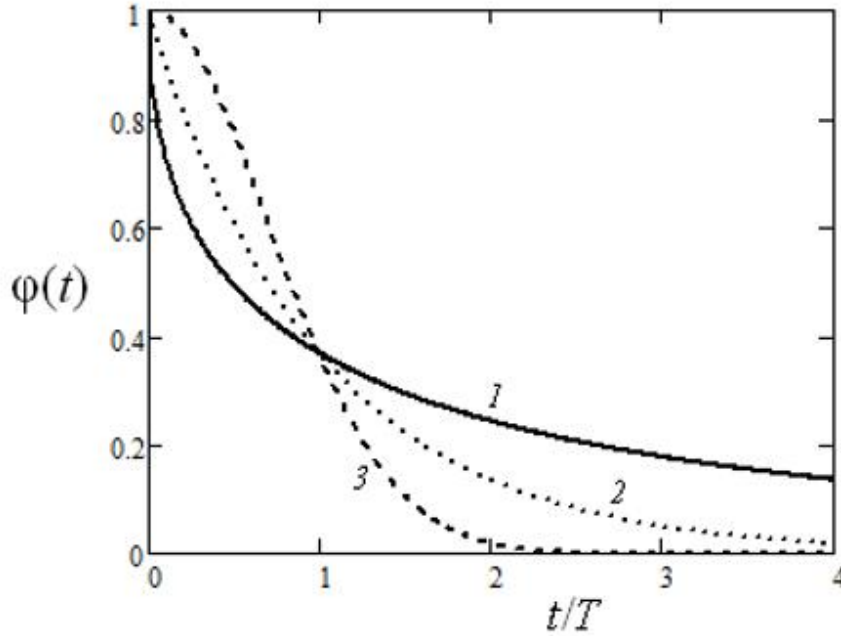


Fig.2. Dependence of the function $\varphi(t)$ (14) on the time t (in units T) for the parameter $n=0.5$ (curve 1), 1 (2) and 2 (3).

Fig. 2, for example, shows such dependences $\varphi(t)$ (14) for a number of the parameter $n=0.5, 1$ и 2 . Based on the function(14), we obtain from (9) the moment t_1 at which the total energy of the particle $E(t_1) = 0$:

$$t_1 = T \cdot [\ln(v_m^2/v_0^2)]^{1/n}. \quad (15)$$

Fig. 3 shows the dependences of the values v_f (13), t_2 (11), t_1 (15) and k (12) on the characteristic time interval T of the function $\varphi(t)$ (14). This parameter T in Fig. 3 is presented in fractions of the characteristic time $\tau = (2L/v_m)$ of the passage of the localized particle between the boundaries of the potential well (Fig. 1) with the maximum possible

speed v_m (7). It can be seen that the final velocity v_f of the delocalized particle undergoes damped oscillations with increasing T (Fig. 3a). The times t_1 (15) and $t_2 \geq t_1$ (11) increase monotonically with increasing T (Fig. 3b). We note that equal values $t_2 = t_1$ correspond to the moments when, according to (13), the velocity $v_f=0$ (Figs.3a,b). The value k , which determines the number of collisions of the localized particle with boundaries of the well (Fig. 1) during the time interval $t_2 > t \geq 0$, also increases with increasing T (Fig. 3c). The dependences presented in Figs. 3 do not qualitatively change when the initial coordinate x of the particle localized within the well (Fig.1) changes at the initial time $t=0$.

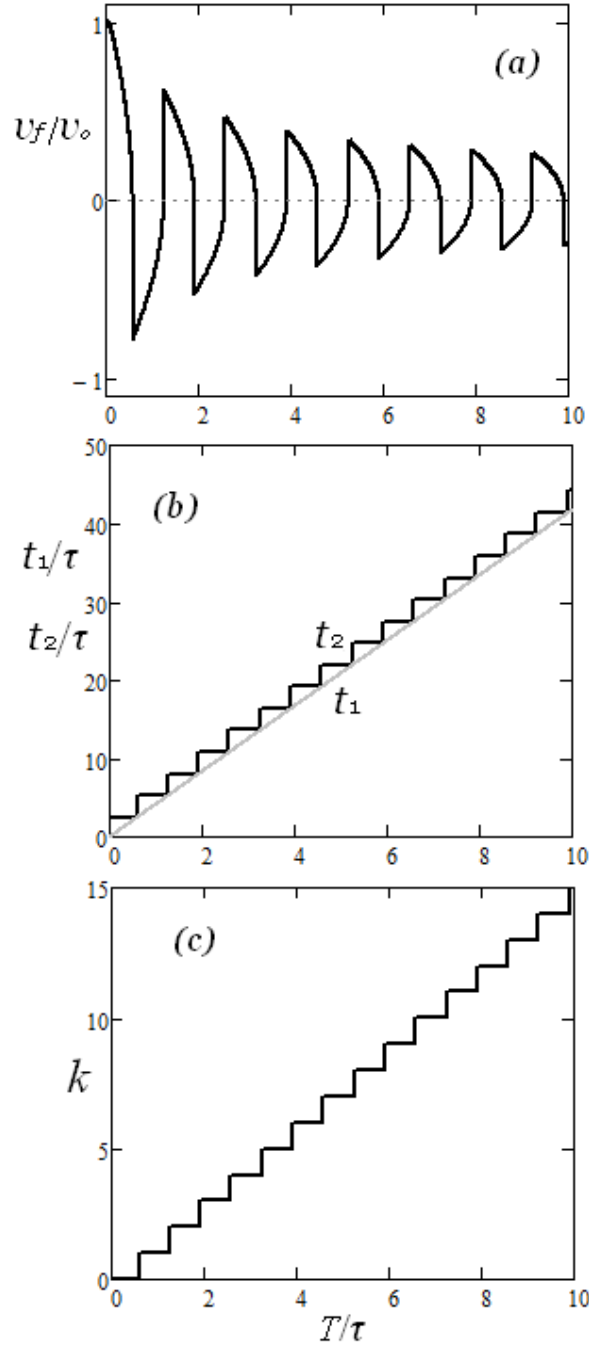


Fig.3. Dependences of values v_f (a), t_1 , t_2 (b) and k (c) on the characteristic time interval T (in units $\tau = 2L/v_m$), when $n=0.5$, $x=0.39L$, and $v_0=-0.36 v_m$.

At the same time, the following characteristic σ is of special interest, which determines the ratio of the values of the kinetic energies of the particle averaged over the distance $L \geq x \geq -L$ when it leaves the potential well with the final velocity v_f and during its previous localization in this well with the speed $|v_0|$:

$$\sigma = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L \left(\frac{v_f(x)}{v_0} \right)^2 dx, \quad (16)$$

where the dependence $v_f(x)$ is determined on the basis of relations (9)-(13).

Fig. 4 shows the dependences of the value of σ (16) on the characteristic time interval T for three values of the parameter $n = 0.5, 1$ and 2 of the function $\varphi(t)$ (14). It can be seen that σ decreases monotonically with increasing T , starting from the value $\sigma = 1$ at $T = 0$, and can reach very small values $\sigma \ll 1$ at $T \gg \tau = (2L/v_m)$. In this case, a faster decrease in σ takes place for the parameter $n = 0.5$, when there is a slower decrease with time t of the function $\varphi(t)$ (14) compared with the cases $n = 1$ and 2 (Fig. 2).

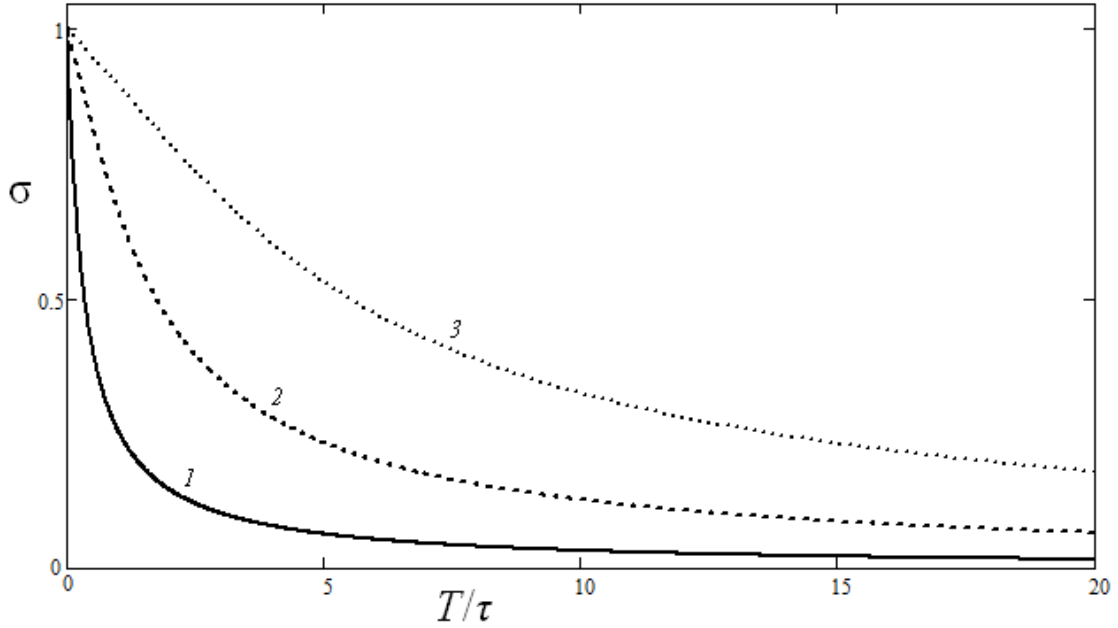


Fig.4. Dependence of the value σ on T (in units $\tau = 2L/v_m$) for the parameter $n=0.5$ (curve 1), 1 (2) and 2 (3), when $v_0 = -0.36 v_m$.

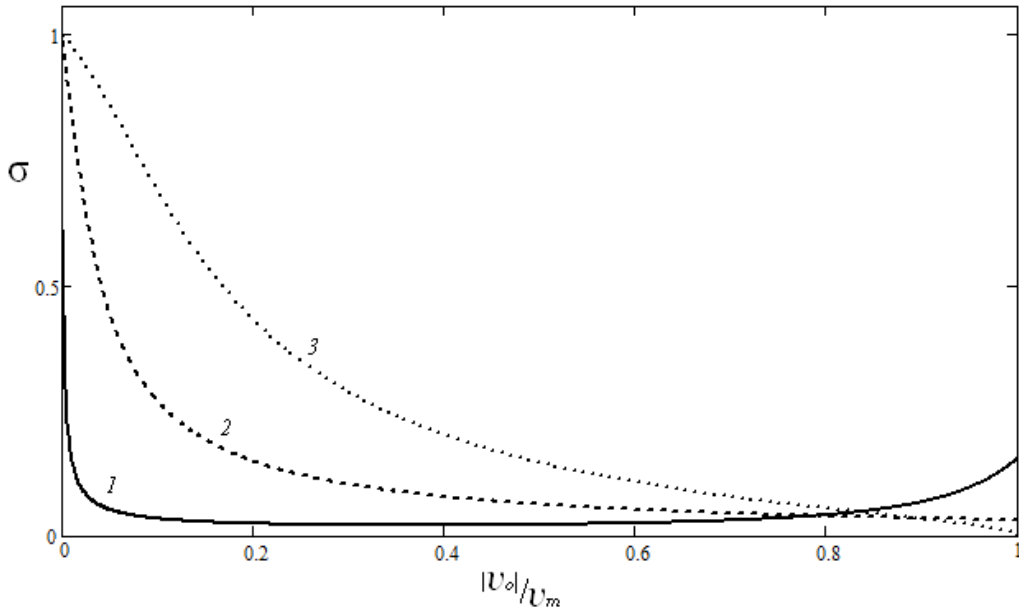


Fig.5. Dependence of the value σ on $|v_0|$ (in units v_m) for the parameter $n = 0.5$ (curve 1), 1 (2) and 2 (3) when $T = 15\tau = 30L/v_m$.

Fig. 5 shows the dependences of the value σ (16) on the speed $|v_0|$ of the localized particle for the fixed time interval T and three parameters $n = 0.5, 1$, and 2 of the function $\varphi(t)$ (14). It can be seen that for $n=1$ and 2 , the value of σ decreases with increasing $|v_0|$ (starting from the value $\sigma = 1$ at $v_0=0$) over the entire interval $|v_0| \leq v_m$ and can reach very small values $\sigma \ll 1$ as $|v_0|$ approaches to v_m (curves 2 and 3 in Fig. 5). At the same time, at $n = 0.5$, the dependence $\sigma(v_0)$ after a sharp decrease with increasing $|v_0|$ may rise as $|v_0|$ approaches to v_m (curve 1 in Fig. 5).

Thus, based on the study, we can conclude that the efficiency of deceleration (cooling) of particles during their delocalization from the considered potential well (Fig. 1) increases with a slower decrease in the depth of the well, as well as with a reduction in its length $2L$, since the characteristic time interval T of the function $\varphi(t)$ (14) is presented on the horizontal axis in Figs. 3 and 4 in fractions of the value $\tau = (2L/v_m)$. According to Fig.3c, during this process, quite a lot of oscillations of the particle between the boundaries of the well should occur.

The established features and qualitative results of the delocalization process of particles from the considered rectangular potential well (Fig. 1) are also confirmed by additional calculations of the author

carried out for various dependences of the well depth decrease with time t , different from the function $\varphi(t)$ (14).

-
- [1] *C. Gonzalez-Ballester, M. Aspelmeyer, L. Novotny, R. Quidant, and O. Romero-Isart.* Levitodynamics: Levitation and control of microscopic objects in vacuum. *Science*, **374** (6564), eabg 3027 (2021).
- [2] *J. Millen, T.S. Monteiro, R. Pettit, and A.N. Vamivakas.* Optomechanics with levitated particles. *Reports on Progress in Physics*, **83**(2), 026401 (2020).
- [3] *M. Weidemuller, C. Zimmermann.* Cold atoms and molecules: Concepts, Experiments and Applications to Fundamental Physics, Wiley (2009).
- [4] *A.Ch. Izmailov.* Trapping of classical particles by an electromagnetic potential well deepening over time. *Optics and Spectroscopy*, **119**, N 5, pp. 883-886 (2015).
- [5] *A.Ch. Izmailov.* On the motion control of microparticles by means of an electromagnetic field increasing with time for spectroscopic applications. *Optics and Spectroscopy*, **122**, N2, pp. 315-321 (2017).
- [6] *A.Ch. Izmailov.* On slowdown of particles in a vacuum at their delocalization from an electromagnetic well with a depth decreasing with time. arXiv:2209.10523 (presented 17 September 2022).
- [7] *L.D. Landau and E.M. Lifshitz.* Course of Theoretical Physics, Vol. 1 : *Mechanics*, 3rd ed. (Butterworth-Heinemann, 1976).

EFFECT OF ELECTROTHERMOPOLARIZATION ON DIELECTRIC PROPERTIES IN PE/Ta₂O₅ NANOCOMPOSITE

A. HUSEYNOVA

*Institute of Physics of the Ministry of Science and Education of the Republic of Azerbaijan,
131, G. Javid ave., Baku, AZ 1143, Azerbaijan,
e-mail: aem05@rambler.ru*

Dielectric properties of polymer nanocomposite based on PE and tantalum oxide nanoparticles were studied. It has been shown that the dielectric properties of PE/Ta₂O₅ polymer nanocomposite are significantly changed at 7% and 10% concentration of nanoparticles.

Keywords: nanocomposites, polyethylene, tantalum oxide, polymer nanoparticles, electrothermopolarization.

PACS: 77.55

1. INTRODUCTION

Polymers and nanocomposite materials based on them are widely used in practice as dielectric and electrical materials. Qualitative dielectric characteristics of polymers, including specific electrical resistance, electrical strength, etc. due to their properties, they are widely used in the production of insulating materials, electronic devices, capacitors, high-voltage machines, generators, and many other devices. These possibilities increase even more in nanocomposites with new composition obtained by using nanofillers of different origins [1-3, 8]. The diversity of polymer nanocomposites and the ability to obtain materials whose physico-chemical properties can be changed on a large scale, opens wide opportunities for their use as construction materials in microelectronics and radio engineering. As it is known, polymers and nanocomposite materials obtained on their basis undergo volume charge polarization after being exposed to an external electric field at sufficiently high temperatures and have the property of electricity. The main characteristics of the electret material are the value of the electric charge and its stability. Dielectric properties of nanocomposites coated with Al₂O₃ with PE and nanoparticle additives were studied depending on the influence of external factors and the amount of nanofiller. The frequency dependence of the dielectric permittivity and the tangent of the dielectric loss angle

in the indicated type of nanocomposites was studied in the intervals of 1kHz-1MHz.

EXPERIMENTAL PART

The inclusion of nanoparticles in a polymer matrix imparts the desired properties required for physical and mechanical applications. The combination of a polymer (continuous phase) with nanoparticles (discontinuous phase) results in a new material known as polymer nanocomposites (Fig.1). Polymer nanocomposites, being a class of materials with amazing properties, have their own problems, which are complex interfacial regions between the polymer matrix and the nanoparticle. These problems are solved with the help of processing methods. Overcoming the disadvantage will lead to the creation of materials with desired properties (optical, thermal, electrical and mechanical).

The method of preparation of nanocomposite materials directly affects the overall characteristics of the materials. A good understanding of the processing parameters (temperature, speed/time and pressure) will contribute to the properties of the nanocomposites. In most cases, materials for the development of polymer matrix composites require preheating in a vacuum furnace at a certain temperature for a given period of time, depending on the nature of the materials.

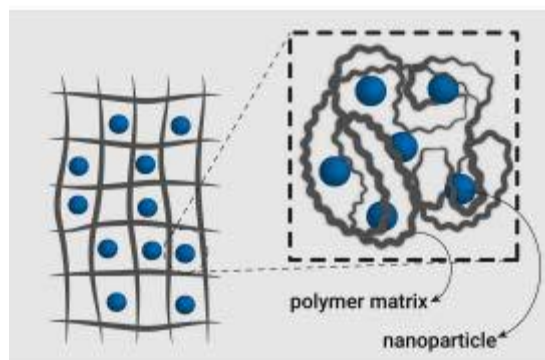


Fig.1. A polymer nanocomposite consists of a polymer matrix and any other substance as reinforcement material or filler.

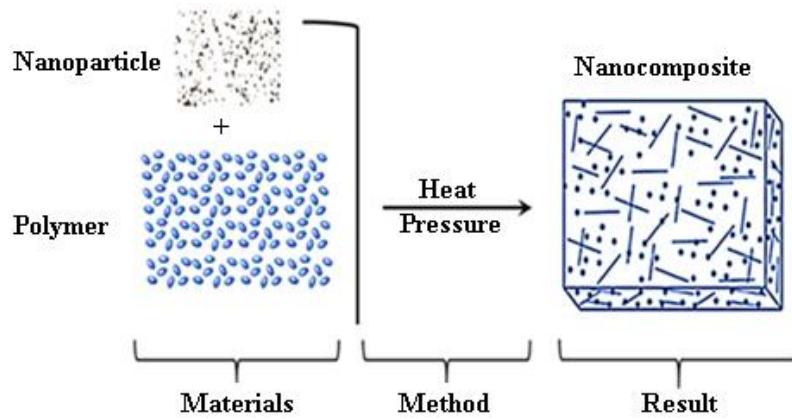


Fig.2. Schematic diagram of the stages of processing nanocomposites from start to finish

On Fig. 2 shows the stages of processing nanocomposites from start to finish. The dielectric properties were measured using an IET1920 PRECISION LCR METER at a frequency of 1kHz-1MHz at a temperature of 293K. Polymer nanocomposites were electrothermopolarization (ETP) using an external electric field with a strength of $7 \cdot 10^6$ - $12 \cdot 10^6$ V/m, at a temperature of 373K and then cooling to room temperature for 1 hour. Polymerization provides a strong interaction between the filler and the matrix, which is required in a number of cases. The film thickness is 95–100 μ m.

RESULTS AND DISCUSSION

The dielectric permittivity of both nanocomposites and for polyethylene at all frequencies up to the ETP increases. The nanocomposite sample containing 7% Ta₂O₅ shows an increase of about 40% per ϵ compared to the original PE in the measured frequency range. From Fig.3 it can be seen that the tendency ϵ gradually increases. With an increase in the content of Ta₂O₅ nanoparticles in the polymer, the number of charge carriers that are captured by the interfacial region increases, which leads to an increase in the degree of interfacial

polarization and an increase in the permittivity of nanocomposites. After ETP, the permittivity in the PE sample remains unchanged up to 1 MHz, while in the PE/7% Ta₂O₅ and PE/10% Ta₂O₅ samples, a decrease to 200 kHz is observed. After 200 kHz, for nanocomposite samples, the permittivity increases and a stable state appears up to 1 MHz.

Figure 3(b) further shows that the increasing trend of dielectric constant gradually alleviates when the filler loading exceeds 7wt%. This is mainly attributed to the aggregation of Ta₂O₅ nanoparticles in nanocomposites with high filler loading, and thus the reduction of interfacial polarization contributing to the dielectric property.

Figure 4 (a) shows the dependence of the dielectric loss tangent on frequency for nanocomposites based on PE/Ta₂O₅. Before ETP, the values of tg δ for nanocomposite samples have a peak at a low frequency. PE at low frequencies are stable, and then there is an increase in the value of tg δ in the frequency range from 20 kHz to 1 MHz. After frequencies of 5–10 kHz, both nanocomposite samples show a decrease in the dielectric loss tangent. From a frequency of 200 kHz, the dielectric loss tangent increases in nanocomposites.

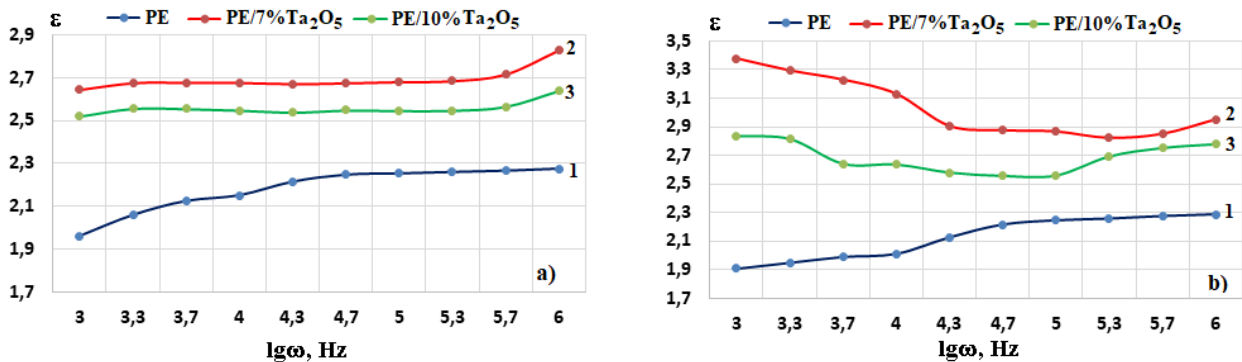


Fig.3. The dependence of the true dielectric permittivity on the frequency: 1. PE; 2. PE/7% Ta₂O₅; 3. PE/10% Ta₂O₅ before (a) and after (b) electrothermopolarization.

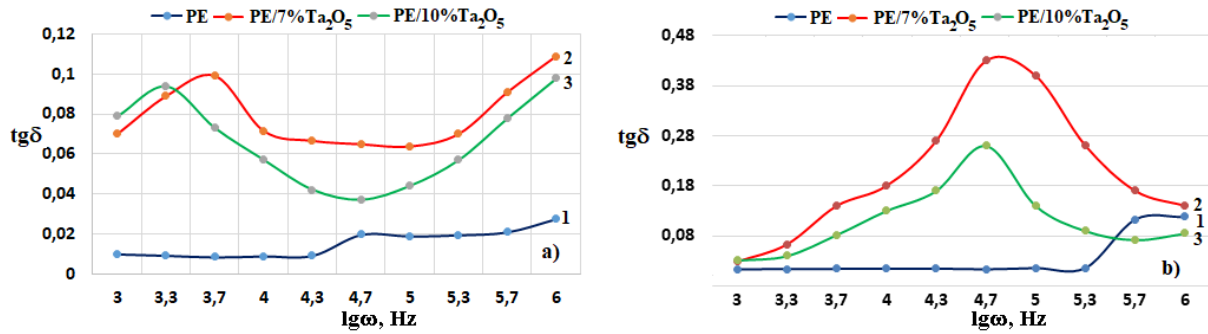


Fig.4. Dependence of dielectric loss tangent on frequency: 1. PE; 2. PE/7%Ta₂O₅; 3. PE/10%Ta₂O₅ before (a) and after (b) electrothermopolarization.

On fig. 4.b there is a peak of dielectric loss tangent relaxation and may be related to electrode polarization or interfacial polarization. It can be seen that, as nanofillers negatively affect the dielectric loss of the polymer in the frequency range above $2 \cdot 10^3$ Hz, the main peak is observed for the PE/7% Ta₂O₅ nanocomposite (50 kHz), and for the PE/10% Ta₂O₅ nanocomposite (65 kHz). The dielectric losses of both nanocomposites decrease in the frequency range from 10^3 kHz to 600 kHz, approaching sufficiently low values. The high-frequency part of dielectric losses arises due to relaxation types of polarization.

The dielectric loss after the ETP of the original PE increases (Fig. 4. b.) and is in a fairly high-frequency range of $200 \cdot 10^3$ Hz. From Fig. 6 it can be seen that the dielectric loss of each sample is related to the dipole polarization. Due to the large size of these dipoles, their relaxation is much more difficult and there are more obstacles preventing their rotation [4-7]. These forces restrain the rotation of their own dipoles and the molecular chain of polymers under the

action of an applied external electric field, and, therefore, reduce the intensity of polarization, which has a negative effect due to the large specific surface of the nanoparticle, they rather affect the own dipoles of the base material.

FINDINGS

From the discussion mentioned above, three conclusions could be drawn. First, nanofillers play an important role in the polarization of nanocomposites and they can change the polarization intensity of their own dipoles in polymers. Second, the depth of the traps can also be changed by incorporating nanofillers, and therefore change the interfacial polarization in the nanocomposites. Thirdly, by controlling the nanofiller content, the dielectric properties can be changed to be higher or lower than that of pure PE. By introducing Ta₂O₅ nanoparticles into the PE polymer matrix, it was possible to improve the physical properties of the polymer. This is achieved by combining a set of material properties.

- [1] S.G. Boev. Charge injection into polymer dielectrics under corona discharge. Electret effect and electrical relaxation in solid dielectrics. Interuniversity collection. Moscow: Ed. MIEM, 1988. p.71.
- [2] A. Gulyakova, P. Frübing, and Yu.A. Gorokhovatskiy. Relaxation processes in high-impact polystyrene films with titanium dioxide inclusions. Conf. Proc. of XIII Int. conf. "Physics of Dielectrics", St. Petersburg, 2011, 23-26 May, vol.2, pp. 56-59.
- [3] R.A.P. Altafim, D. Rychkov, W. Wirges, R. Gerhard, H.C. Basso, R.A.C. Altafim and M. Melzer. Laminated Tubular channel Ferroelectret Systems from Low-density Polyethylene Films and from Fluoro-ethylene-propylene Copolymer Films—A Comparison IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation. 2012, V.19, p. 1116- 1123.
- [4] A.M. Maharramov, R.S. Ismayilova, M.A. Nuriyev, A.A. Nabyev. Dielectric properties of nanocomposites based on ultra-high molecular weight polyethylene and α - SiO₂. J. Plasticheskie massy, 2019, № 1-2, p.6-8.
- [5] Yu.A. Gorokhovatskiy. Relaxation of the electret state in polyethylene-based polymeric fiber. Materials of the X International Conference "Physics of Dielectrics". SPb: Publishing house RSPU im.A.I. Herzen. 2004.p.84-86.
- [6] Zhi-Min Danga, Hai-Yan Wang, Hai-Ping Xu. Influence of silane coupling agent on morphology and dielectric property in BaTiO₃/BaTiO₃/polyvinylidene fluoride composites. J. Appl. Phys. Lett. 2006, 89, 112902.
- [7] A. Maliakal, H. Katz, P.M. Cotts, S. Subramoney, P. J Mirau. Am Chem Soc, 2005, 127, 14655.
- [8] Z.M. Dang, J. Yuan, J. Zha, T. Zhou, S. Li, G. Hu. Fundamentals, processes and applications of high-permittivity polymer-matrix composites, Prog. Mater. Sci. 2012, 57(4), p. 60-723.

EFFECT OF NANOISLANDS AND NANOWIRES ON THE THERMOELECTRIC QUALITY OF $Bi_2Te_3<Ni>$ AND $Bi_2Te_3<Zn>$

K.Sh. GAHRAMANOV¹, **A.Sh. GAHRAMANOV²**, **S.Sh. GAHRAMANOV¹**,
H.V. ORUJOVA¹, **N.A. ABDULLAYEV^{1,2}**, **N.N. ABDULZADE¹**, **G.M. AHMEDOV¹**

Institute of Physics Ministry of Science and Education of Azerbaijan, Baku, Az-1143

H. Javid ave.131

²*Baku State University, Z. Xalilov str., 33, AZ1148 Baku, Azerbaijan*

e-mail: samir.gahramanov@gmail.com

Work has been carried out to create materials with a vacuum gap of ~ (1-2) nm between nanograins to implement the tunneling mechanism of increasing the thermoelectric figure of merit and the corresponding elimination of phonon thermal conductivity. The formation of nanowires on the (0001) surface of Bi_2Te_3 crystals with impurities of easily diffusing *Ni* and *Zn* atoms has been studied. It is shown that the migration of atoms, the movement and coagulation of clusters form structures with nanoislands, on the basis of which nanowires are self-organized. Nanostructures in the form of islands, nanowires in the interlayer space are one of the reasons for the increase in the thermoelectric figure of merit in materials of the $A_2^VB_3^VI$ type.

Keywords: layered crystal, nanoislands, nanowires, thermoelectric figure of merit.

PACS: 61.46.Df; 61.72.-y; 61.72.Cc

INTRODUCTION

Layered crystals of the $A_2^VB_3^VI$ type are known as materials widely used in thermoelectricity. The topologically protected states discovered in them turned them into an intensively studied object, separated into a new type of condensed state of matter - a topological insulator. The prospect of increasing the thermoelectric figure of merit of these materials becomes more accessible when the technology uses the effects of self-organization of nanostructures, which play a special role in obtaining low-dimensional systems in them, such as nanosized islands and wires, moreover, wires and ridges of bands on the surface can be used as one-dimensional charge transfer channels with reduced dissipation. The presence of folds and stripes, miniature "ridges" on the surface of the Bi_2Te_3 topological insulator effectively modulates the Dirac electrons [1] so that they follow a path exactly corresponding to the topography of the crystal surface.

A certain type of impurities, without radically affecting the chemical and electronic structure of the layers, are ejected into the interlayer space and defective cavities, where they form nanostructures of various dimensions and shapes, they line up in a plane, wires or islands that can be used to control the interlayer distance. Charge transfer along 1D wires, 2D planes, and tunneling through nanoislands has the properties of a Luttinger liquid [2, 3], as well as the edge states of the quantum spin Hall effect induced by two-dimensional electronic states formed when the layers move apart, while transport in the bulk of the layers has the character of a Fermi liquid. We have previously reported [4–7] on the formation of such interlayer nanostructures and their effect on kinetic parameters as two-dimensional impurity layers forming superlattices and one-dimensional charge flow channels.

METHODS AND EXPERIMENT

The processes of formation of interlayer nanowires were studied by lining up clusters on the (0001) surface of a layered Bi_2Te_3 crystal doped with *Ni* and *Zn*.

AFM images were obtained on a Solver Next brand scanning probe microscope. X-ray diffraction studies of the (0001) surface were carried out on a Philips Panalytical X'Pert Pro XRD diffractometer.

The AFM images show an array of nanoislands arranged into one-dimensional structures. Diffusion processes lead to the approach of individual small nanoparticles and the formation of contacts between them, in the (0001) Bi_2Te_3 plane, where ordered nanoislands similar to quantum dots are formed.

Nickel and zinc have a small ionic radius; therefore, these atoms easily diffuse into the interlayer space and defective cavities of bismuth and antimony chalcogenides. Figures 1 and 2 show photographs taken with a scanning probe microscope: a) an array of individual nanoislands; b) nanoislands forming nanowires; profilogram showing the height and width of the nanowires;

c) X-ray diffraction pattern of a freshly cleaved $Bi_2Te_3 <Ni>$ surface. Figure 1(c) shows *Ni*, $NiTe_2$, $NiTe$ on the interlayer fresh cleaved surface of $Bi_2Te_3 <Ni>$. Migration and interaction of clusters with each other leads to the formation of filaments in the framework of a process that has a "bottom-up" direction. The main reason for the formation of stressed islands on the surface is the relaxation of elastic stresses at the edges of the layers and the interaction of the islands through the stresses they create in the crystal. The shape of islands can change significantly during overgrowth or post-growth annealing. Figure 1a shows the final result of the dynamics of the formation of large islands from small and linear formations formed from them, which can be called nanowires.

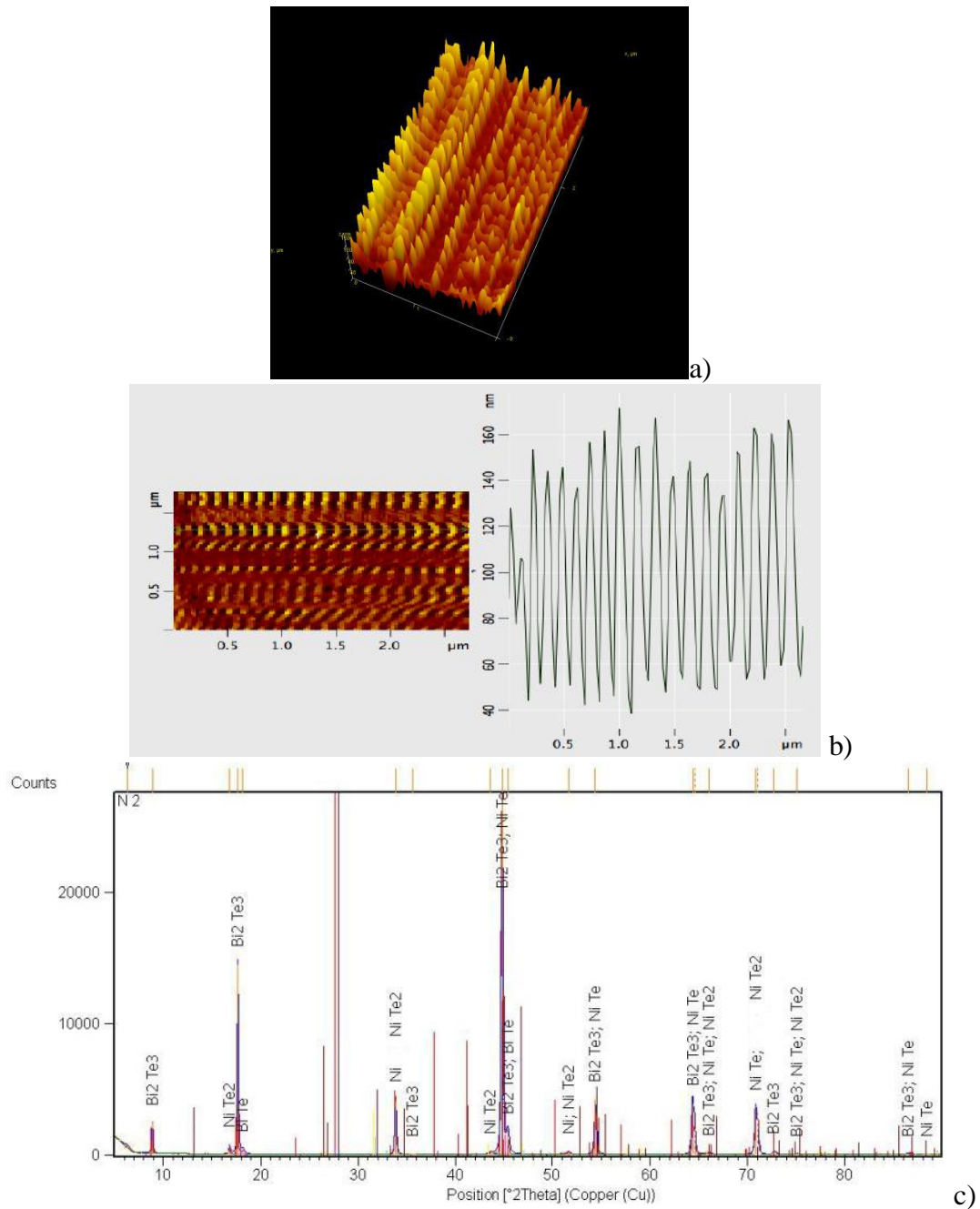


Fig.1. 3D AFM image (nanoislands and nanowires) of $\text{Bi}_2\text{Te}_3\langle\text{Ni}\rangle$ - a); 2D AFM image of $\text{Bi}_2\text{Te}_3\langle\text{Ni}\rangle$ cross section profilograms - b); $\text{Bi}_2\text{Te}_3\langle\text{Ni}\rangle$ X-Ray diffraction pattern - c).

The dynamics of the formation of nanofragments is such that nanoislands similar to QDs initially appear, and later, in the course of evolution, the islands can merge, forming bridges with the preservation of their shapes and heights. As a result of the developed technology, an ordered array of nanoislands was formed in the process of self-organization on the (0001) plane. Particle aggregation leads to a decrease in the distribution density and the appearance of large nanoobjects. Electron microscopic images showed that nanoobjects are formed from nanoislands in the process of diffusion at temperatures of 500-600K. Penetrating mainly into the interlayer space, impurities create three-dimensional periodic structures consisting of arrays of points between the

layers of quintets, which, as a result, move apart. The enhancement of anisotropy during the self-organization of nanoislands leads to an increase in the role of "bending" vibrations in the thermal properties of the crystal. The role of this specific branch of acoustic oscillations and its behavior in layered crystals according to the Lifshitz theory [8] was reported in [9]. The "bending" branch corresponds to oscillations propagating in the plane of the layers with atomic displacements in the direction perpendicular to the layers and makes the main contribution to heat transfer, with a temperature dependence that has three different characters and the greater the anisotropy of the crystal, the more significant its role in the "membrane" effect (increase in frequencies " bending

"vibrations during stretching of the layers), leading to negative thermal expansion in the plane of the layers. The anomalies of the kinetic parameters observed by us occurred in the region of a linear temperature increase in the heat capacity, where the contribution of the "bending" branch dominates [9]. Scattering of this phonon branch at the base of the islands, which are chemically bound to quintets, leads to thermalization of the QD levels followed by tunneling. This region, where the heat capacity is $C \sim T^2$, and the temperature increase in the thermal conductivity $\chi \sim T^{2+x}$ (where x can be determined by tunneling processes, i.e., the size and density of the islands), is marked as a region of thermal anomaly. Note that the decrease in the lattice thermal conductivity of quintet layers in this region can be somewhat compensated by an increase in the thermal conductivity of the Luttinger liquid of the tunneling current in the nanowires. The thermoelectric efficiency of these samples is higher than that of undoped ones, apparently due to a decrease in the total thermal conductivity of the "quintet layers- nanowires" composite by an increase in the role of phonon scattering of layers at the boundaries of nanowires. These processes are dominated by phonons corresponding to bending vibrations, which have a quadratic dispersion form. Aggregated structures connected to each other by a chain of clusters provide charge tunneling along conducting channels, with the main contribution being made by several highly conductive channels. Since the radius of charge localization on nanoislands is smaller than the distance between localized states in these structures,

charge transfer occurs via tunnel hops. Differences in size and another type of inhomogeneity lead to a scatter of energy levels corresponding to different localized states, so the transitions of charge carriers between localization centers are accompanied by absorption or emission of phonons. Since the distance between the centers does not allow the transfer of phonons, the phonon component of the thermal conductivity decreases accordingly. In addition, the mechanism of broadening the interlayer space is triggered, which hinders the transfer of vibrational energy between layers - phonon confinement, which also leads to a decrease in phonon thermal conductivity.

Clusters forming nanowires broaden the van der Waals space without destroying the topologically protected states [10] and shift them into the inner quintet [11]. At the temperatures of existence of non-dissipative transport over topologically protected states, the probability of an increase in thermoelectric power increases [12]. The choice of the temperature regime for annealing the doped crystals made it possible to obtain interlayer nanostructures of the required dimension and height. It was found that the migration and diffusion aggregation of atoms leads to coagulation of a one-dimensional series of clusters, while the relaxation of elastic stresses on defect centers and the interaction of clusters lead to the formation of nanowires. This is also evidenced by AFM images in $Bi_2Te_3 <Zn>$, on the Fig. 2-4 nanostructures are shown in different directions by lines.

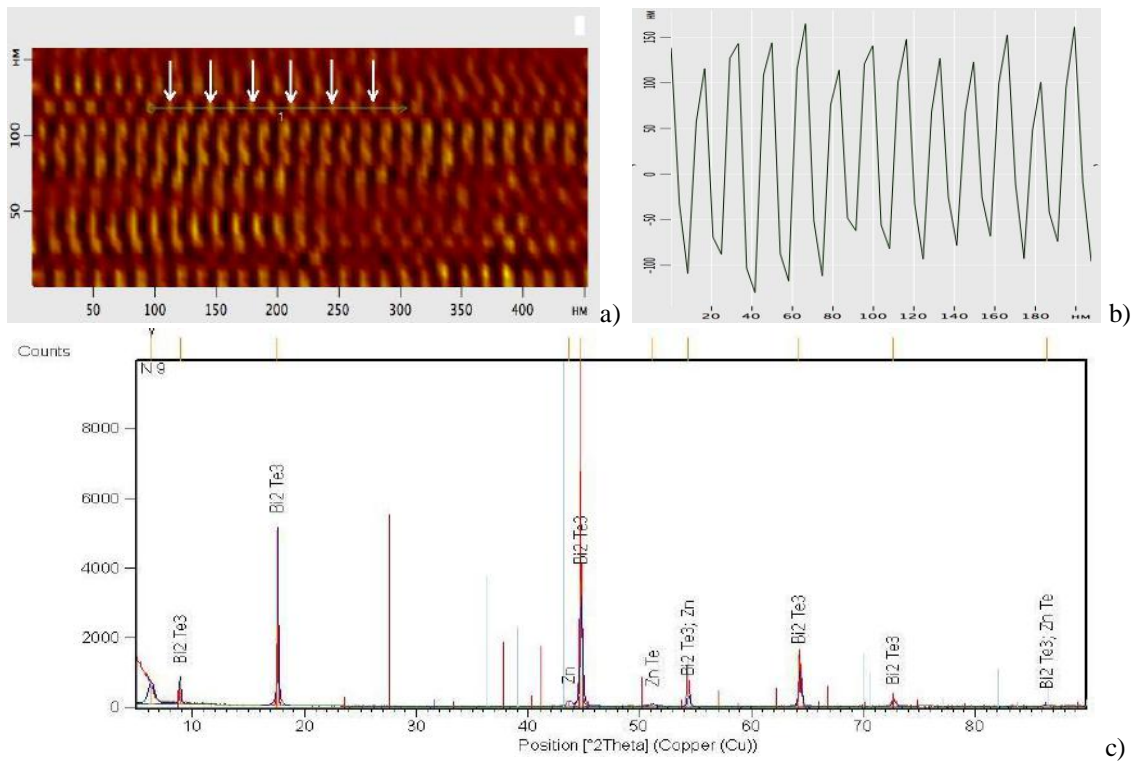


Fig.2. 2D AFM image of the (0001) $Bi_2Te_3 <Zn>$ surface – a); profilogram along the line shown in Fig. 2a – b); $Bi_2Te_3<Zn>$ X-Ray diffraction pattern - c).

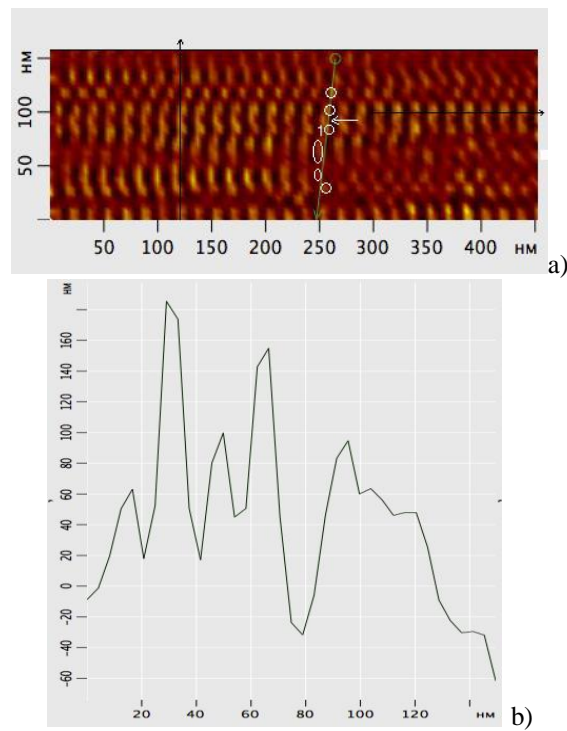


Fig.3. 2D AFM image of (0001) $Bi_2Te_3<Zn>$ - a); profilogram along the line shown in Fig. 3a – b)

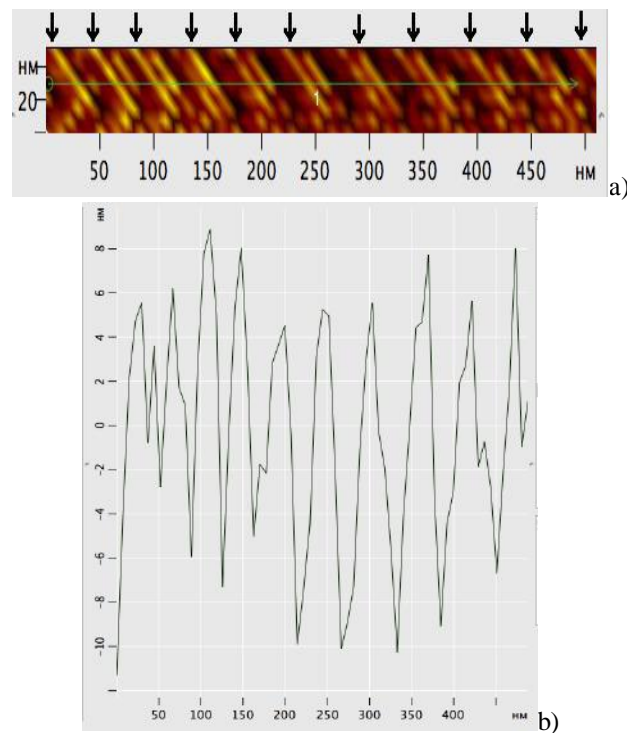


Fig.4. 2D AFM image of the (0001) $Bi_2Te_3<Zn>$ - a); profilogram along the line shown in Fig. 4a – b)

Fig. 2a shows a 2D AFM image of the (0001) $Bi_2Te_3<Zn>$ surface, small nanoparticles are indicated by white arrows, and Fig. 2b shows a profilogram (along the line shown in Fig. 2a). It can be seen from this profilogram that the interlayer contacts are located approximately at distances of 10–15 nm from each other. Figure 2(c) shows Zn and ZnTe on the interlayer fresh cleaved surface of $Bi_2Te_3<Zn>$. Figure 3(a, b) shows a 2D AFM image with a profilogram across the

section (Fig.3a), nanoobjects are marked with white circles in Fig.3a. The profilogram given in Fig.2b shows that the length of the nanowires is nonuniform in the transverse direction; point contacts with sizes of the order of ~ 15–20 nm are also formed between them. A fragment of these nanowires is shown in Figs.4a,b (they are marked with black arrows in Fig. 4a), it can be seen from the profilogram that point contacts are formed at distances of ~20–30 nm. Three

mechanisms can be named that contribute to an increase in the thermoelectric figure of merit when using nanostructures [13-17]: additional scattering of phonons at the boundaries of nanograins; electron tunneling between nanostructural elements; energy filtering of carriers due to the presence of potential barriers between nanograins. The paper [13] discusses these mechanisms of increasing the quality factor.

The focus is on the effect of nanograin sizes on the value of kinetic coefficients in solid solutions based on $p-Bi_xSb_{2-x}Te_3$ ($x=0.3\div 0.4$) obtained by mechanical activation treatment followed by hot pressing. *Electron tunneling.* To study the influence of tunneling of current carriers on the thermoelectric figure of merit in bulk nanostructured samples, the shape of crystalline nanograins was modeled as a pair of truncated cones with a common base, and these grains were separated by tunneling barriers [18]. When calculating the heat flux through the tunnel gap, the mismatch between the electron and phonon temperatures was taken into account. The tunneling probability for the case of bismuth telluride was calculated exactly. The thermopower, electrical conductivity, and Lorentz number for the tunnel barrier were calculated [18]. Then, the heat flux and

effective kinetic coefficients in nanograins were calculated. To study the temperature distribution of electrons and phonons, we used the electron and phonon energy balance equations and also the continuity equation for the electric current. *Additional phonon scattering.* When calculating the lattice thermal conductivity in the Debye model [19], we took into account phonon-phonon scattering, phonon scattering by impurities and isotopes, and also at nanograin boundaries. Calculations have shown that the scattering of phonons at the boundaries of nanograins with sizes of $\sim (10-20)$ nm in bulk nanostructures based on the Bi_2Te_3 solid solution can reduce the lattice thermal conductivity by (20-30) % compared to the initial material. *Energy filtering of charge carriers.* The presence of potential barriers between different elements of the nanostructure can lead to a strong energy dependence of the mean free path of carriers near the chemical potential level. Then, energy filtering can occur [13, 20, 21], i.e., carriers with energies above the Fermi energy will overcome the boundary between nanograins, practically without scattering. The table compares the various mechanisms for increasing the quality factor (Z).

Z increase mechanism	Implementation conditions	Possible Z increase
Additional phonon scattering	$L < (10-20)$ nm	(15-25)%
Tunneling of charge carriers	$L < (10-20)$ nm vacuum gap between nano grains $\sim (1-2)$ nm	ZT up to 3,0 -3,5
Energy filtering of charge carriers	$L < (20-30)$ nm The decrease in the electrical and thermal conductivity of the lattice is compensated	(20-40)%

It can be seen from the table that for the implementation of all three mechanisms for increasing the quality factor, small sizes of nanograins $\sim (10-20)$ nm are required. Technologically, it is quite difficult to create such a nanostructure; the reason is the increase in the size of the initial nanoparticles due to recrystallization. Thanks to this process, grain sizes exceed 100 nm. Some reduction in grain size (2-3 times) can be achieved in nanocomposites when nano-inclusions with a layered structure are added to the initial matrix [17], but the grain size still cannot reach the required value $L < (10-20)$ nm. The creation of a vacuum gap of $\sim (1-2)$ nm between grains for the implementation of the tunneling mechanism of increasing the quality factor and the corresponding elimination of phonon thermal conductivity is unlikely to be achieved by mechanical activation treatment followed by hot pressing. In addition, the study by electron microscopy did not reveal any gaps between nanograins, neither vacuum

nor oxide [15-17, 19]. However, the quantum point contacts we discovered (see Fig. 2-4) eliminate these problems; conditions arise for the realization of additional scattering of phonons at $L < 20$ nm.

CONCLUSION

The implementation of all the mechanisms listed in the table for increasing the quality factor in a nanothermoelectric based on a Bi_2Te_3 solid solution could lead to an increase in ZT to 3.5 at room temperature. If vacuum gaps between grains $\sim (1-2)$ nm cannot be created, but if a bulk nanostructure with grain sizes $\sim (10-20)$ nm is created, we can expect an increase in ZT to 1.5. We have so far implemented the conditions under which ZT reaches 1.1.

This work was supported by the Foundation for Science Development at the President of the Azerbaijan Republic- grant № EIF/MQM/ Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/16/1-M-01.

[1] Y. Okada, W. Zhou, D. Walkup, C. Dhital, S.D. Wilson, V. Madhavan. Ripple-modulated electronic structure of a 3D topological insulator. *Nature communications*, 3, [1158]. (2012). doi.org/10.1038/ncomms2150

[2] M.M. Fogler, S.V. Malinin, T. Nattermann. Coulomb Blockade and Transport in a Chain of One-Dimensional Quantum Dots. *Phys. Rev. Lett.* 2006, v. 97, №9, 096601 doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.096601

- [3] C.L. Kane, M.P.A. Fisher. Thermal Transport in a Luttinger Liquid. *Phys.Rev.Lett.* 1996, v.76, №17, p.3192-3195. doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.3192.
- [4] Ф.К. Алескеров, С.Ш. Кахраманов, К.Ш. Кахраманов. Сб. Межслоевые нанообразования в системе Bi_2Te_3 <Zn>. Термоэлектрики и их применения, С-П., 2010, с.247-252.
- [5] А.Н. Георгобиани, А.М. Пашаев, Б.Г. Тагиев, Ф.К. Алескеров, О.Б. Тагиев, К.Ш. Кахраманов. Процесс роста и самоорганизации нанофрагментов на межслоевых поверхностях кристаллов $A_2^V B_3^{VI}$ Неорг. материалы. 2011, Т.47, №12, с.1447-1452.
- [6] F.K. Aleskerov, K.Sh. Kahramanov, S.Sh. Kahramanov. Percolation Effect in Copper and Nickel_Doped Bi_2Te_3 Crystals. *Inorganic Materials*, 2012, Vol. 48, No. 5, pp. 456–461.
- [7] K.Sh. Gahrmanov, N.A. Abdullaev, S.Sh. Gahrmanov, Yu.A. Abdullaev, I.A. Mamedova, Kh.V. Aliguliyeva. Effect of Potassium Adsorption on the Surface Properties of Bi_2Se_3 and Bi_2Te_3 Crystals. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2022, Vol. 16, No. 2, pp. 288–293.
- [8] И.М. Лифшиц. О тепловых свойствах цепных и слоистых структур при низких температурах. *ЖЭТФ*. 1952. т. 22, Вып.4. с. 475 – 486.
- [9] Н.А. Абдуллаев, Р.А. Сулейманов, М.А. Алджанов, Л.Н. Алиева. О роли изгибных колебаний в процессах теплопереноса в слоистых кристаллах. *ФТТ*, 2002, Т.48, №4. с.1775-1779.
- [10] A. Kundu, A. Zazunov, A.L. Yeyati, T. Martin, R. Egger. Energy spectrum and broken spin-surface locking in topological insulator quantum dots. *Phys. Rev. B*, 2011, v.83, №12, 125429 doi.org/10.1103/PhysRevB.83.125429
- [11] Т.В. Меньшикова, С.В. Еремеев, Е.В. Чулков. О происхождении состояний двумерного электронного газа на поверхности топологических изоляторов, Письма в *ЖЭТФ*, 2011, Т.94, №2, с.110-115.
- [12] Shuichi Murakami, Ryuji Takahashi, O.A. Tretiakov, Ar. Abanov, Jairo Sinova. Thermoelectric transport of perfectly conducting channels in two- and three-dimensional topological insulators. *Journal of Physics: Conference Series* 334 (2011) 012013. doi 10.1088/1742-6596/334/1/012013
- [13] Л.П. Булат, Д.А. Пиенай - Северин, В.В. Каратаев, В.Б. Освенский. О пределе термоэлектрической добротности в объемных нанокристаллических структурах на основе теллурида висмута, Сб. *Термоэлектрики и их применения*, Санкт-Петербург, ноябрь, 2010, с.41-46.
- [14] M.S. Dresselhaus, G. Chen, M.Y. Tang, R.G. Yang, H. Lee, D.Z. Wang, Z.F. Ren, J.P. Fleurial, P. Gogna. New Directions for Low-Dimensional Thermoelectric Materials. *AdvancedMaterials*. 2007, V. 19, № 8, p. 1043–1053.
- [15] Poudel Bed, Hao Qing, Ma Yi, Lan Yucheng, Minnich Austin, Yu Bo, Yan Xiao, Wang Dezhi, Muto Andrew, Vashaee Daryoosh, Chen Xiaoyuan, Liu Junming, Dresselhaus Vildred S., Chen Gang, Ren Zhifeng. High-Thermoelectric Performance of Nanostructured Bismuth Antimony Telluride Bulk Alloys. *Science*, 2008. V. 320. №5876, p.634-638. doi:10.1126/science.1156446
- [16] L.P. Bulat, V.B. Osvenskiy, G.Ī. Pivovarov, A.A. Snarskii, E.V. Tatyatin, A.A.O. Tay. On the effective kinetic coefficients of thermoelectric nanocomposites. *Proceedings of 6th European Conference on Thermoelectrics*. Paris (France). July 2-4. 2008.-P.12-1 - 12-6.
- [17] L.P. Bulat, V.T. Bublik, I.A. Drabkin, V.V. Karataev, V.B. Osvenskiy, G.Ī. Pivovarov, D.A. Pshenai-Severin, E.V. Tatyatin, N.Yu. Tabachkova. Bulk Nanostructured Thermoelectrics Based on Bismuth Telluride. *Journal of Thermoelectricity*, 2009 №3, p.67.
- [18] L.P. Bulat, V.T. Bublik, I.A. Drabkin, V.V. Karataev, V.B. Osvenskii, Yu.N. Parkhomenko, G.Ī. Pivovarov, D.A. Pshenai-Severin, N.Yu. Tabachkova. Bulk Nanostructured Polycrystalline p-Bi-Sb-Te Thermoelectrics Obtained by Mechanical Activation Method with Hot Pressing, *Journal of Electronic Materials*, 2010, Volume 39, № 9, p.1650-1653.
- [19] L.P. Bulat, D.A. Pshenai-Severin. Effect of Tunneling on the Thermoelectric Efficiency of Bulk Nanostructured Materials, *Physics of the Solid State*, 2010. Vol.52, No. 3, pp.485–492,
- [20] B. Moyzhes, V. Nemchinsky. Thermoelectric figure of merit of metal–semiconductor barrier structure based on energy relaxation length. *Appl. Phys. Lett* 1998, V.73, p. 1895-1897. doi.org/10.1063/1.122318
- [21] A. Popescu, L.M. Woods, J. Martin, G.S. Noals. Model of transport properties of thermoelectric nanocomposite materials. *Phys. Rev. B*.79, 205302 (2009). doi.org/10.1103/PhysRevB.79.205302

NEW ROTATION ELECTRON-DIFFRACTION METHODS AND THEIR APPLICATIONS

M.G. KYAZUMOV*, S.M. RZAYEVA**, E.A. ISAYEVA*, L.V. RUSTAMOVA,
N.A. ALIYEVA

Institute of Physics Ministry of Science and Education of Azerbaijan. Baku, Az-1143

*Email: *eaisaeva@mail.ru, **rzayevasitare@gmail.com*

Electron diffraction patterns of the CdInGaS₄ and Mg_{0.7}Ga_{1.4}In_{0.8}S₄ single-crystal thin films were obtained by rotation around the normal to the plane of the crystal holder, which was a priori tilted relative to the position perpendicular to the incident electron beam. The thin single-crystal films in the first case was located on the surface of the crystal holder and in the second time was made a certain angle with it. For the second case, a diagram explaining the origin of some of the reflections positioned unconventionally (beyond the ellipse line) is presented. This scheme will help facilitate electron-diffraction studies of the crystal structures of other nano-samples in the case of their arbitrary orientation.

Keywords: New diffraction methods, Electron diffraction, Inorganic materials

PACS: 61.05.-a, 61.14.-x, 61.66.Fn.

INTRODUCTION

When shooting the stationary single-crystal films (SCF), only touching or projection of the site onto the Ewald plane (EP) can take place. When the crystal rotates, the EP passes through the entire volume occupied by each site of the reciprocal lattice (RL). If the rotation is uniformly and there is no superposition of reflections, the obtained information about the intensity of reflections in the electron diffraction patterns of rotation is right. In the proposed schemes, the angles of rotation (tilt) can be more than 70°. Therefore, it is especially important to study thin SCF by various electron diffraction methods of rotation.

When the single crystals films rotates around any axes (in particular, around the axis *a* of atomic lattice) lying in the film plane (FP) (before rotation, the electron beams fall perpendicularly on the FP), the site rows *hk* (*hk*=const, *l*-changes) of the reciprocal lattice are registered on the EP along lines perpendicular to the axis of rotation. Such electron diffraction patterns are imitated as electron diffraction patterns of needle like textures.

When the single crystals films rotate by an angle of $\omega=60^\circ$ around the normal to the plane of the crystal holder, which was a priori (before the exposure) tilted by an angle of $\varphi < 70^\circ$ relative to the position perpendicular to the incident electron beam, obtained electron diffraction patterns are imitated as electron diffraction patterns of lamellar oblique textures.

EXPERIMENTAL AND DISCUSSION OF THE RESULT

Thin SCF were obtained by peeling off a thick crystal with adhesive tape. The electron diffraction patterns were obtained on an EG-400 electron diffraction recorder at an accelerating voltage of $V=350$ kV.

Two cases were considered. The thin single-crystal films in first case are located on the surface of the crystal holder, and in the second case make a certain angle with it.

By tilting and rotating a thin SCF in various ways (thin SCF lies exactly on the plane of the crystal holder), we obtain an electron diffraction pattern of the type of lamellar oblique textures (Fig. 1a) and acicular textures (Fig. 1b) [1]. From the reflections *h00* we determine the value of the parameter *a* of the crystal lattice, and from the reflections *10l* the value of the parameter *c*. By the distribution of reflections *11l*, we determine the thickness of the package (layer, structural unit), and by the value of the second strong reflection (in this case, *116*) in this series, we establish the structural type [2].

The diffraction patterns were interpreted using the well-known formulas for electron diffraction patterns of oblique textures [3]:

$$d_{100} = (3/4)^{1/2}a = 2L\lambda h/2R_{h00}, \quad (1)$$

$$D_{hkl} = (R_{hkl}^2 - R_{hk0}^2)^{1/2}, \quad (2)$$

$$\Delta D = c^*L\lambda = (D_{hkl} - D_{hk(l-1)}), \quad (3)$$

$$d_{001} = c = 1/c^* = L\lambda/\Delta D. \quad (4)$$

Here, *L* is the distance from the sample to the photoplate; λ is the wavelength of incident electrons; *h*, *k*, and *l* are the Miller indices; *2R* are the distances between reflections on the electron diffraction pattern; *R_{hko}* are the minor axes of ellipses; *d_{hkl}* is the interplanar distance; *D_{hkl}* is the distance between sites *hkl* and the (*hk0*) plane of the reciprocal lattice on the *Lλ* scale at *h*, *k* = const; ΔD is the distance between adjacent sites along the *c** axis on the *Lλ* scale; and *c** is the reciprocal lattice parameter.

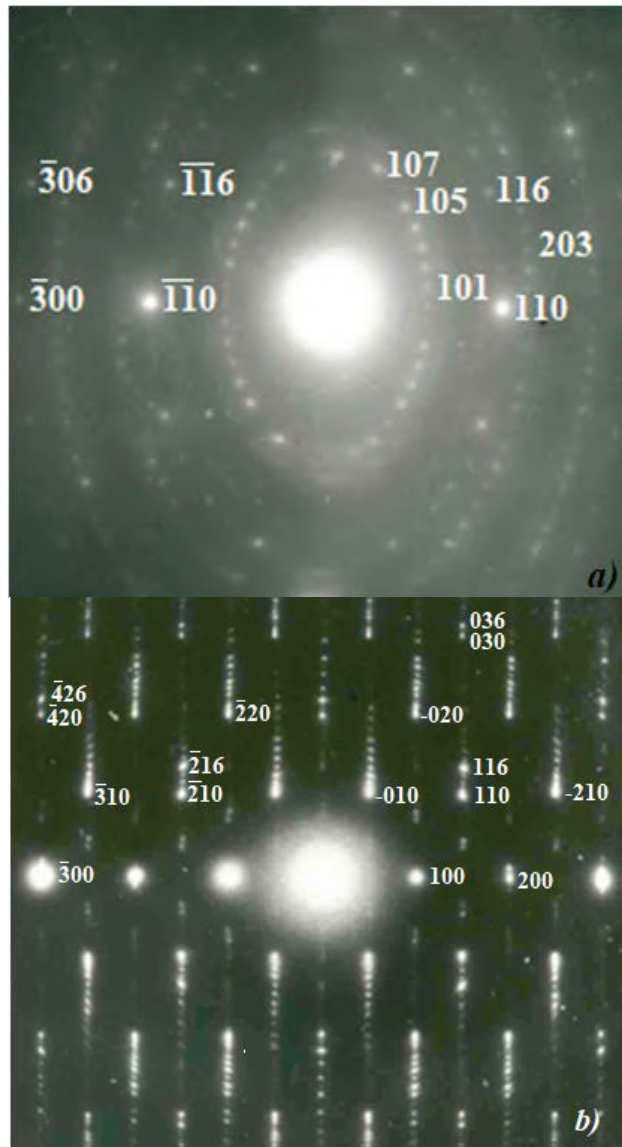
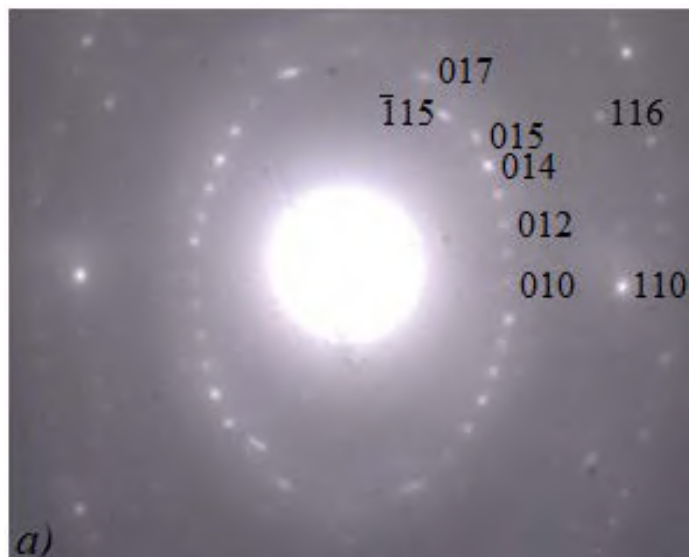


Fig. 1. Rotation electron diffraction pattern of the CdInGaS₄ single-crystal thin films: a) electron diffraction patterns imitating electron diffraction patterns of lamellar texture. b) electron diffraction patterns imitating electron diffraction patterns of acicular texture.



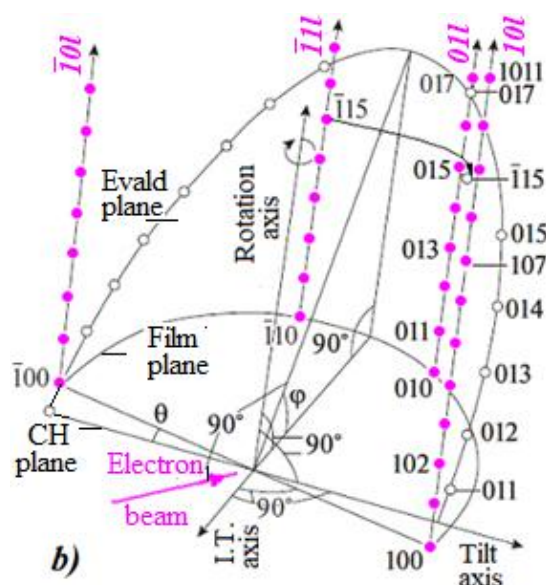


Fig. 2. 2H-polytype $\text{Mg}_{0.7}\text{Ga}_{1.4}\text{In}_{0.8}\text{S}_4$ ($\varphi = 35^\circ$, $\omega = 60^\circ$) single crystal: a) rotation electron diffraction pattern ($\varphi = 35^\circ$, $\omega = 60^\circ$) and b) scheme of rotation and detection of sites (and, consequently, reflections) of the reciprocal lattice in the Ewald plane. Red circles show reciprocal lattice sites located parallel to the $00l$ axis, open circles correspond to the $01l$ and l sites detected in the Ewald sphere cross section, I.T. is the axis of the initial tilt of the film relative to the plane of the crystal holder, and θ is the angle between the film and crystal holder planes.

For some reason, the TSCF does not lie on the plane of the crystal holder (CH), and we are unable to correct it. In such cases, after tilting the CH and rotating around an axis perpendicular to the CH plane, in the obtained electron diffraction pattern, some reflections are mixed from the line of ellipses. The electron diffraction patterns simulated lamellar textures were obtained for the $\text{Mg}_{0.7}\text{Ga}_{1.4}\text{In}_{0.8}\text{S}_4$ single-crystal thin films. In this case, the film makes certain angle θ with the crystal holder plane. The electron diffraction patterns were obtained by tilting the crystal holder by an angle of $\varphi = 35^\circ$ and subsequent rotation by an angle of $\omega = 60^\circ$ around the normal to the crystal holder plane (Fig. 2a). We give diagrams explaining such rotation and pointing (helping) to easy processing of the obtained electron diffraction patterns (Fig. 2b) [4]. The crystal lattice parameters determined from the electron diffraction pattern were $a = 3.80 \text{ \AA}$, $c = 24.39 \text{ \AA}$ and sp. gr. $P6_3mc$.

CONCLUSION

In the proposed schemes, the angles of inclination can be more than 70° . Consequently, the number of registered nodes will be much greater than in the case of Precession Electron Diffraction when the inclination angle is $\sim 3^\circ$.

Different site rows (series of reflections) come out separately, but when $a \ll c$ in the site rows hk ($h, k = \text{const}$, l -changes), reflections with small values of l are superimposed on each other, and the greater the distance of the site rows hk from the axis rotation, the more overlapping reflexes. How can these shortcomings be corrected?

By rotating the film around an axis perpendicular to the film plane (FP), it is possible to bring the studied site row hk closer to the rotation axis to such a distance that during rotation the individual reflections will take place.

In addition, with such rotations during exposure to the EP, different RL planes are recorded in turn. Thus, secondary electron diffraction can strongly affect the intensities of all sites of an individual plane of reciprocal lattice.

When the SCF rotates around not the coordinate axes, but the axes lying in the coordinate plane of reciprocal lattice, there is no superposition of reflections with large values of l on the obtained electron diffraction patterns. In addition, during such a rotation, only a few reflections are simultaneously recorded on the EP. Obviously, the kinematic scattering dominates in this situation.

Electron diffraction patterns of the CdInGaS_4 and $\text{Mg}_{0.7}\text{Ga}_{1.4}\text{In}_{0.8}\text{S}_4$ single-crystal thin films were obtained by rotation by an angle of $\omega = 60^\circ$ around the normal to the plane of the crystal holder, which was a priori (before the exposure) tilted by an angle of $\varphi < 70^\circ$ relative to the position perpendicular to the incident electron beam. Two cases were considered. The single-crystal films of the first compound are located on the surface of the crystal holder, and the film of the second compound makes a certain angle with it. For second case, a diagram explaining the origin of some of the reflections positioned unconventionally (beyond the ellipse line) is presented. This diagram can be used in further electron diffraction study of the structure of nanoobjects oriented arbitrarily on a crystal holder

- [1] *M.G. Kyazumov*. New schemes for recording electron diffraction patterns of hexagonal and monoclinic crystals. *Crystallography Reports* 2014, vol.59, №4, pp.486–492.
- [2] *M.G. Kyazumov*. Peculiar reflections in diffraction patterns as indicators of structural type and quality. *Crystallography Reports* 2014, vol. 59, №5, pp.705–712.
- [3] *B.B. Zvyagin*. *Electron Diffraction and Structural Crystallography of Clay Minerals*. Nauka, Moscow, 1964.312pp. (in Russian).
- [4] *M.G. Kyazumov, S.M. Rzayeva, A.S. Avilov*. Study of Polytype Crystals CdInAlS_4 , $\text{Fe}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{InS}_3$ and $\text{Mg}_{0.7}\text{Ga}_{1.4}\text{In}_{0.8}\text{S}_4$ Using Rotation Electron Diffraction Patterns. *Crystallography Reports*, Vol. 67, № 6, 2022, pp. 900–905.

THE FORMATION OF In AND Sn SMALL-SIZED NARROW STRIPS BY MEANS OF LIQUID METAL ION SOURCE TECHNIQUE

F.E. MAMMEDOV, E.A. IBRAHIMOVA, E.M. AKBEROV, I.I. GURBANOV,
G.H. MAMMEDOVA, S.A. ALIYEV

Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan, The Institute of Physics.

H. Javid Ave. 131, Baku, Azerbaijan

E-mail: sabir.aliyev.1950@mail.ru

gultekin@myself.com

In this paper the processes of applying the nanodroplet phase from a sharp emitter to a nearby moving surface by means of a finely dispersed phase of a liquid metal ion source (LMIS) using In and Sn as metal source and both tungsten and copper plates as a substrate are considered. To apply narrow strips, the emitting needle was located at a close distance from the moving surface. At a needle-surface distance of the order of 80 μm , massive continuous tracks a few microns wide were obtained on the axis of a wide and thin trace of ions (In^+ , Sn^+). The structure of the deposited strips with a length of more than 10 mm is granular. As the needle approaches the surface further, the track melts due to the high density of the ion current, and the inhomogeneous profile of its cross section is smoothed out. For the deposition of narrower structures, efficient cooling of the conductive movable substrate is required.

Keywords: liquid metal ion source, LMIS, field emission, nanoparticle, ion beam.

PACS: 29.26.Ni; 79.20.Rf

1. INTRODUCTION

For the creation of various surface structures, the method of depositing of nanodroplets on a conducting surface is very promising. For this, liquid metal ion sources with an emitter tip are used. Point emitters have the highest current density, a very small emission zone and the ability to generate charged drops of the working substance with nanometer dimensions. The possibility of focusing the resulting beams to submicron sizes is used in microtechnologies, and the generation of nanoparticles of various compositions is of great interest for the production of thin films and nanotechnologies. In liquid metal ion sources, along with the field emission of ions, under certain conditions, the generation of charged drops occurs [1, 3]. If the ion beam divergence angle reaches 90° , then the droplet flow divergence is $(3-4)^\circ$ [2]. The size of the ion emission zone is about 5 nm, which determines the high initial density of the ion current and the small size of the generated droplets.

The histogram of the size of the deposited particles is a sharply decreasing exponential function in the range of (2-40) nm [2]. The number of small particles exceeds the number of the largest ones by 3 orders of magnitude. Individual droplets with a size of about 100 nm are observed. It should be added that the generation of nanoparticles occurs in a threshold manner and is accompanied by oscillations of the ion current with a frequency of tens of MHz. The reason for the oscillations is the excitation of capillary instability on the surface of a liquid emitter [5].

The recorded particle sizes determine the possibility of the formation of small-sized structures on the surface through the dispersed phase of the source, which was the subject of this study.

2. EXPERIMENTAL

In order to receive a beam of ions from liquid-metal ion sources, the needle must be wetted with a working substance. For this purpose, we have prepared a container-type structure from graphite. The needle and the working substance are placed in a closed volume inside the container, which minimizes the evaporation of the active substance. The container is made as small as possible to reduce the energy consumption required when heating the working substance to the melting temperature. Needles with tip sizes of several micrometers can be made from various materials (W, Ni, Fe, etc.) by chemical etching or mechanical methods. Thus container-type liquid metal source was used, by means of which could be obtain beams of In, Sn, Au, Ni, Ge, B ions.

Material for a refractory needle was selected for each working substance in order to reliably wet its surface. A graphite container with a needle and a working substance was heated from the back by electron bombardment to the melting temperature of the working substance. To achieve the emission of ions, an extractor was used, located at a distance of 1 mm from the needle with a voltage of several kilovolts. At an ion current of about 40 μA (In, Sn), its oscillations occur with a frequency of tens of MHz, simultaneously charged nanoparticles are generated [5,7]. If necessary, the composition of the beam was determined using a mass analyzer with crossed electromagnetic fields such as a Wien velocity filter [6]. Taking into account the low divergence of the nanoparticle beam, narrow trajectories can be obtained with horizontal displacement of the substrate located at a close distance from the needle. That is, complex ion optics is not used in this case. As a conductive substrate, polished plates of copper, tungsten, molybdenum, and silicon were used. For precise movement of the substrate in three

coordinates, a piezoelectric table of the PZU 2300 brand was used, controlled by a computer, which allowed vertical movement of up to 300 μm with an accuracy of 1 nm and horizontal movement of up to 100 mm (Fig. 1, b). The speed of horizontal movement varied within 0.5–2 mm/s. The piezotable was placed in a vacuum chamber and showed reliable operation at a residual pressure of $p \lesssim 10^{-5}$ Torr. The system was mounted on the basis of the A-700 Q Leybold-Heraeus vacuum unit with turbomolecular pumping. The deposited strips were analyzed using optical, scanning electron and atomic force microscopes.

3. RESULTS AND DISCUSSION

It is known that at low ion currents the radiation of liquid metal sources is stable. At a certain threshold current (about 40 μA) high-frequency oscillations are excited in the beam, which are accompanied by the generation of nanodroplets of size (2–20) nm and with specific charge $\frac{q}{m} = 5 \cdot 10^4 \frac{C}{kg}$ (In, Sn) [6]. The oscillations of the beam current are caused by the development of capillary instability on the surface of the Taylor cone which consists of a system of standing waves.

The ion energy spectra were determined using a velocity filter (Wien filter) with crossed static electromagnetic fields. Ions are emitted from a small spot on the top of the Taylor cone. The divergence angle of the ion beam reaches 90°. At a sufficient value of the electric field intensity the separation of nanodroplets occurs from the upper part of the cone. In the ion current stream, the divergence angle is approximately (2–3)°.

It was established in experiments that, due to excitation instability in the emitter, the ion current density in the center of the beam is slightly lower compared to its periphery. The ion energy spectra, which were repeatedly reproduced while maintaining the experimental conditions, were recorded in the center of the beam (Fig.1, a) and outside its axis (Fig. 1, b). The latter were obtained by moving the mass analyzer along the beam axis. The spectra were obtained in two modes: in the absence of nanodroplet generation (curve 1, $I_b = 30 \mu A$, $U_b = 6 kV$) and during their generation (curve 2, $I_b = 50 \mu A$, $U_b = 6,2 kV$). Ions with an energy of 6 keV correspond to an electric field intensity in the analyzer of about 140.5 V/cm. It should be noted that the input slit of the analyzer was achieved with the calculated value of the potential change between the plates.

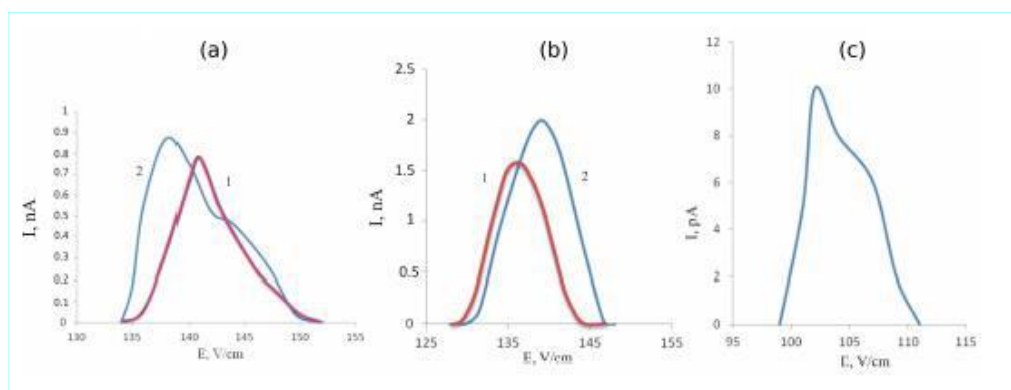


Fig. 1. Ion current through the filter of velocities as function an electric field intensity for In_1^+ (curve 1: $I_b = 30 \mu A$, $U = 6 kV$; curve 2: $I_b = 50 \mu A$, $U = 6,2 kV$) (a) in the beam center, and (b) outside the beam axis. Ion current for In_2^+ $I_b = 50 \mu A$, $U = 6,2 kV$, in the beam center (c)

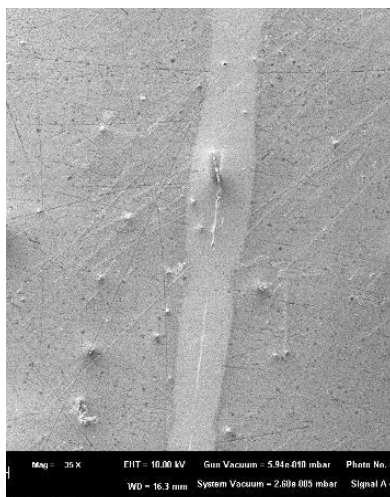


Fig.2 SEM - image of the indium band on tungsten plate surface.

The position of the analyzer did not change further when registering nanodroplets. The energy spectrum of a diatomic ion In_2^+ was also recorded in the nanodroplet generation mode (Fig. 1, c), when generating nanodroplets the maximum of the spectrum in the center of the beam is shifted toward lower energies (250 eV), but off-axis it is shifted toward higher energies. The latter shows that in order to increase the beam current, the extractor voltage must be increased.

In the usual extraction of ions by means of an extractor (needle-extractor distance (0.5 - 1 mm)), the emission threshold voltage is (5 ÷ 6) kV. When the extractor was replaced with a flat substrate and the needle approached, the emission voltage decreased markedly.

Fig. 2 shows a strip of indium ions and nanoparticles deposited on a tungsten plate. The extraction voltage was 4.5 kV, the needle-plate distance was ~ 200 μm .

The strip has a width of about 200 μm , and it is determined by the diameter of the ion beam. A narrow path is clearly visible in the middle of the strip due to the deposition of nanodroplets. The width of this path is about 20 μm (Fig. 3, a), the central region is significantly elevated compared to neighboring

regions, and it has a coarse-grained structure (Fig. 3, b). The characteristic diameter of elongated grains is (50-60) nm, and the length is (100-200) nm. These sizes significantly exceed the sizes of generated nanodroplets [8,9]. Apparently, due to the high density of the ion current, the substrate heats up significantly, the deposited particles do not have time to condense, which leads to their coagulation and the formation of large grains. The calculation shows that at a distance of 10 cm from the needle, the ion current density is about 10 A/cm^2 , and the beam power is $3 \cdot 10^4 \text{ W}/\text{cm}^2$. In order for the nanodroplets to condense without adhering to each other, effective dissipation of energy from the substrate is necessary.

Further approaching the needle to surface leads to smoothing of the transverse profile of the applied strip: it becomes more uniform (Fig. 4, a). It is likely that the deposited substance is now heated almost to its melting point, and the axial massive path does not condense. The structure of the strip is no longer granular, but in it the dispersed phase is evenly distributed (Fig. 4, b). Large particles with a size of several microns are easily distinguishable, but, apparently, the number of small particles significantly exceeds the number of large ones.

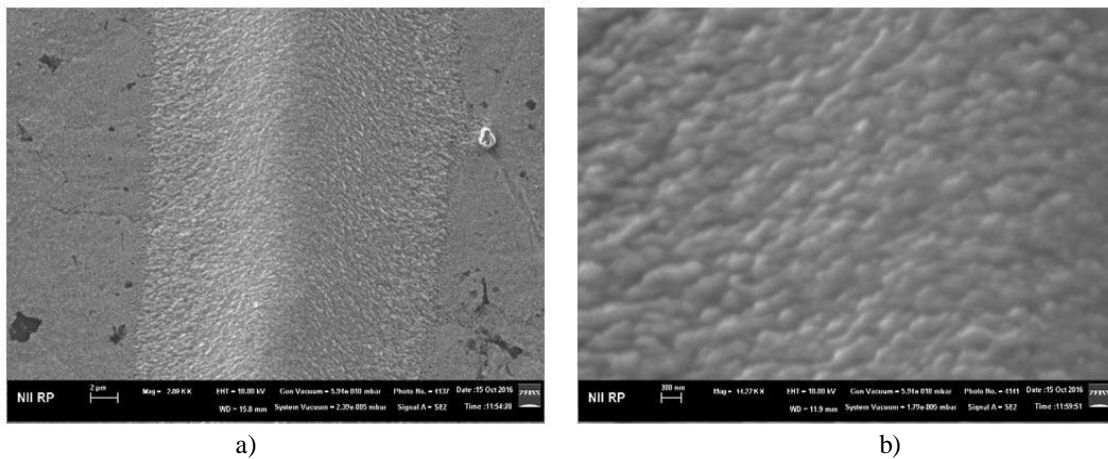


Fig. 3. a) SEM image of a trace of deposited nanoparticles, b) trace structure.

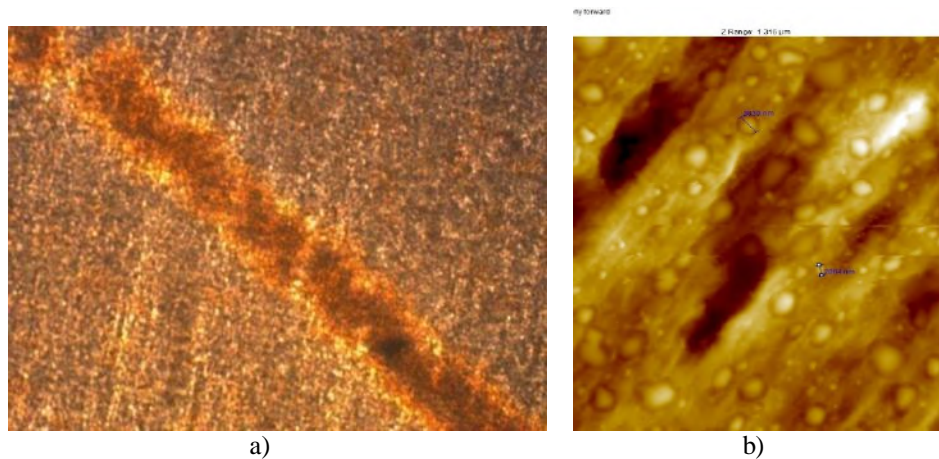


Fig. 4. a) AFM image of the indium band on the surface of the molybdenum plate. The needle-plate distance is 50 μm , $U = 3.5 \text{ kV}$ b) Dispersed strip structure.

4. CONCLUSION

When a finely dispersed phase of the liquid metal source is deposited on a nearby uncooled surface, long In and Sn strips several micrometers wide are formed. The strip structure is due to submicron sizes particles. There are no complex elements of ion-optical devices

in the system. Proper cooling of the substrate allows the formation of narrower surface structures of practical interest. If the tracks are deposited on an efficiently cooled thin metal film, then, if necessary, it can be removed by etching. This method can be used in microelectronics to perform various technological operations.

-
- [1] V.V. *Badan*, I.S. *Gasanov*, The finely dispersed phase and instability of the emission of liquid metal ion sources. JETP Letters, v.15, r.17, 1989. p. 49-52.
- [2] I.S. *Gasanov*, I.I. *Gurbanov*, Formation of charged nanoparticles at capillary instability of the liquid emitter. JJAP, 47, No. 10, 2008. p. 8226-8229.
- [3] P.A. *Mazharov*, V.G. *Dudnikov*, A.B. *Tolstoguzov*. Electrohydrodynamic sources of ion beams. UFN, V.190, No.12, 2020. pp.1293-1333.
- [4] Handbook of Charged Particle Optics. Edited by J. Orloff (CRC Press, London, New York), 2009. p. 665.
- [5] V.E. *Badan*, V.V. *Vladimirov*, V.P. *Gorshkov*, I.A. *Soloshenko*. Instability of Rayleigh and Faraday in liquid metal ion sources. Drop emission and the phenomenon of mikrodroplet chaos. Letters to Journal of Theoretical Physics, V.63, 1993. No.6, p.47-65.
- [6] I.S. *Gasanov*, I.I. *Gurbanov*. Nanostructure operations by means of the liquid metal ion sources. Rev. Sci. Instr. 83, 2012, 02B906.
- [7] I.S. *Gasanov*, I.I. *Gurbanov* and E.M. *Akbarov*, Losses of ion energy in the multicomponent beam. Eur. Phys. J. D, (2015). DOI: 10.1140/epjd/e2015-50531-0
- [8] I.S. *Gasanov*, I.I. *Gurbanov* and E.M. *Akbarov*. Ions Passage Through Nanodroplets in Multicomponent Beam. ACTA Physica Polonica A, 134, No. 1, 2018. p. 119-121. DOI: [10.12693/APhysPolA.134.119](https://doi.org/10.12693/APhysPolA.134.119)
- [9] C. *Akhmedeliyev*, L. *Bischoff*, G.L.R. *Mair*, C.J. *Aidinis* and Th. *Ganetsos*, Investigation of emission stabilities of liquid metal ion sources. Microelectron. Eng. 2006. 73-74, p. 120-125.

DEPENDENCE OF THE DIELECTRIC PROPERTIES OF THE Al-TiW-PtSi/n-Si SCHOTTKY DIODE ON THE ALTERNATING SIGNAL

IZZAT AFANDIYEVA

Baku State University, Institute for Physics Problem,

AZ 1148 Baku , Azerbaijan

E-mail: afandiyeva@mail.ru

Dielectric properties and the dissipate of power in a Al-TiW-PtSi/n-Si Schottky barrier diode in the amplitude of ac-signal (V_{ac}) range of 5mV–1V (500kHz) and voltage range of (-2 V) to (4 V) have been investigated at the room temperature in detail by using experimental $C-V$ and $G-V$ measurements. Experimental results show that the values of ϵ' , ϵ'' and $\tan\delta$ at (V_{ac}) = 200 mV have sharp peak. For other values of V_{ac} , the dependence on the amplitude of the test signal is practically not observed. It can be concluded that, at certain values, the amplitude of the ac-signal can significantly affect the interfacial polarization even at high frequencies. The power dissipated in the dielectric (i.e., dielectric losses) increases sharply with increasing ac-signal amplitude.

Keywords: Silicide–silicon contact, PtSi/n-Si Schottky diodes, Dielectric properties, dielectric loss, power dissipated.

PACS: 73.30.+y, 73.40.Qv, 73.40.Ns

1. INTRODUCTION

At the choosing the object of study, the advantages of Schottky barrier diodes (SBD) in comparison with p-n junctions were taken into account: simple technology, a wide choice of contacting materials [1-3]. Schottky diodes on the basis silicide-silicium contact attract wide attention of researchers due to high temperature stability. On the other hand, the silicide-silicon interface shifts deeper into the semiconductor, which affects the electrical and dielectric properties of this structure.

The purpose of our research is due to several reasons. First, the investigated diodes have small geometric dimensions ($\sim 10^{-6}\text{cm}^2$) and are equipped with a diffusion barrier (the amorphous TiW alloy). Second, previous studies of these diodes revealed the presence of self-organized spots [4]. Third, the influence of the temperature and frequency of the test signal on the dielectric parameters of the PtSi/n-Si diodes was studied early [5]. At the same time there is no information in the scientific literature about the study of the influence of the amplitude of an alternating signal on the power dissipated in a PtSi/n-Si Schottky diodes.

2. MATERIALS AND METHODS

As a semiconductor wafer was chosen a single crystal of n-type silicon (P doped) with diameter of 3 inches, a resistivity of 0,7 $\Omega\cdot\text{cm}$ and a thickness of 3,5 μm . Silicide film has been fabricated by the magnetron-sputtering method [4,5]. Between Al and PtSi was deposited TiW alloy as diffusion barrier. Area of investigated barrier structure was $8\times 10^{-6}\text{cm}^2$. Investigation of Schottky barrier diode (SBD) were carried out at room temperature and sinusoidal test signal (500 kHz) using an HP 4192A LF impedance analyzer. The signal amplitude of which varied from 5

mV to 1V was applied to the sample from an external pulse generator.

3. RESULTS AND DISCUSSION

In the present paper by the using impedans spectroscopy method was investigated the influence of amplitude of ac-signal on dielectric loss of Al-TiW-PtSi/n-Si SBD. The dependence of the real and imaginary parts of dielectric constants (ϵ' , ϵ'') values of Al-TiW-PtSi/n-Si (SBD) on voltage and amplitude of ac-signal (V_{ac}) were obtained in the wide range of amplitude (from 5 mV to $1\times 10^3\text{mV}$) and voltage (-2÷4V) using C and G/ω data at room temperature for the sample №8 ($A=8\times 10^{-6}\text{cm}^2$).

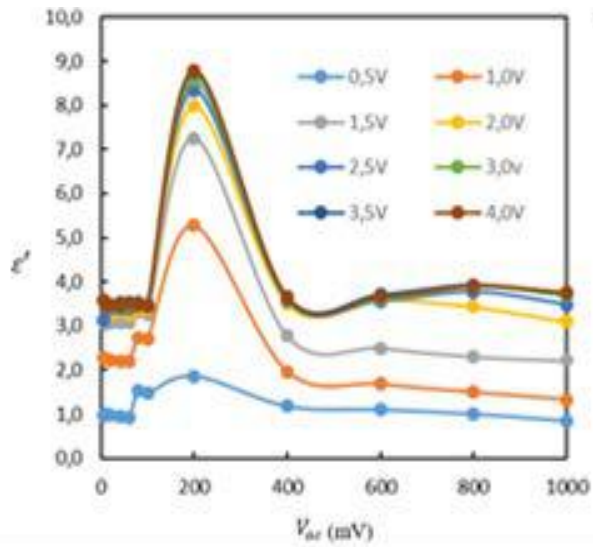
To describe the electrical and dielectric properties of the studied Al-TiW-PtSi/n-Si SBD, to separate the bulk and the surface phenomena of the material the formalism of the complex permittivity was applied [6]

$$\epsilon^* = \epsilon' - i\epsilon'' ,$$

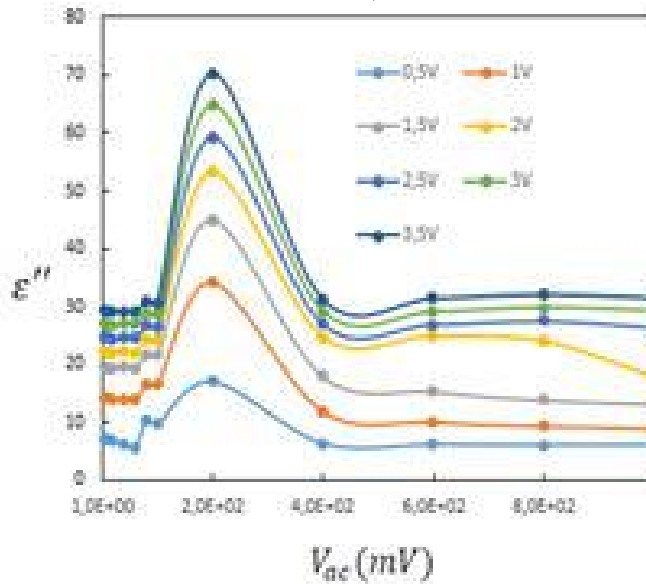
where real (ϵ') and imaginary parts (ϵ'') of complex permittivity, i is the imaginary root of -1 . At different value of (V_{ac}) parameters was calculated using the measured capacitance C and conductance G values from the expression

$$\epsilon' = \frac{C}{C_0} = \frac{Cd_i}{\epsilon_0 A}; \quad \epsilon'' = \frac{Gd_i}{\epsilon_0 \omega A}; \quad \tan\delta = \frac{\epsilon''}{\epsilon'}$$

where C_0 is the capacitance of an empty capacitor, d_i is the thickness of the dielectric gap, A is the rectifier contact area of the structure ($A=8\times 10^{-6}\text{cm}^2$) and ϵ_0 is the permittivity of free space charge ($\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-14}\text{F/cm}$) (Fig.1,2).



a)



b)

Fig.1. The dependence of ϵ' (a) and ϵ'' (b) on V_{ac} of Al-TiW-PtSi/n-Si SD for various applied voltage.

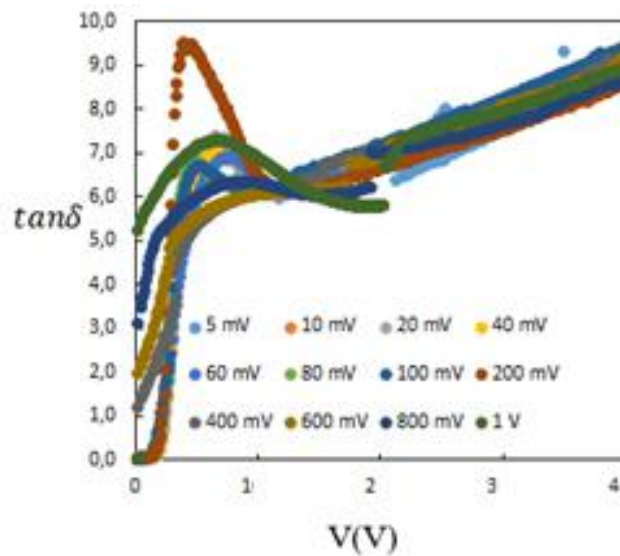


Fig. 2. The dependence of $\tan\delta$ on V Al-TiW-PtSi/n-Si SD for various V_{ac}

Fig.1a,b) and Fig.2 shows the $\epsilon' - V$, $\epsilon''-V$ and $\tan\delta-V$ dependences for Al-TiW-PtSi/n-Si SBD when amplitude of ac-signal (V_{ac}) changed from 5mV to 1V at frequency 500kHz, respectively.

Can be noticed that the values of ϵ' increase with increasing voltage, then reaches a constant value. At the same time, the dependence $\epsilon' - V$ is distinguished by a sharp increase in ϵ' at the amplitude of the ac signal $V_{ac}=200$ mV, although the nature of the dependence is preserved. A sharp peak at 200mV can be attributed to the increasing of polarization. Dependence $\epsilon''-V_{ac}$, characterizing the density of conduction currents, also takes a maximum value at $V_{ac}=200$ mV. The $\tan\delta - V$ characteristics have cutting peak only at $V_{ac}=200$ mV. It is well known that the peak behavior of the ϵ'' and $\tan\delta$ depend on a number of parameters such as doping concentration, interface state density, series resistance of diode and etc. In addition, the capacitance and conductance are extremely sensitive to the interface properties and series resistance. This occurs because of the interface states that respond differently to test ac-signal. The change of parameters can be attributed to Maxwell-Wagner type interfacial polarization, i.e. charge carries accumulate at the boundaries of less

conducting regions, thereby creating interfacial polarization.

It should be noted that dielectric losses determine the dissipate of power in a dielectric. This parameter determined by the amplitude of ac-signal (V_{ac}) [7-9]. According to the theory active power of dielectric losses for device with parallel equivalent circuit (Schottky diodes) described as

$$P = V_{ac}^2 \omega C \tan\delta$$

Thus, the dielectric losses are proportional to the square of the effective value V_{ac} , $\tan\delta$, the frequency and the capacitance of the capacitor. The dependence of the P of Al-TiW-PtSi/n-Si SBD on amplitude of V_{ac} at different voltage are presented in Fig. 9. As can be seen from the figure, the power dissipated in the dielectric (i.e., dielectric losses) increases sharply with increasing ac-signal amplitude. In addition, one can notice the appearance of a small peak at 200 mV. The obtained dependence of the active power of dielectric losses on the amplitude ac-signal is characteristic of an inhomogeneous structure consisting of regions with different resistivity. This structure is identical to the Maxwell-Wagner two-layer dielectric [10].

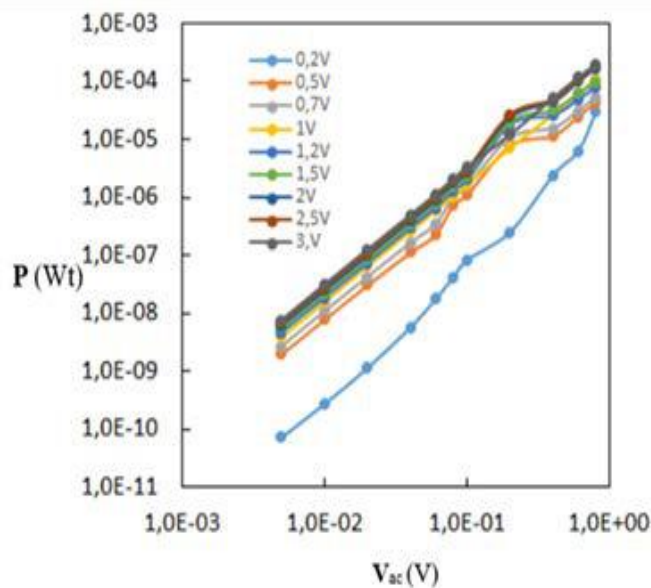


Fig. 3. The dependence of the active power of dielectric losses (P) in the Al-TiW-PtSi/n-Si SBD on the amplitude of ac-signal V_{ac}

In our previous article has been revealed the existence of selfassembled patches similar the quantum wells. These patches formed due to the process of PtSi formation on semiconductor and the presence of hexagonal voids of Si(111).

In such structure, patches play the role of macrorelaxators. It is known that relaxation phenomena are associated with the recharging of surface states [11]. The features of the obtained amplitude dependences indicate that the dissipation power at 200 mV is related to the maximum density of surface states

4. CONCLUSION

By the using of impedance spectroscopy for Al-TiW-PtSi/n-Si SBD were investigated ϵ' , ϵ'' and $\tan\delta$ for various ac-signal amplitudes (V_{ac}) in the range from 5×10^{-3} V to 1 V at room temperature versus applied voltage from - 2 to 4 V and frequency 500 kHz. Based on the obtained characteristics, the dependences of the dielectric constant on the dc-voltage and amplitude of ac-signal have been calculated. All characteristics shows that parameters only at $V_{ac}=200$ mV a sharp increase in values. The dependence of the power dissipation (dielectric losses)

revealed a strong dependence on the amplitude of the ac-signal. Comparison of the results revealed a local

heterogeneous structure of contacts according to the Maxwell-Wagner type.

-
- [1] *B. Pellegrini*. Current-voltage characteristics of silicon metallic silicide interfaces. *Solid State Electron*, 1975, 18(5): 417 [1].
- [2] *S.P. Murarka*. Silicides for VLSI application. New York: Academic Press, 1983 [2].
- [3] *S.M. Sze*. Physics of semiconductor devices. New York: John Wiley and Sons, 1981.
- [4] *J.S. Kwak, K.M. Kang, M.J. Park et al.* Improved thermal stability of GaN-based flip-chip light-emitting diodes with TiW-based diffusion barrier. *Sci Adv Mater*, 2014, 6(10): 2249.
- [5] *I.M. Afandiyeva, M.M. Bülbül, S. Altındal, S. Bengi*. Frequency dependent dielectric properties and electrical conductivity of platinum silicide/Si contact structures with diffusion barrier/*Microelectronic Engineering* 93 (2012) p.50–55.
- [6] *Irmak Karaduman Er, Ali Orkun Çağırtekin, Murat Artuç, Selim Acar*. Synthesis of Al/HfO₂/p-Si Schottky diodes and the investigation of their electrical and dielectric properties. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* vol. 32, p.1677–1690 (2021).
- [7] *Kotnik Tadej, Miklavcic Damijan*. Theoretical evaluation of the distributed power dissipation in biological cells exposed to electric field/ July 2000/ *Bioelectromagnetics* 21(5):385-394/DOI: 10.1002/1521-186X(200007)21:53.3.CO;2-6
- [8] *H.J. Yeh*. Radio frequency (RF)/dielectric welding of medical plastics, *Joining and Assembly of Medical Materials and Devices*, 2013
- [9] *Rajneesh Talwar, Ashoke Kumar Chatterjee*. Estimation of power dissipation of a 4H-SiC Schottky barrier diode with a linearly graded doping profile in the drift region/ 2009, *Maejo International Journal of Science and Technology* 3(3):352-365
- [10] *A. Chelkowski*. Dielectric Physics, Elsevier, Amsterdam, 1980.
- [11] *I.M. Afandiyeva, Ş. Altındal, L.K. Abdullayeva, and A. İ. Bayramova*. Self-assembled patches in PtSi/n-Si (111) diodes// *Journal of Semiconductors* May 2018/ Vol. 39, No. 5, 054002 -1-7.

CURRENT OSCILLATIONS IN IMPURITY SEMICONDUCTORS IN EXTERNAL ELECTRIC AND WEAK MAGNETIC FIELDS ($\mu_{\pm}H \ll C$)

ESMIRA O. MANSUROVA

*Institute of Physics Ministry of Science and Education of Azerbaijan, AZ 1143,
Baku, H. Javid Ave., 131*

It is theoretically shown for the first time that in an external electric and weak magnetic fields, when there is a temperature gradient, an impurity semiconductor radiates energy from itself with a certain frequency. The values of the frequency of current oscillations and the limit of change of the external electric field are found. It is shown that the resistance in the medium has only ohmic character. It is stated that in the above semiconductor, when the concentration of electrons and holes are determined from the obtained expression in theory, the injection of contacts plays a major role for the appearance of the indicated current oscillation in the circuit.

Keywords: Theoretical, electric and weak magnetic fields, temperature gradient, semiconductor energy.

PACS: 42.70.Nq, 78.20.Ci, 72.20.Ht, 72.80

INTRODUCTION

In conducting media under the influence of an external electric field, charge carriers receive additional energy of the order of eEl from the electric field (e is the elementary charge, E is the electric field strength, l is the mean free path of charge carriers). In this case, charge carriers have an energy of the order of $\frac{3}{2}k_0T + eEl$ (k_0 is the Boltzmann constant, T is the lattice temperature) and the redistribution of charge carriers over the medium occurs in an uneven manner. This redistribution of charge propagates as a wave inside the medium. These waves can be unstable, and therefore energy radiation begins from the crystal. The mechanism and cause of the appearance of unstable waves in different conducting media are different. Therefore, the theoretical study of unstable states requires different mathematical approaches. If the excited wave inside the medium does not go outside (ie, there is no current oscillation in the external medium), then the frequency of this wave is a complex value, and the wave vector is a real value. In the opposite case (ie, frequency $\omega = \omega_0$, wave vector $k = k_0 + ik'$), current fluctuations occur in the external circuit and the medium radiates energy with frequency ω_0 .

In [1-6], we theoretically studied various instabilities in semiconductor media and obtained some analytical formulas for an external electric field and for the current oscillation frequency. However, in impurity semiconductors, the excitation of unstable waves depends on many factors due to the presence of various impurity centers in the medium. Impurity centers, depending on the charge states, are capable of capturing (recombination) or emitting (generation) charge carriers. These recombination and generation processes can excite unstable waves inside the medium.

Gold atoms in germanium, in addition to the neutral state, can be singly, doubly, and triply negatively charged centers. These impurity levels are

located at different distances from the conduction band of the semiconductor. Depending on the temperature of the semiconductor, these energy levels are more or less active levels. In the experimental work [7], singly and doubly negative levels were active. In what follows, we will use the experimental model [7]. It is clear that there is a Coulomb barrier around the negative charge. Electrons that have received energy from an external electric field can overcome this Coulomb barrier and be captured. As a result of thermal transfer, electrons can escape from the impurity center into the conduction bands. Due to the capture of electrons by impurity centers from the valence band, the number of holes increases. As a result of recombination and generation of electrons and holes, the electrical conductivity of the semiconductor changes. In [1-6], analyzes of kinetic equations in a semiconductor with singly and doubly negatively charged centers are presented in detail. These papers present the results of a theoretical study of internal and external instability. However, the equilibrium values of the electron and hole concentrations were arbitrary.

In this theoretical work, we will investigate current oscillations (i.e., external instability) in semiconductors with singly and doubly negative impurity centers in an external electric field E_0 - in the presence of weak magnetic fields (i.e., $\mu_{\pm}H_0 \ll c$, μ_{\pm} - are the mobility of holes and electrons, c is the speed of light). Taking into account the injection at the contacts of the semiconductor, when the concentrations of electrons η_- and holes η_+ are determined from the relation $\eta_+\mu_- = \eta_-\mu_+$. In addition to the above conditions, the semiconductor has a constant temperature gradient $\Delta T = \text{const}$.

BASIC EQUATIONS OF THE PROBLEM

The kinetic equations for electrons and holes in semiconductors by the above impurity centers have the form [1-7].

$$\frac{\partial \eta'_-}{\partial t} + \text{div} j'_- = v_- \eta'_- - \frac{v'_-}{v_- i \omega} \left[v_+ \eta'_+ + v_- \eta'_- + (v_+^E \eta_+ \beta_+^\gamma + v_- \eta_- \beta_-^\gamma) \frac{e(\mu_+ \eta'_+ + \mu \eta'_-)}{\sigma + \sigma_1} \right] + v_- \eta_- \beta_-^\gamma \frac{e(\mu_+ \eta'_+ + \mu \eta'_-)}{\sigma + \sigma_1} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta'_+}{\partial t} + \text{div} j'_+ = -v_+ \eta'_+ + \frac{v'_+}{v_- i \omega} \left[v_+ \eta'_+ + v_- \eta'_- + (v_+^E \eta_+ \beta_+^\gamma + v_- \eta_- \beta_-^\gamma) \frac{e(\mu_+ \eta'_+ + \mu \eta'_-)}{\sigma + \sigma_1} \right] - v_+^E \eta_+ \beta_+^\gamma \frac{e(\mu_+ \eta'_+ + \mu \eta'_-)}{\sigma + \sigma_1} \quad (2)$$

$$\beta_\pm = 2 \frac{d \ln \mu_\pm}{d \ln(E_0^2)}, \vec{v}_\pm = \mu_\pm \vec{E}_0, \beta_\pm^\gamma = 2 \frac{d \ln \gamma_\pm}{d \ln(E_0^2)}; \eta'_\pm \ll \eta_\pm^0, E' \ll E_0, T \ll e E_0 l$$

$T = k_0 T_0$, T_0 - grating temperature, l - mean free path. $v_- = \gamma_-(E_0) N_0$ - electron capture frequency, $v_+ = \gamma_+(E_0) N_0$ - hole capture frequency, $v_+^E = \gamma_+(E_0) N_0$ - hole emission frequency, $\eta_- = \frac{\eta_-^0 N_0}{N_-}$, $\eta_+ = \frac{\eta_+^0 N_0}{N_+}$, $N_0 = N_+ N_-$ total concentration of impurities, N_- singly negatively charged centers, N_+ doubly negatively charged centers, $N \gg N_-$, $\sigma = \sigma_+ + \sigma_- = e(\eta_+ \mu_+ + \eta_- \mu_-)$, $\sigma_1 = e(\eta_+ \mu_+ \beta_+ + \eta_- \mu_- \beta_-)$, $v = v'_+ + v'_-$ - combined frequencies of capture and emission of electrons and holes by no uniform traps ($N_0, N_0^0 \gg (\eta_\pm^0)$).

THEORY

In the presence of an external magnetic field and a temperature gradient, the current densities for electrons and holes have the form:

$$\begin{aligned} \vec{j}_- &= -\eta_- \mu_- E^* - \eta_- \mu_- [E^* H] - \alpha_- \vec{\nabla} T - \alpha'_- [\vec{\nabla} T \vec{H}] \\ \vec{j}_+ &= \eta_+ \mu_+ E^* + \eta_+ \mu_+ [E^* H] + \alpha_+ \vec{\nabla} T + \alpha'_+ [\vec{\nabla} T \vec{H}] \end{aligned} \quad (3)$$

$$\vec{j} = e(\vec{j}_+ - \vec{j}_-) \quad (4)$$

Substituting (3) into (4) we find

$$E^* = \frac{\vec{j}}{\sigma} - \frac{\sigma_1}{\sigma} [\vec{E}^* \vec{H}] - \frac{\alpha}{\sigma} \vec{\nabla} T + \frac{\alpha_1}{\sigma} [\vec{\nabla} T \vec{H}] \quad (5)$$

Here $\sigma = \sigma_+ + \sigma_-$, $\alpha = \alpha_+ + \alpha_-$, $\alpha_1 = \alpha'_+ + \alpha'_-$.

It was proved in [8] that in the presence of a magnetic field and a temperature gradient, hydrodynamic motions of charge carriers arise, and the electric field inside the medium has the form:

$$E^* = \vec{E} + \frac{[\vec{v} \vec{H}]}{e} + \frac{T}{e} \left(\frac{\nabla \eta'}{\eta^0} - \frac{\nabla \eta'_+}{\eta_+^0} \right) \quad (6)$$

First, we find \vec{E}^* from the vector equation (5) as follows. We write (5) in the following form

$$\vec{E}^* = \vec{A} + \frac{\sigma_1}{\sigma} [\vec{H} \vec{E}^*] \quad (7)$$

Denote $\vec{B} = \frac{\sigma_1}{\sigma} \vec{H}$, then

$$\vec{E}^* = \vec{A} + [\vec{B} \vec{E}^*] \quad (8)$$

From the vector equation (8) we can easily obtain:

$$\vec{E}^* = \vec{A} + [\vec{B} \vec{A}] + [\vec{B} [\vec{B} \vec{E}^*]] \quad (9)$$

Expanding the vector product in (9) at $\mu_\pm H_0 \ll C$ and substituting the resulting expression for \vec{E}^* in (6), we easily obtain the expressions for the electric field

$$\vec{E} = -\frac{[\vec{v} \vec{H}]}{e} - \frac{\Lambda'}{\sigma} [\vec{\nabla} T \vec{H}] + \frac{\vec{j}}{\sigma} - \frac{\sigma_1}{\sigma_2} [\vec{j} \vec{H}] + \Lambda \nabla T + \frac{T}{e} \left(\frac{\nabla \eta'_-}{\eta_-^0} - \frac{\nabla \eta'_+}{\eta_+^0} \right) \quad (10)$$

Substituting (3-4), taking into account (10) in (1-2), we obtain the following dispersion equations for determining the wave vectors k_1 and k_2

$$x^4 - ux^2 + fx - \delta_0 + i\delta_1 = 0, x = L_x k \quad (11)$$

Here
$$u = \frac{1}{\varphi - \varphi + \alpha^2}; \varphi_{\pm} = \frac{\mu_{\pm} H_0}{c}; \alpha^2 = \frac{1}{8\varphi - \varphi_+} \cdot \frac{\omega}{v_+};$$

$$f = \frac{L_x u \omega}{\mu - \mu_+ E_2^2 \alpha^2}; \delta_0 = \frac{L_x^2 (v_- v_+ - \omega^2)}{\mu - \mu_+ E_2^2 \alpha^2 \varphi - \varphi_+}; \delta_1 = \frac{L_x^2 \omega v_-}{\mu - \mu_+ E_2^2 \alpha^2 \varphi - \varphi_+}; E_2 = \frac{T}{e L_x}$$

The solution of equation (11) in general form is very difficult. Therefore, we will investigate oscillations in the considered medium with frequencies

$$\omega = \pm (v_- v_+)^{1/2} \quad (12)$$

Taking into account (12), from (11) we easily obtain:

$$x_1 = u^{1/2} - i \frac{\delta_1}{2u^{3/2}}; x_2 = -u^{1/2} - i \frac{\delta_1}{2u^{3/2}} \quad (13)$$

After finding the dimensionless wave vectors x_1 and x_2 , we can calculate the impedance of the medium as follows

$$Z = \frac{1}{J_1} \int_0^{L_x} E'(x, t) dx \quad (14)$$

Find $E'(x, t)$ from (10)

$$E'_x = \frac{J'_x}{\sigma_0 \varphi} + \frac{iT}{e\varphi} (k_1 + k_2) \left(\frac{\eta'_-}{\eta_0^-} - \frac{\eta'_+}{\eta_0^+} \right) \quad (15)$$

$$\varphi = 1 - \frac{E_1}{E_0}; E_1 = \Lambda_0 \gamma \nabla T; \gamma = 2 \frac{d \ln \Lambda}{d \ln(E_2)}$$

η'_- и η'_+ must be found, taking into account injection, on the contacts of the medium as follows

$$\eta'_- = c_1^- e^{ik_1 x} + c_2^- e^{ik_2 x}, \eta'_+ = c_1^+ e^{ik_1 x} + c_2^+ e^{ik_2 x} \quad (16)$$

Considering that at $x = 0$, $\eta'_{\pm} = \delta_{\pm}^0 J'_x$ and that $x = L$, $\eta'_{\pm} = \delta_{\pm}^L J'_x$ we find from (16) taking into account (17) for the constants $C_{1,2}^-$ and $C_{1,2}^+$ the following expressions

$$C_1^- = J'_x \frac{\delta_0^- e^{ik_2 L_x} - \delta_1^-}{e^{ik_2 L_x} - e^{ik_1 L_x}}; C_2^- = J'_x \frac{\delta_2^- - \delta_0^- e^{ik_1 L_x}}{e^{ik_2 L_x} - e^{ik_1 L_x}}; C_1^+ = J'_x \frac{\delta_0^+ e^{ik_2 L_x} - \delta_1^+}{e^{ik_2 L_x} - e^{ik_1 L_x}}; C_2^+ = J'_x \frac{\delta_2^+ - \delta_0^+ e^{ik_1 L_x}}{e^{ik_2 L_x} - e^{ik_1 L_x}}; \quad (18)$$

$$\text{or } C_1^- = \delta_1^- J'_x; C_2^- = \delta_2^- J'_x; C_1^+ = \delta_1^+ J'_x; C_2^+ = \delta_2^+ J'_x \quad (19)$$

Substituting (15) taking into account (18-19) we obtain the following expressions for the impedance of the medium

$$Z = \frac{T}{e\varphi} \left(1 + \frac{k_2}{k_1} \right) \left(\frac{\delta_1^-}{\eta_0^-} - \frac{\delta_1^+}{\eta_0^+} \right) (e^{ik_1 L_x} - 1) + \frac{T}{e\varphi} \left(1 + \frac{k_1}{k_2} \right) \left(\frac{\delta_2^-}{\eta_0^-} - \frac{\delta_2^+}{\eta_0^+} \right) (e^{ik_2 L_x} - 1) + \frac{L_x}{\delta_0} \quad (20)$$

When deriving (15), we take into account that $H' = 0$, т.е. $\vec{k} \parallel \vec{E}'$.

When obtaining the values of the wave vectors k_1 and k_2 , we take into account the inequality

$$f_0 > \frac{\delta_1}{u^{1/2}} \quad \text{or} \quad E_0 > \frac{L_x v}{\mu} \frac{c}{\mu H_0} \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\mu_-}{\mu_+} \right)^{1/4} = E_{xar} \quad (21)$$

Substituting $C_{1,2}^{\pm}$ into (20), taking into account (21), we obtain:

$$Z = \frac{T}{e\varphi} (u - 1) \left[\frac{\delta_1^-}{\eta_0^-} - \frac{\delta_1^+}{\eta_0^+} + 2 \left(\frac{\delta_2^-}{\eta_0^-} - \frac{\delta_2^+}{\eta_0^+} \right) \right], u = 4 \left(\frac{\mu_-}{\mu_+} \right)^2 \left(\frac{v_-}{v_+} \right)^{1/2}, u \gg 1 \quad (22)$$

It can be seen from (22) that the impedance of the medium is purely real, i.e. $J_m Z = 0$. This means that when oscillation (12) appears, there is no capacitive and inductive resistance inside, i.e. resistance is ohmic. To find the electric field when the current fluctuates in the circuit, we must solve the following equation

$$Z + R = 0 \quad (23)$$

Thus, equation (23) has the form:

$$Z = \pm \frac{T}{e\varphi Z_0} 4 \left(\frac{\mu_-}{\mu_+} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\delta_-^L - 2\delta_-^0}{\eta_-^0} - \frac{\delta_+^L - 2\delta_+^0}{\eta_+^0} \right) + 1 + \frac{R}{Z_0} = 0, \quad Z_0 = \frac{Lx}{\sigma_0} \quad (24)$$

From (24) we can easily obtain the following expression for the electric field at the appearance of current oscillations with frequency (12)

$$E_0 = \frac{E_1}{1 \pm \frac{4T}{eZ_0 r} \frac{\mu_-}{\mu_+} \left(\frac{\delta_-}{\eta_-^0} - \frac{\delta_+}{\eta_+^0} \right)} \quad (25)$$

Here $r = 1 + \frac{R}{Z_0}$, $\delta_- = \delta_-^L - 2\delta_-^0$, $\delta_+ = \delta_+^L - 2\delta_+^0$

RESULTS AND DISCUSSION

For a positive value of E_0 with frequency (12) shows the following limiting cases

- 1) $\frac{\delta_-}{\eta_-} = \frac{\delta_+}{\eta_+}$, $2\delta_-^0 > \delta_-^L$ and $2\delta_+^0 > \delta_+^L$, $\frac{\eta_-}{\eta_+} = \frac{\delta_-^0}{\delta_+^0}$ or
 $\frac{\eta_-^0}{\eta_+^0} = \frac{\delta_-^L}{\delta_+^L}$; $E_0 = E_1$, $\omega = \pm(\nu_- \nu_+)^{\frac{1}{2}}$
- 2) $\frac{\eta_-^0}{\eta_+^0} < \frac{\delta_-^L}{\delta_+^L}$ or $\frac{\eta_-^0}{\eta_+^0} < \frac{\delta_-^0}{\delta_+^0}$; $E_0 < E_1$, $\omega = +(\nu_- \nu_+)^{\frac{1}{2}}$
- 3) $\frac{\eta_-^0}{\eta_+^0} > \frac{\delta_-^L}{\delta_+^L}$ or $\frac{\eta_-^0}{\eta_+^0} > \frac{\delta_-^0}{\delta_+^0}$; $E_0 < E_1$, $\omega = -(\nu_- \nu_+)^{\frac{1}{2}}$
- 4) $\frac{\eta_-^0}{\eta_+^0} < \frac{\delta_-^L}{\delta_+^L}$ or $\frac{\eta_-^0}{\eta_+^0} < \frac{\delta_-^0}{\delta_+^0}$; $E_0 > E_1$, $\omega = -(\nu_- \nu_+)^{\frac{1}{2}}$

Thus, the value of the external electric field in all listed cases exceeds the characteristic field E_{car} , but does not exceed the value of E_1 . Then the radiation of the medium occurs when E_0 changes from E_{car} to E_1 .

-
- | | |
|---|---|
| <p>[1] <i>E.R. Hasanov, Rasoul Rezhad Hosseyn, A.Z. Panahov</i>. Instability in Semiconductors with Deep Traps in the Presence of Strong ($\mu_{\pm}H \gg C$) Adv.Studies Theor. Phys. Vol. 5, 2011/ no1, 25-30.</p> <p>[2] <i>A.I. Demirel, E.R. Hasanov and A.Z. Panahov</i>, Radiations of Electron – Type Conductivity Environments in Electric and Magnetic Field. Adv. Studies Theor. Phys. Vol.6.2012, no 22, 1077-1086.</p> <p>[3] <i>E.R. Hasanov, A.Z. Panahov and A.I. Demirel</i>, High Frequency Energy Radiation of n-Type Semiconductors at Constant Electric and Magnetic Field. Adv.Studies Theor. Phys. Vol.7.2013.no 21.1035-1042.</p> <p>[4] <i>E.R. Hasanov, R.A. Hasanove</i>, External and Internal Instability in the Medium Having Electron typ Conductivity IOSR Journal of Applied Physics. Volume 10. Issue 3 Ver 11 (May-June 2018) PP. 18-26</p> | <p>[5] <i>F.F. Aliev, E.R. Hasanov</i>, Nonlinear Oscillation Task for the Concentration of Field Carriers Semiconductors with Deep Traps IOSR Journal of Applied Physics. Volum 10. Issue 1 Ver II (Jan-Feb 2018) PP 36-42</p> <p>[6] <i>E.R. Hasanov, Sh.G. Khalilova</i>, Oscillations of current in impurity semiconductors in the presence of a temperature gradient in external electric and weak Magnetic Fields 15th International Conference on Technical and Physical Problems of Electrical Engineering Istanbul, Turkey, 14-15 October 2013</p> <p>[7] <i>M.N. Iglitsyn, Eyu G. Pel, L.Ya. Perlova, V.I. Fistul</i>, Instability of the electron-hole plasma of a semiconductor due to the nonlinearity of the current-voltage characteristics. FTT. Volume 8. Issue. 12. Page 3606-3014. 1966</p> <p>[8] <i>L.E. Gurevich</i>. Thermomagnetic waves and excitation of the magnetic field nonequilibrium plasmas Jetr,44, 1963, 548-555.</p> |
|---|---|

SIMULATION OF THE GROWTH OF A $\text{TlInS}_2 < \text{Yb} >$ SINGLE CRYSTAL, DFT CALCULATION OF ELECTRONIC PROPERTIES, AND AC CONDUCTIVITY OF SAMPLES

S.M. ASADOV¹, S.N. MUSTAFAEVA², S.S. HUSEYNOVA²

¹*Azerbaijan State Oil and Industry University, SRI GPOGC. Azerbaijan, Baku*

²*Institute of Physics, Ministry of Science and Education Azerbaijan. Baku*

E-mail: solmust@gmail.com

The simulation of the process of growing TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < \text{Yb} >$, which has a layered monoclinic syngony with the space group $2/c - C_{2h}^6$, has been carried out. On geometrically optimized TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < \text{Yb} >$ supercells, the electronic properties are calculated using density functional theory (DFT). Conductivity was studied in single-crystal samples in alternating electric fields (ac-conductivity – σ_{ac}) across the layers in the frequency range $f = 5 \times 10^4 - 3.5 \times 10^7$ Hz. In the frequency range $f = 5 \times 10^4 - 2.4 \times 10^7$ Hz, the ac conductivity of the $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ single crystal obeyed the regularity $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$. The density and energy spread of states lying near the Fermi level, the average time and distance of hops, and the concentration of traps responsible for the conductivity of $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ are estimated.

Keywords: Simulation of crystal growth, DFT calculation, Yb-doped TlInS_2 supercell, electronic structure, TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ single crystal, ac-conductivity.

PACS: 61.72.-y; 71.20.Nr; 72.20.-i

1. INTRODUCTION

The TlInS_2 compound belongs to the $A^{\text{III}}B^{\text{III}}C_6^{\text{VI}}$ ($A = \text{Tl}, B = \text{Ga}, \text{In}, \text{and } C = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) family of semiconductor ternary compounds. These crystalline materials have semiconductor and ferroelectric properties and can be used as an active medium for photodetectors in the visible and mid-IR ranges [1]. The crystal structure of the TlInS_2 compound is characterized by the formation of various polymorphic modifications: monoclinic [2, 3], orthorhombic [2], tetragonal [4], hexagonal [5], and triclinic systems [6]. The TlInS_2 compound with a monoclinic syngony has a layered structure and is characterized by anisotropy of physical properties. The properties of TlInS_2 crystals are strongly affected, in particular, by the atoms of alloying elements [7]. One of the alloying elements for semiconductors are lanthanides [8].

The purpose of this work is to simulate growth, DFT calculation of the electronic structure, and study the conductivity of TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ samples in alternating electric fields of the radio frequency range at 298 K.

2. TECHNIQUE OF CALCULATION AND EXPERIMENT

Modeling of temperature fields. The temperature fields and the shape of the crystallization front were studied by computer simulation as a function of the growth rate of TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$. The quality of the grown crystals depends on the composition of the melt and heat and mass transfer in the "crystal-melt" system. The simulation also took into account the crystal growth rate and the size of the growing crystal. The concentration of impurities in our case is small, and they do not affect the temperature

fields and the distribution of impurities during directional crystallization of TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$. Modeling of temperature fields in the "crystal-melt" system was carried out by a program based on a two-dimensional model. It was assumed that in a growing crystal the state of the system is in equilibrium at each moment of time. It was assumed that the system has axial symmetry and the growth values depend on the axial coordinate z and on the radius r in the plane perpendicular to the axis. When calculating the temperature field in a growing crystal, heat transfer by the crystal, thermal radiation from the surface of the melt and crystal, and radiation exchange between the crystal and melt were taken into account. The motion of the melt was described within the framework of a viscous incompressible liquid by the Navier-Stokes equation.

DFT electronic structure calculation. The band structure and density of electronic states TlInS_2 with monoclinic syngony (space group $2/c - C_{2h}^6$) were calculated based on the density functional theory (DFT) using the ATK quantum chemical package [7]. The electronic configurations of atoms in the ground state were considered: $\text{Tl} - [\text{Xe}] 4f^{14}5d^{10}6s^26p^1$, $\text{In} - [\text{Kr}] 4d^{10}5s^25p^1$, $\text{S} - 3s^23p^4$, $\text{Yb} - [\text{Xe}] 4f^{14}6s^2$. The effects of exchange and correlation into the total energy of the system were taken into account within the framework of the generalized gradient approximation (GGA) according to the Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) scheme [9, 10]. The unit cell geometry TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < \text{Yb} >$ was optimized.

The basis was built using plane waves with a kinetic energy ≤ 300 eV. The convergence in total energy in unit cell calculations was no worse than 5×10^{-6} eV/atom. The convergence threshold for interatomic forces was 10^{-4} eV/Å. The choice of k-points of the reciprocal lattice was performed using

the Monkhorst–Pack method [11]. To subdivide the Brillouin zone of a supercell, a $2 \times 2 \times 2$ k-grid was used [7].

Sample preparation. The synthesis of polycrystals of the compound TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ was carried out using the extremely pure chemical elements Tl (Tl 00), In (In 00), S (high purity 16-5) and Yb (99.99%). The completion of the synthesis of TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$, their homogeneity and individuality were controlled by differential thermal (DTA) and X-ray phase (XRD) analysis. DTA was carried out on a STA 449 F3 Jupiter setup. XRD of powder samples was carried out on a D8-ADVANCE diffractometer in the mode $0.5^\circ < 2\theta < 80^\circ$ (Cu $K\alpha$ radiation; $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$) at 40 kV and 40 mA.

Growing single crystals. Heat and mass transfer was simulated during the growth of single crystals. A melt based on TlInS_2 in a quartz ampoule was considered a Newtonian fluid in the Boussinesq approximation in the buoyancy term. Melt density is calculated as a linear function of temperature. Taking into account the corresponding hydrodynamic differential equations, the transport fields of the flow, temperature, and dopant Yb and TlInS_2 concentrations were calculated. The CGSim program (Crystal Growth Simulator) based on the finite volume method [12] was used for calculations.

Single crystals were grown by the Bridgman-Stockbarger method [13] from synthesized TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ polycrystals. The single crystal growth rate was 0.1 mm/h. A sample in an

ampoule placed in the hot zone of the furnace was melted, and the melt was kept at 1050 K for 1–2 h. The grown TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ single crystals had a monoclinic syngony with a space group (sp. gr.) $C2/c - C_{2h}^6$.

The frequency-dependent ac-conductivity of samples of TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ single crystals was measured by the resonance method using a B486 Q-meter [14]. The frequency range of the alternating electric field was $5 \times 10^4 - 3.5 \times 10^7$ Hz. For measurements, TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ samples were prepared in the form of flat capacitors, the plane of which was perpendicular to the crystallographic c-axis of the TlInS_2 crystal with a monoclinic system. Silver paste was used as electrodes for samples. The thickness of the samples was 200 μm , and the area of the plates was $4 \times 10^{-2} \text{ cm}^2$. When measuring samples TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$, the reproducibility of the resonance position was $\pm 0.2 \text{ pF}$ in capacitance and $\pm 1.0 - 1.5$ divisions of the resonator scale in terms of quality factor ($Q = 1/\text{tg}\delta$). In this case, the largest deviations from the average values were 3–4% for permittivity (ϵ') of samples and 7% for $\text{tg}\delta$ [14].

3. RESULTS AND DISCUSSION

Let us consider a mathematical model of the melt motion as a viscous incompressible fluid, which is described by the Navier-Stokes equation

$$\rho v_i (\partial v_i / \partial x_i) - \rho g_i + \rho g_i \alpha_L (T - T_0) - \partial \tau_{ij} / \partial x_j \quad (1)$$

where ρ is the density of the melt at a given temperature T_0 , v_i is the velocity of the fluid element, g_i is the free fall acceleration, α_L is the thermal expansion coefficient, τ_{ij} is the stress tensor $\tau_{ij} = -p\delta_{ij} + \eta(\partial v_i / \partial x_j + \partial v_j / \partial x_i)$, p is the pressure, η is the viscosity coefficient.

Equation (1) is used with the continuity equations

$$\partial v_i / \partial x_i = 0 \quad (2)$$

$$\rho c_p v_i \partial T / \partial x_i + \partial q_j / \partial x_j = 0 \quad (3)$$

where c_p is the heat capacity, $q_j = -k\partial T / \partial x_j$ is the heat flux, k is the thermal conductivity coefficient. The indices i, j take the values of the coordinates, y, z , g_i and v_i the projections of the directions of gravity and velocity on the corresponding coordinates $x_x \equiv x, x_y \equiv y, x_z \equiv z$. Velocity v_i or force $\tau_{ij}n_j$ on the surface bounding the melt is determined taking into account the normal n_j to the surface: $\tau_{ij}n_j = P_0 n_i$ (P_0 is the gas pressure on the melt surface).

At the “melt–crystal” boundary, the isotherm is determined by $T(r, z) = T_m$ (T_m is the melting temperature). Taking this into account, we write the equation for the heat flux from the melt in the form

$$k_L \nabla T_L n = n(T_L - T_C) + \epsilon \sigma (T_L^4 - T_r^4) \quad (4)$$

T_L – melt temperature, T_C – ambient temperature, ϵ – emissivity, $\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ J} / (\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$ – Stefan–Boltzmann constant, T_r – effective ambient temperature.

The state of the resulting crystal is determined by the temperature from the heat conduction equation: $\nabla(k_S \nabla T) - \rho_S c_{pS} v_p \nabla T = 0$. The temperature field in the crystal was solved by the method of finite differences of nonlinear equations with partial derivatives [15]. The perfection of a crystal depends on the shape of the crystallization front. The temperature fields in the “crystal–melt” system during crystal preparation were modeled taking into account the crystal diameter and growth rate (0.1–10 mm/h; $d = 5 - 10 \text{ mm}$) (Fig. 1).

It has been established that a proportional change in the diameter of 5–10 mm of the $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ crystal and maintaining a growth rate of 0.1–0.5 mm/h does not change the shape of the crystallization front. The results of modeling the growth of a $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ single crystal with a length of 10–100 mm show that the concentration of the alloying component along the crystal–melt interface is also determined by the competition of convection and diffusion mechanisms. With an increase in the concentration of the alloying component ($> 1 \text{ at. \% Yb}$), the crystallization rate of the melt decreases, and the quality of the crystal depends on the movement of the heat flux.

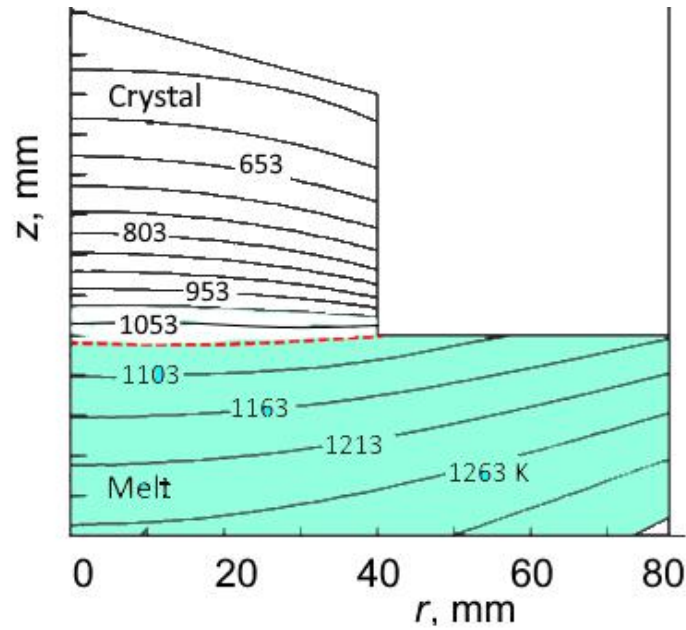


Fig. 1. Typical temperature fields in the "crystal-melt" system during the preparation of a TlInS_2 $\langle 1 \text{ ar. } \% \text{ Yb} \rangle$ crystal with a diameter of 10 mm at a growth rate of 0.1 mm/h.

Crystal lattice parameters. Partial replacement of indium in TlInS_2 with doping ytterbium (Yb) does not change the arrangement of atoms in the supercell and the degree of local deformations of the crystal lattice is insignificant ($< 1\%$) (Fig. 2a,b). This is consistent with the structure of TlInS_2 ($\text{Tl}^+\text{In}^{3+}\text{S}_2^{2-}$), where each In^{3+} cation forms four covalent bonds with four nearest S_2^{2-} anions. In this case, the ionic radius of the doping Yb^{3+} (0.86 Å) is closer to the ionic radius of In^{3+} (0.80 Å) than to the ionic radius of Tl^+ (1.50 Å).

The geometry of the crystal structure was optimized so that the forces acting on the TlInS_2 atoms from the side of the crystal did not exceed 0.1 eV/Å. The obtained results of the optimized lattice parameters TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 \langle \text{Yb} \rangle$ are in good agreement with the experimental data [5, 16]. In DFT calculations, taking into account the contribution of the spin-orbit interaction to the exchange-correlation energy (GGA-PBE) reduces the errors between the calculated and experimental values of the properties, in particular, the band gap (E_g).

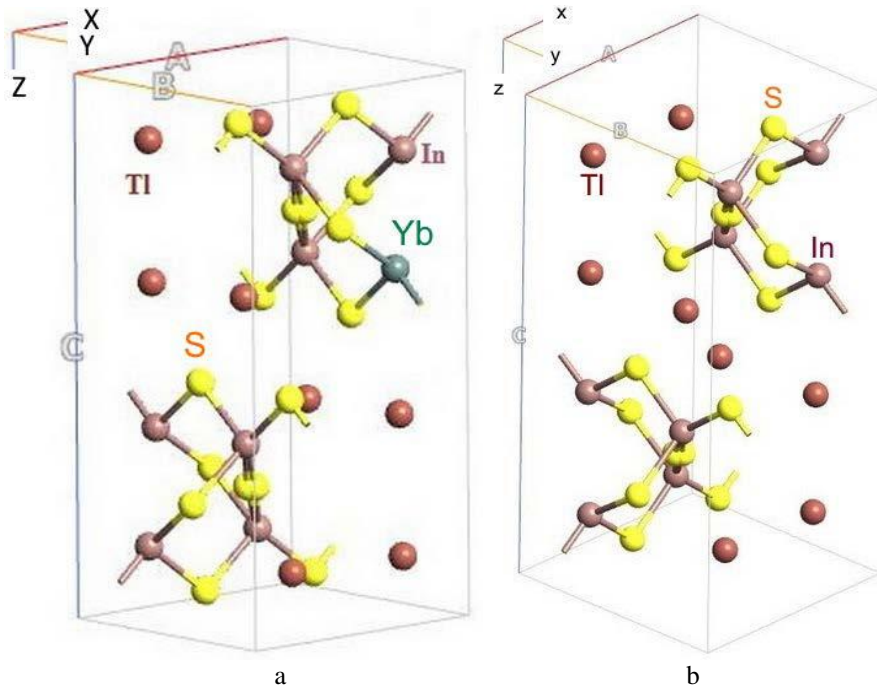


Fig. 2. Atomic structure of the unit cell of the crystal TlInS_2 (a) and $\text{TlInS}_2 \langle \text{Yb} \rangle$ (b) with a monoclinic system (sp. gr. $C2/c - C_{2h}^6$).

Zone structure. In the band structure of the TlInS₂ supercell, the minimum of the valence band and the maximum of the conduction band are located at the Γ point of the Brillouin zone (Fig. 3a,b). TlInS₂ has a direct energy band gap E_g and is a p-type semiconductor. The results of the DFT calculation of E_g without taking into account the effect of spin-orbit coupling and van der Waals interaction are given in Table 1.

It is known that the calculated value of E_g semiconductors is usually less than the experimental data. In order to match and increase the value of E_g , various effects are used and taken into account in the exchange-correlation functional. In particular, taking into account the effect of spin-orbit coupling and van der Waals interaction makes it possible to increase the value of E_g .

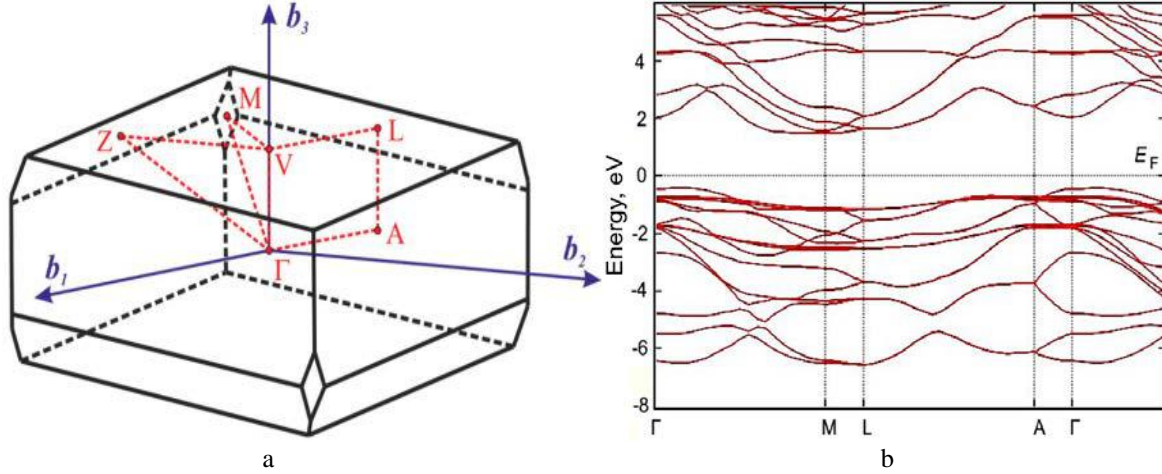


Fig. 3. The first Brillouin zone (a) and the band structure of a TlInS₂ crystal with a monoclinic system (sp. gr. $C2/c - C_{2h}^6$) calculated by DFT GGA-PBE $2 \times 2 \times 2$ supercells.

Table 1. DFT- GGA-PBE calculated and experimental band gaps for $2 \times 2 \times 2$ supercells of TlInS₂ and TlInS₂ < Yb > crystals (sp. gr. $C2/c - C_{2h}^6$)

$2 \times 2 \times 2$ Supercell	Calculation	Experiment		
		E_g, eV		
	DFT GGA-PBE	77 K	4.2 K [17]	293 K [17]
TlInS ₂	1.82	2.58	2.516	2.393
TlInS ₂ < Yb >	1.41	2.53		

Frequency-dependent ac-conductivity. In TlInS₂ no significant dispersion of the ϵ' value is observed in the entire studied frequency range, and its value varies within 9.8–12.2. Ytterbium doping of the TlInS₂ crystal leads to a noticeable dielectric dispersion. Thus, with a change in frequency from 5×10^4 to 3.5×10^7 Hz in the TlInS₂ < 1 at. % Yb > sample, the value of ϵ' decreased from 11.3 to 5.65, i.e., decreased by a factor of two.

The values of the dielectric loss tangent ($tg\delta$) in the single crystal sample TlInS₂ < 1 at. % Yb > significantly exceeded the values of $tg\delta$ in TlInS₂.

In the TlInS₂ sample, the $tg\delta(f)$ had a monotonically decreasing character, indicating a loss of through conduction. In contrast to TlInS₂, in TlInS₂ < 1 at. % Yb >, the dependence $tg\delta(f)$ was characterized by the presence of maxima indicating relaxation losses.

On Fig. 4 shows the result of studying the frequency-dependent ac-conductivity of TlInS₂ and TlInS₂ < Yb > single crystals at 298 K. In the frequency range 5×10^4 – 10^7 Hz, the ac conductivity of the TlInS₂ single crystal varied according to the law $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$, and at $f > 10^7$ Hz, the dependence $\sigma_{ac}(f)$ was superlinear. The dispersion curve $\sigma_{ac}(f)$ of the TlInS₂ < 1 at. % Yb > sample also had two slopes: $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ at $f = 5 \times 10^4$ – 2.4×10^7 Hz and $\sigma_{ac} \sim f^2$ at $f > 2.4 \times 10^7$ Hz.

Band-type ac-conduction in semiconductors is mostly frequency independent up to 10^{10} – 10^{11} Hz. The experimental dependence $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ observed by us in the TlInS₂ and TlInS₂ < 1 at. % Yb > samples indicates that the σ_{ac} conductivity is due to charge carrier hopping between states localized in the band gap. These can be states localized near the edges of allowed bands and/or states localized near the Fermi level [18].

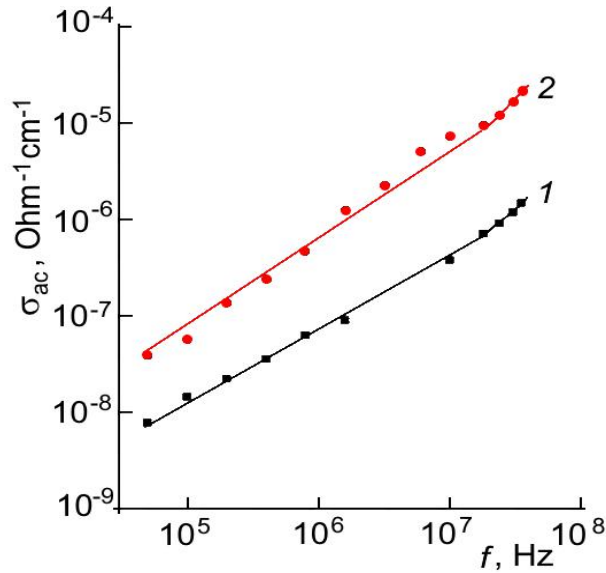


Fig. 4. Frequency-dependent conductivity of single crystals TlInS₂ (curve 1) and TlInS₂ < Yb > (curve 2) at $T = 298$ K.

In experiments, the conduction over states near the Fermi level usually dominates over the conduction over states near the edges of allowed bands. The law $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ obtained by us in the samples TlInS₂ and TlInS₂ < 1 at. % Yb > indicates a hopping mechanism of charge transfer over states localized in the vicinity of the Fermi level [15, 19]:

$$\sigma_{ac}(f) = \frac{\pi^3}{96} e^2 k_B T N_F^2 a_L^5 f \left[\ln \left(\frac{v_{ph}}{f} \right) \right]^4 \quad (5)$$

where e is the electron charge; k_B is the Boltzmann constant; N_F is the density of states near the Fermi level; $a_L = 1/\alpha$ is the localization radius; α is the decay constant of the wave function of a localized charge carrier $\psi \sim e^{-\alpha r}$, v_{ph} is the phonon frequency.

According to formula (5), ac-conductivity depends on the frequency as $f \left[\ln(v_{ph}/f) \right]^4$, i.e. at $f \ll v_{ph}$, the value of σ_{ac} is proportional to $f^{0.8}$. Using formula (6), the experimentally found values of $\sigma_{ac}(f)$ were used to calculate the density of states at the Fermi level. The calculated N_F value for the TlInS₂ < 1 at. % Yb > single crystal was $N_F = 1.5 \times 10^{19} \text{ eV}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3}$. In the TlInS₂ sample, the N_F value was $5.2 \times 10^{18} \text{ eV}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3}$. Those doping of the TlInS₂ single crystal with ytterbium led to an almost threefold increase in the density of states near the Fermi level. When calculating N_F , the value $a_L = 14 \text{ \AA}$ was taken for the localization radius. And the value of v_{ph} for TlInS₂ is taken on the order of 10^{12} Hz [7].

According to the theory of hopping conduction on alternating current, the average hopping distance (R) is determined by the following formula [18]:

$$R = \frac{1}{2\alpha} \ln \left(\frac{v_{ph}}{f} \right) \quad (6)$$

In formula (6), the value of f corresponds to the average frequency at which $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ is observed - the law. The value of R calculated by formula (6) for the single crystal TlInS₂ < 1 at. % Yb > was 80 \AA . In the

TlInS₂ sample, the hopping distance R was found to be 86 \AA . These values of R are approximately 6 times higher than the average distance between charge carrier localization centers in TlInS₂ and TlInS₂ < 1 at. % Yb > single crystals. The value of R allowed by the formula

$$\tau^{-1} = v_{ph} \cdot \exp(-2\alpha R) \quad (7)$$

determine the average hopping time in a single crystal TlInS₂ < 1 at. % Yb >: $\tau = 8.3 \times 10^{-8} \text{ s}$. In the TlInS₂ sample, τ was found to be $2 \times 10^{-7} \text{ s}$.

According to the formula [18]:

$$\Delta E = \frac{3}{2\pi R^3 \cdot N_F} \quad (8)$$

in TlInS₂ < 1 at. % Yb >, the energy spread of the states localized near the Fermi level was estimated: $\Delta E = 6 \times 10^{-2} \text{ eV}$. And according to the formula:

$$N_t = N_F \cdot \Delta E \quad (9)$$

the concentration of deep traps in TlInS₂ < 1 at. % Yb > responsible for ac conductivity was determined: $N_t = 9 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (in TlInS₂ $N_t = 7.3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). Doping of the TlInS₂ single crystal with ytterbium (1 at. % Yb) led to an increase in the density of states near the Fermi level and to a decrease in the average hopping length and time.

CONCLUSION

Computer modeling of temperature fields in the "crystal-melt" system showed the following. The quality of a single crystal TlInS₂ < Yb > depends on the nature of the temperature fields and the shape of the crystallization front. And the thermal conditions and the shape of the crystallization front, in turn, depend on the crystal diameter and growth rate. The concentration of the Yb (>1 at. %) alloying component along the

“crystal–melt” interface determines the competition between the mechanisms of convection and impurity diffusion. In cases of increasing the concentration of the alloying component Yb, the crystallization rate of the melt $\text{TlInS}_2 < \text{Yb} >$ is significantly reduced, and the quality of the crystal strongly depends on the temperature fields.

The results of DFT GGA PBE calculations and X-ray phase analysis of the lattice parameters of the single-crystal compound TlInS_2 with a monoclinic structure (sp. gr. $C2/c - C_{2h}^6$) are in good agreement with each other and with the known parameters. Without taking into account the effect of spin–orbit coupling and van der Waals interaction, the calculated band gap of the $2 \times 2 \times 2$ TlInS_2 supercell is $E_g = 1.82$ eV, which is smaller than the experimental value of E_g . Accounting for these effects and contributions to the exchange–correlation functional makes it possible to increase the value of E_g and agree with the experimental data 2.58 eV at 77 K.

The charge transfer mechanism (hopping transfer mechanism) of TlInS_2 and $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ single crystals has been established. In the frequency range $f = 5 \times 10^4 - 2.4 \times 10^7$ Hz, the ac-conductivity of the $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ single crystal obeyed the regularity $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$. This is characteristic of the hopping mechanism of charge transfer in

semiconductors through states localized near the Fermi level. The density of states near the Fermi level is calculated ($5.2 \times 10^{18} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3}$ for TlInS_2 and $1.5 \times 10^{19} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3}$ for $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$), their energy spread (0.14 eV for TlInS_2 and 6×10^{-2} eV for $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$), average time (2×10^{-7} s for TlInS_2 and 8.3×10^{-8} s for $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$) and hopping distance (86 Å for TlInS_2 and 80 Å for $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$), as well as the concentration of deep traps ($7.3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ for TlInS_2 and $9 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ for $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$) responsible for ac conduction. Thus, doping with ytterbium (1 at.% Yb) of the TlInS_2 single crystal makes it possible to control its physical and dielectric properties.

ACKNOWLEDGMENTS

The work has been partially funded by the Science Development Foundation with the President of the Republic of Azerbaijan (EIF) (grant No. EIF-BGM-4-RFTF-1/2017) and the Russian Foundation for Basic Research (RFBR) (project No. Az a2018).

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare that they have no conflict of interest

-
- [1] S.N. Mustafaeva, M.M. Asadov, A.A. Ismailov. Phys. Solid State. 2009. V. 51. № 11. P. 2269. <https://doi.org/10.1134/S1063783409110122>
- [2] K.R. Allakhverdiev, N.D. Akhmed-zade, T.G. Mamedov // Low Temp. Phys. 2000. V. 26. № 1. P. 56. <https://doi.org/10.1063/1.593863>
- [3] K.R. Allakhverdiev, T.G. Mammadov, R.A. Suleymanov. J. Phys.: Condens. Matter. 2003. V. 15. P. 1291. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/15/8/313>
- [4] A.F. Qasrawi, N.M. Gasanly. J. Mater. Sci. 2006. V. 41. P. 3569. <https://doi.org/10.1007/s10853-005-5618-0>
- [5] W. Henkel, H.D. Hochheimer, C. Carlone. Phys. Rev. B. 1982. V. 26. P. 3211. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.26.3211>
- [6] H. Hahn, B. Wellman. Naturwis. 1967. V. 54. № 2. P. 42. <https://doi.org/10.1007/bf00680166>
- [7] S.N. Mustafaeva, M.M. Asadov, C.C. Huseynova. Phys. Solid State. 2009. V. 64. № 6. P. 628.
- [8] B.I. Shklovskii, A.L. Efros. Electronic Properties of Doped Semiconductors. Springer, Berlin, Heidelberg. 1984. 393 p. ISBN: 978-3-662-02403-4
- [9] M.M. Asadov, S.N. Mustafaeva, S.S. Guseinova. Phys. Solid State. 2021. V. 63. № 5. P. 797. <https://doi.org/10.1134/S1063783421050036>
- [10] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. № 18. P. 3865. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.3865>
- [11] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Phys. Rev. B. 1976. V. 13. № 12. P. 5188. <https://doi.org/10.1103/physrevb.13.5188>
- [12] CGSim Flow Module Theory Manual, STR Inc., Richmond, VA, USA. 2011.
- [13] S.N. Mustafaeva, M.M. Asadov, N.Z. Gasanov. Inorg. Mater. 2013. V. 49. № 12. P. 1175. <https://doi.org/10.1134/S0020168518070099>
- [14] S.N. Mustafaeva, M.M. Asadov, S.S. Guseinova. Phys. Solid State. 2022. V. 64. No 4. P. 428. <https://doi.org/10.21883/FTT.2022.04.52182.251>
- [15] S.M. Asadov. J. Phys. Chem. A. 2022. V. 96. № 2. P. 259. <http://dx.doi.org/10.1134/S0036024422020029>
- [16] S. Kashida, Y. Kobayashi. +J. Phys.: Condens. Matter. 1999. V. 11. № 4. P. 1027. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/11/4/010>
- [17] Semiconductors. Data Handbook, Ed. by O. Madelung. Springer, Berlin, 3rd ed. 2004. ISBN 978-3-642-62332-5.
- [18] N.F. Mott, E.A. Davis. Electronic Processes in NonCrystalline Materials, 2nd ed. Oxford Univ. Press. New York. 2012. 590 p. ISBN 978-0-19-964533-6.
- [19] M. Pollak. Philos. Mag. 1971. V. 23. P. 519. <http://dx.doi.org/10.1080/14786437108216402>

THERMAL CONDUCTIVITY PROPERTIES OF CARBON NANOTUBE-GOBU NATURAL BENTONITE CERAMIC COMPOSITES AT HIGH TEMPERATURES

MAMMADOVA A. SAMIRA¹, HUSEYNOV B. ASGAR², ZEYNALOV B. ELDAR²,
AHMADOVA DURSADAF¹, ALIYEVA R. VALIDA³, SHUKURLU E. GUMRU⁴,
MAMMADOVA A. MEHRIBAN⁵

¹*Institute of Physics, Ministry of Science and Education, Baku, Azerbaijan*

²*Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry named after academician M. Naghiyev, Baku, Azerbaijan*

³*Khazar University, Baku, Azerbaijan*

⁴*The National Aerocosmic Agency, Natural resources space research Institute named after T. Ismayilov, Baku, Azerbaijan*

⁵*School N88, Ministry of Science and Education, Baku, Azerbaijan*

For the first time, the thermal conductivity properties of the natural Azerbaijani Gobu bentonite/x Multi-Walled Carbon Nanotube (x MW-CNT) (x = 1%, 2%, 4%, 8%, and 16%) ceramic composites were studied at high temperature ranges for investigation of their application abilities in the fabrication of new generation nanodevices. A laser flash technique was used to measure the thermal conductivity of the prepared nanocomposites. The nanocomposites were prepared by an irreversible dispersion method that was developed by our research group. The highest thermal conductivity was observed for 16% MWCNT-containing nanocomposites, as expected. The highest value of thermal conductivity is $k = 1,04 \text{ W/(m}^{\circ}\text{K)}$ at $T = 348^{\circ}\text{C}$ for Gobu bentonite/x MWCNT (x = 16%) nanocomposite and the lowest thermal conductivity for Gobu bentonite is $k = 0,27 \text{ W/(m}^{\circ}\text{K)}$ and $k = 0,31 \text{ W/(m}^{\circ}\text{K)}$ at $T = 325^{\circ}\text{C}$ for Gobu bentonite/xMWCNT (x = 1%) nanocomposite. A sharp thermal conductivity drop was observed at 352°C for Gobu bentonite without MW-CNTs as well as for nanocomposites containing low concentrations of xMW-CNTs (x = 1%). The main goal of this research is the investigation of the application abilities of these novel-type, cost-effective composites as substrates like coolers for electronic devices with less heat release, as heating elements apartments, and as novel-type thermoelectrics.

Keywords: Multi-walled carbon nanotubes, Aerosol-Chemical Vapor Deposition, irreversible dispersion method, thermal conductivity, natural Gobu Azerbaijani bentonite clay, nanocomposites.

PACS: 44.00.00 ; 68.37.-d; 72.80.Rj; 72.80.Tm

1. Introduction

In the last few decades, tremendous improvements have been made in electronic devices; in particular, they have become faster, cheaper, and more powerful along with continually decreasing size and ever-increasing device density. The heat generated in a device is directly transported or indirectly through a heat spreader to a heat sink. The effective thermal management of these devices is essential and quite urgent; otherwise, the performance, reliability, and lifetime of devices would be decreased [1]. To avoid heat breakdown, integrated circuits of this small scale need to be efficiently cooled. As ceramics can withstand high temperatures, they are very useful for this application. However, the fabrication process of sintering ceramics are very expensive and demand high temperature which in the end impact the price of the product. Therefore, currently, mostly natural bentonites based ceramics are becoming more popular and useful. Thus in this research work ceramic composites were prepared based on natural Gobu bentonite clay. As additive material, we have used MW-CNTs due to their high thermal conductivity (2000-3000W/m[°]K) as well as other unique properties [2-4]. However, a lot of parameters impact the thermal conductivity. For example, the thermal conductivity of a single CNT is related to its microstructure including defects, crystallinity,

diameter, and the number of walls. Several theoretical studies showed that a small number of defects such as vacancies, and isotopic impurities drastically decrease the thermal conductivity of CNTs due to enhanced scattering, and damping of phonon modes [5-8].

Higher defect density in CNTs leads to worse thermal conductivity. A general trend that the thermal conductivity of CNTs decreased with increasing tube diameter was verified by experimental work. The effect of the number of walls on the thermal conductivity of CNTs is still unclear. In addition, we have listed above the interfaces formed between MW-CNTs and bentonites as well as the MW-CNT network forms formed inside bentonite will affect the thermal conductivity. Therefore, in this research work, we have solved some problems which are very relevant from a scientific and practical point of view.

2. Experimental methods and characterization:

2.1. Characterization techniques

Electron microscopy investigations of the prepared nanocomposites were carried out using scanning electron microscopy (SEM) JEOL JSM6610LV Oxford microscope. The typical magnification used for the SEM was 5 μm and is denoted at the bottom of each image as a 30 kV electron beam. Thermal conductivity measurements were performed using the laser flash using the Light

Flash (LFA 467 Hyper Flash-NETZSCH) technique in a 300–400°C range. Complete set of thermophysical properties such as thermal diffusivity (a), specific heat capacity (c_p), and thermal conductivity (k) as input data for numerical simulations. In this technique, one face of the sample is irradiated by a short (1 ms) laser pulse. An IR detector monitors the temperature rise on

the opposite side of the samples. The thermal diffusivity is calculated from the temperature rise versus the time profile. The thermal conductivity is related to the thermal diffusivity, $D=k/d \cdot C_p$, where d is the density and C_p is the heat capacity. The visual image and the scheme of the laser flash technique are shown in Figure 1.

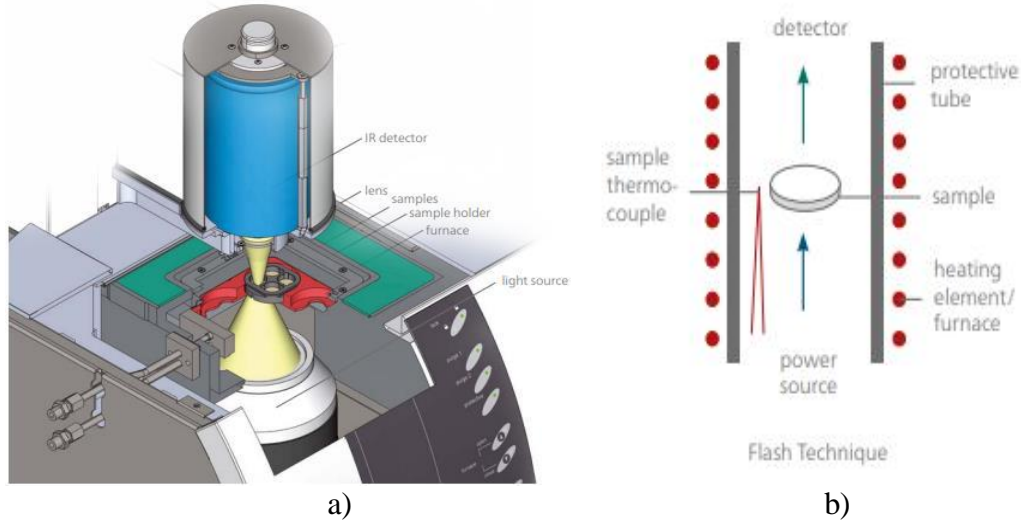


Fig. 1. The Visual image (a) and scheme (b) of the laser flash technique.

Combining these thermophysical properties with the density value results in the thermal conductivity as follows:

$$k(T) = a(T) \cdot c_p(T) \cdot \rho(T) \quad (1)$$

where k = thermal conductivity [W/(m·K)]; a = thermal diffusivity [mm²/s]; c_p = specific heat [J/(g·K)]; ρ = bulk density [g/cm³]. Then, thermal conductivity is determined from the measured thermal diffusivity, specific heat, and bulk density of the sample using a special equation.

3. RESULTS

For obtaining information about the surface morphology of the prepared nanocomposites, Gobu/Xylene-MWCNT (4%) ceramic composite was measured using SEM. The SEM image of this composite shows that inside Gobu bentonite, MWCNTs were distributed in parallel bundles or in a horizontally oriented direction, which will directly impact their thermal conductivity properties. Thus, the form and shape of MW-CNT's network influence the thermal conductivity of nanocomposites.

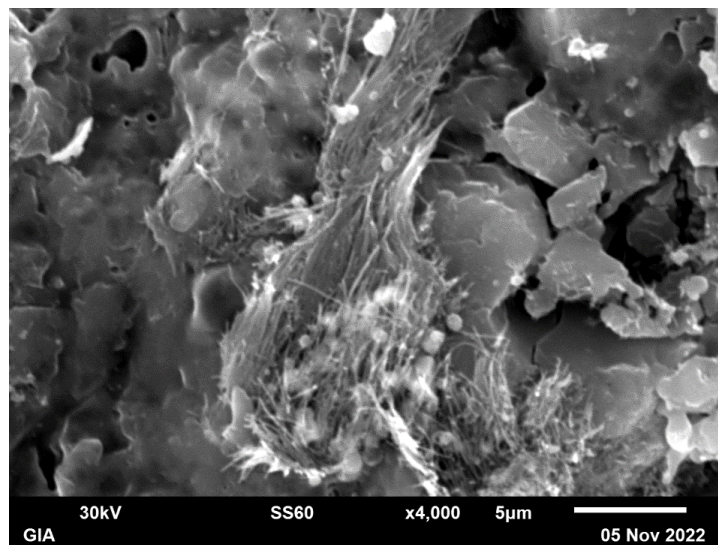


Fig. 2. SEM image of Gobu /x MWCNT (x=4%) ceramic composite at 5 μm scale.

The thermal conductivity properties of the prepared Gobu/xMWCNT ($x = 1\%$, 2% , 4% , 8% , and 16%) nanocomposites were investigated to determine the role of mixed MWCNTs inside bentonite matrices for increasing their thermal conductivity, as the thermal conductivity of individual MW-CNTs is very high. Due to literature results, the thermal conductivity properties of nanocomposites can be impacted by different parameters: the structure and type of MWCNTs, their length, MWCNT distribution inside matrices, phonon scattering, alignment, interfacial resistance between MWCNT and matrices, CNT-CNT contacts, etc. The literature results showed that the thermal conductivity of different types of natural bentonite clays is very low, even when filled with different types of carbon fillers like CNT,

expanded graphite, etc. For example, in research work [9], the thermal conductivity of capric acid, expanded perlite, and expanded graphite are $0,49 \text{ W/(m}^{\circ}\text{K)}$. For organic montmorillonite, paraffin, or grafted multi-walled nanotubes, the value is $0.30 \text{ W/(m}^{\circ}\text{K)}$ [10]. Therefore, our main goal is to increase the thermal conductivity of MWCNT containing natural bentonites and prepare novel-type, cost-effective composites [11,12]. First of all, we used mixed MWCNTs as nano-fillers in the beginning, as it is the easiest way to prepare nanocomposites. Depending on the results, the shape of the CNT network will change. The measured results of thermal conductivity are given in Figure 3 for all nanocomposites. For comparison, first of all, Gobu bentonite clays were measured in argon and air.

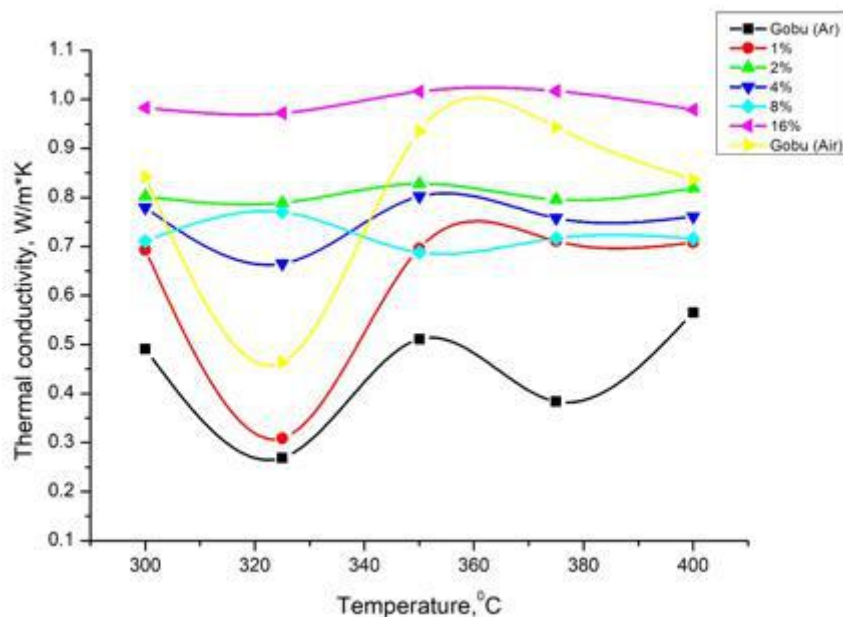


Fig. 3. Thermal conductivity of Gobu/ x MWCNT ($x=1\%$; 2% ; 4% ; 8% ; 16%) nanocomposites.

As a matrix, we have used natural Azerbaijani Gobu bentonite. Gobu bentonite shows very low thermal conductivity in air and in the argon atmosphere. With the addition of MWCNTs, thermal conductivity increased with increasing MWCNT concentration, from 1% to 16% (Figure 3). It is clear from Figure 3 that the highest thermal conductivity is observed for 16% MWCNT-containing nanocomposites. The highest value is $k = 1,04 \text{ W/(m}^{\circ}\text{K)}$ at $T = 348^{\circ}\text{C}$ for Gobu bentonite/xMWCNT ($x = 16\%$) nanocomposite. A sharp thermal conductivity drop was observed for Gobu bentonite without MWCNTs as well as for low concentrations containing nanocomposites Gobu bentonite/xMWCNT ($x = 1\%$) at 352°C . This sharp decrease in thermal conductivity can be explained by the high porosity of bentonite, as bentonite is generally a porous material. With increasing concentrations of MWCNTs, they fill these porous places, and thermal conductivity increases. Another interesting result is that with increasing temperature from 350°C , for Gobu bentonite/x MWCNT ($x = 1\%$) nanocomposite, this sharp drop was eliminated, however for Gobu bentonite in Argon it is possible to observe them in another temperature ($T=375^{\circ}\text{C}$), but

for Gobu bentonite in Air, the exact opposite was observed. This can be explained by many factors but mostly by the structure of Gobu bentonite clay in Ar atmosphere and in Air.

CONCLUSION

In this study, for the first time, the thermal conductivity properties of the prepared natural Azerbaijani bentonite (Gobu)/x MWCNT ceramic composites with different concentrations ($x = 1\%$, 2% , 4% , 8% , and 16%) were investigated at high temperatures. The highest value of thermal conductivity is $k = 1,04 \text{ W/(m}^{\circ}\text{K)}$ at $T = 348^{\circ}\text{C}$ for Gobu bentonite/x MWCNT ($x = 16\%$) nanocomposite. In comparison with the literature results, we could increase the thermal conductivity of the natural bentonite/MWCNT composite. Despite the fact that MWCNTs have a very high thermal conductivity on their own, the situation changes for nanocomposite materials. These results can be explained mostly by phonon scattering within the bundles of MWCNT, interfaces formed between natural bentonite ceramic matrix and MWCNTs, and the structure types of MWCNT networks. Based on these results, we can

say that these nanocomposites made by mixing MWCNT networks inside bentonite matrices do not increase thermal conductivity significantly. Therefore, research in this field will continue. However, these nanocomposites can be potentially used as non-

corrosive electrodes for electrolysis processes, as substrates like coolers (heat dissipation elements) for electronic devices with less heat release, and as heating elements for heating apartments.

-
- [1] *L.S. Arden and L. Moore.* Mater. Today, 17, 2014,163–174.
- [2] *Z. Han, A. Fina.* Prog. Polym. Sci. 36, 2011, 914.
- [3] *P. Kim, L. Shi, A. Majumdar, P.L. McEuen,* Phys Rev Lett. 87, 215502, 2001.
- [4] *C. Yu, L. Shi, Z. Yao, D. Li, A. Majumdar.* Nano Lett. 5, 1842, 2005.
- [5] *A.M. Marconnet, M. A. Panzer, and K.E. Goodson.* Rev. Mod. Phys.85, 1295–1326, 2013.
- [6] *J.W. Che, T. Cagin and W.A. Goddard.* Nanotechnology 11, 65–69, 2000.
- [7] *C. Sevik, H. Sevincli, G. Cuniberti, and T. Cagin.* Nano Lett.11, 4971–4977, 2011.
- [8] *W. Padgett and D.W. Brenner.* Nano Lett. 4, 1051–1053, 2004.
- [9] *A. Sari, A. Karaipekli,* Materials Chemistry and Physics, 109, 459. 2008.
- [10] *M. Li, Q.G. Guo, and S. Nutt.* Solar Energy, 146, 1, 2017.
- [11] *A. Huseynov, S. Mammadova, E. Zeynalov et al.* Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures, 1, 2022.
- [12] *S. Mammadova, T. Baba, T. Mori, A. Huseynov, E. Zeynalov.* International Journal of ThermoPhysics, 44, 91-117, 2023.

ELECTRICAL PARAMETERS OF ZEOLITE WITH DIFFERENT SILVER CONTENT

G.M. EYVAZOVA¹, I.M. AFANDIYEVA², V.I. ORBUKH², N.N. LEBEDEVA²

¹*Baku State University, Nano Research Centre, AZ 1148 Baku, Azerbaijan,*

²*Baku State University, Institute for Physics Problem, AZ 1148 Baku, Azerbaijan*

The zeolite is actively used in various fields of medicine and biology as an active substance to fight bacteria and as an element of an electrical circuit. In the present paper these studies were carried out on the basis of natural clinoptilolite zeolite and its modification with silver. In this investigation the electrical parameters of zeolite with different silver content were studied. Two types of samples were studied: 1) after treatment in different AgNO₃ solution (samples N1 and N2); 2) after treatment of (N-1) and (N-2) in NaBH₄. The electrical conductivity of the samples was studied by changing the pressure in the chamber. It was found that the electrical conductivity depends on the concentration of silver and the pressure in the chamber. The study of these samples revealed some features. Due to the high content of silver ions in the zeolite, current stabilization is observed. The pressure in the chamber does not affect the current as the concentration of neutralized silver increases. This is due to the fact that the concentration of silver ions accumulates at the ends of the sample.

Keywords: zeolite, electrical conductivity of zeolite, silver content zeolite, dependence on silver concentration.

PACS: 52.25.Jm., 52.80.-s., 51.50.+v

1. INTRODUCTION

The state of the molecular system in the pores of the solid-state matrix is of significant interest both from the point of view of fundamental science and practice [1-2].

Zeolites are classic representatives of nanoporous materials. The value of zeolites is due to the openwork aluminum-silica framework common to these materials, of pores and cavities which forms a system of pores and cavities, the size of the entrance windows of which is large enough for molecules and ions of most organic and nonorganic compounds to penetrate into them. The framework of zeolites is similar to honeycombs and formed from the cores of silicon and aluminum anionites. Due to its structures, the framework has a negative charge, and this charge is compensated by water molecules and cations of alkaline and alkaline-earth metals weakly bound to it. The pores of zeolites of regular shape, connected to each other through 'windows', form a network of through channels inside the crystal. Therefore, zeolites can be considered as an object on which, in addition to the already well-known phenomena (adsorption, ion exchange phenomena), can investigate the pore emission of electrons, electron multiplication and gas discharge in the pores, dielectric and electrical properties, when the pores are saturated with various gases and liquids. On the basis of X-ray and spectral chemical analysis, the affiliation of the studied natural zeolite to high-silica zeolites of clinoptilolite type was established [3]. The crystal structure of clinoptilolite belongs to monoclinic syngony with parameters; $a = 17.74 \text{ \AA}$, $b = 17.9 \text{ \AA}$, $c = 7.4 \text{ \AA}$, spatial group C2/m, $\beta = 117^\circ$. The structure consists of alternating negatively charged aluminosilicon-oxygen tetrahedra AlO_4 and SiO_4 , which connecting with each other by vertices, form pores-nanochannels of two types A and B with sizes $0.6 \cdot 4 \text{ nm}$ (A type) and $0.4 \cdot 0.4 \text{ nm}$ (B type). The contents of these channels are an out-of-frame subsystem: this is positive charge ions- cations of Na^+ , K^+ , Mg^{++} , Ca^{++} , that

compensate for the negative charge of the framework, and also a large amount of coordination water molecules.

In microelectronics the conductivity of zeolites is usually associated with ionic conductivity [3-4]. The conduction current is carried out by the movement of mobile balancing ions in an anionic framework. Hydrated zeolites are also known as proton conductors [5]. Usually, as a rule, it is assumed that electronic conductivity is not realized in zeolites [6]. In addition, materials, such as zeolites have the ability to store energy when the external electric field is applied [7]. Special electrical properties of nanoporous of zeolite structures make zeolites candidate materials in microelectronics [8]. Zeolites are used as gas sensors [9], solar panels [10], functional fillers in composites [11], plasma light sources with low-energy consumption [12].

Thus, it can be seen, the zeolite is actively used as an element of an electrical circuit. However, until now no systematic study of zeolite, as an element of electrical circuit, has been carried out. This refers to the study of the frequency dependences of the dielectric permittivity and conductivity of natural zeolite and its modification. In this paper, these studies were carried out for natural clinoptilolite zeolite and its modification with silver. The zeolite modified with silver was chosen because it is actively used in various fields of medicine and biology as an active substance to fight bacteria [13] and because silver is one of most highly conductive substances. Therefore, we conducted studies to determine the effect of silver modification of clinoptilolite on its electrical properties.

2. MATERIALS

The zeolite used in the experiment as a dielectric matrix, was a natural zeolite (NZ) of the clinoptilolite type. Its structure is composed of alternating negatively charged aluminosilicate tetrahedral AlO_4 and SiO_4 , which, when combined, form charged frameworks, in

the pores of which there are positive ions- cations to compensate for the negative charge of the framework. Mapping and the characteristic elemental composition of cations in the pores were studied by scanning electron spectroscopy (SEM) on the JEOL JSM 7600F device. The pores contained ions of Na, Ca, K, Mg. Clinoptilolite after ball mill processing turned into powder, consisting of crystallites with dimensions of 0.5 - 30µm.

Modification of clinoptilolite with silver was carried out in order to:

a. exchange sodium ions for silver ions in a solution of silver nitrate (AgNO₃) of various concentrations (0,02M and 0,1M), in order to obtain two types of zeolite powders with different content of silver ions in the pores;

b. process powders of both types in a solution of sodium borohydrate (NaBH₄) for remission of silver ions into neutral silver.

Thus, as a result of ion exchange in AgNO₃ solution of various concentrations (0,02M and 0,1M), zeolite powders with different silver content in the pores were obtained. For the chemical reduction of silver ions to neutral silver (Ag nanoparticles), solutions of sodium borohydrate (NaBH₄) 0.1M were prepared. Powders with ion-exchange silver were immersed in NaBH₄ solution for 40 seconds, then washed with distilled water and dried at 550°C.

As a result, the following samples were obtained for the study:

- (N-1) – the powder containing Ag⁺ ions after treatment in AgNO₃ solution 0,02M;

- (N-2) – the powder containing Ag⁺ ions after treatment in AgNO₃ solution 0,1M;
- (N-10) –the powder with neutral silver Ag after treatment of (N-1) in NaBH₄ solution;
- (N-20) – the powder with neutral Ag after treatment of (N-2) in NaBO₄ solution.

To carry out the electrical measurements at constant voltage, the powder was placed in a cassette, where it was clamped between two electrodes. The cassette was placed in the chamber equipped with electrical inputs and outputs for pumping gas out of chamber. The pressure in the chamber was recorded by a pressure gauge. The constant stabilized voltage was in the range of 40 – 1000V. The current was recorded in the range of 10⁻⁸– 10⁻³A, the pressure varied from atmospheric (p_{atm}) to 10⁻²Torr.

3. EXPERIMENTS

The experiment consisted from the following.

At constant voltage the following parameters were measured:

- a) the dynamics of the current I(t) after switching on the constant voltage U= 100V at constant pressure p_{atm} ;
- b) the dependence of the current on the remaining pressure I_p in the range of 760 – 10⁻¹Torr.

The results obtained at constant voltage are presented in Table1, where Ag (%) is the percentage of silver in the powder, $I_0(A)$ - primary current, t is the time, R - is the resistance, $I_p(A)$ (0,1Torr) is the current at a pressure of 0,1Torr;

Table 1.

Samples	Ag (%)	I_0 (A)	t (min)	R (MΩ)	I_p (A) (0,1Torr)
after treatment in different AgNO ₃ solution					
(N-1) (Ag ⁺ , AgNO ₃ , 0,02M)	3,0	$8,5 \cdot 10^{-5}$	25	2,2	$\leq 10^{-7}$
(N-2) (Ag ⁺ , AgNO ₃ , 0,1M)	10,2	$12 \cdot 10^{-5}$	∞	0,8	$7 \cdot 10^{-7}$
after treatment of (N-1) and (N-2) in NaBH ₄					
(N-10) (Ag, treatment (N-1) in NaBH ₄)	6.5	$4 \cdot 10^{-5}$	20	4.8	$\leq 10^{-7}$
(N-20) (Ag, treatment (N-2) in NaBH ₄)	13.8	$17 \cdot 10^{-5}$	∞	0.57	$3 \cdot 10^{-4}$

It was assumed that since the concentration of the solution silver nitrate (AgNO₃) for N-2 is 5 times higher than the solution for N-1, then, accordingly, the current in the N-2 sample will be 5 times higher than in the N-1 sample. But as can be seen from the table, the currents differ only 1,4 times.

However, the dynamics of currents after switching on a constant voltage of 100V differs significantly: in the sample (N-2) the current is stable, and in the sample (N-1) the current decreases with time. This current drop is estimated by the amount of time t , during which the current is reduced by half. For sample (N-1) this time is 25 min., for sample (N-2) $t = \infty$. The resistance (R) of the samples was defined as the ratio of the applied voltage to the stable current for the sample (N-2) and the ratio of the voltage to the weekly

varying current over time t for the sample (N-1). They differ by 3 times.

The current in the sample N-1 decreased with decreasing pressure and reached a constant value of $\leq 10^{-7}$ A. Study of the N-2 sample revealed almost the same dependence of current on pressure ($I_{p,N-2} = 7 \cdot 10^{-7}$ A).

Powders (N-10) and (N-20) were obtained after treatment of the samples N-1 and N-2 in NaBH₄. They have a different silver content of 6.5% and 13.8%, and the initial currents (I_0) are $4 \cdot 10^{-5}$ A and $17 \cdot 10^{-5}$ A, respectively. After treatment of these samples in borate (which neutralized silver ions), the current in a sample with a low concentration of silver (N-10) also remained unsteady with a decrease in atmospheric pressure. In the sample with a high Ag content (N-20), the current

remained stationary as before, but the most important thing is the fact, that with a decrease in atmospheric pressure, the current did not decrease, but even increased significantly compared to the current before borate (NaBH₄) treatment (Table 1).

4. RESULTS AND DISCUSSION

As a result of processing the zeolite in a solution of AgNO₃ of various concentrations (0,02 M and 0,1 M), the following is observed:

1. An increase in the concentration of the AgNO₃ solution by 5 times led to a slight increase in the current ($I_{0\ N-2}/I_{0\ N-1} \sim 1,4$).

2. In sample N-1 in 25 minutes, the decreasing current value reached half of the primary value. With time, the current in the sample continued to decrease.

3. Over time, in the N-2 sample with a high silver concentration, the current value decreased to a certain stationary value (from 10,2 A to $12 \cdot 10^{-5}$ A).

The phenomena mentioned in paragraphs 2 and 3 can be explained as follows.

It is known that the presence of water promotes the transfer of ionic current in zeolites [7]. The introduction of silver ions into the zeolite led to their replacement of other positive ions in the zeolite

At a low concentration of silver ions (N-10), the current is carried by silver ions. With time (25 min), charge carriers are depleted and the sample volume is depleted. As a result, the current in sample N-10 is reduced to half of its primary value.

An increase in the concentration of silver in the zeolite (N-2) leads to the accumulation of charge (positive silver ions) at the ends of the sample and the neutralization of the charge due to the negative ions of the environment (A positive charge in the near-electrode regions is compensated by a negative charge on metal electrodes) Such compensation of positive and negative charges provides electro-neutrality of the system. Thus the Poisson condition is satisfied [14].

When a voltage is applied, an ion current flows in the sample due to the introduced silver ions. Since the concentration of injected silver ions is high, the current value ($7 \cdot 10^{-7}$ A) is maintained for a long time.

Processing of samples N-1 and N-2 revealed: the primary values of currents in samples N-10 and N-20 in comparison with samples N-1 and N-2, respectively, differ little (Table). Continuous measurements also showed a decrease in current in N-10 and a steady state in N-20.

The next stage of the study was to reduce the atmospheric pressure in the chamber. Studies have shown a decrease in the current value in samples N-1, N-2 and N-10 with a decrease in pressure from atmospheric to 0,1 Torr.

It is known that water molecules, being polarized, draw positive ions out of the pores of the negatively charged zeolite framework and ensure the passage of the ion current. When atmospheric pressure decreases, water evaporates (water vapor is removed), which leads to a decrease in the current value. As a result, positive ions stick to the walls of the pores, losing mobility, i.e., the ionic conductivity turns to zero.

An unusual result of the study is of interest - when the pressure decreases from p_{atm} to 0,1 Torr, the current value in the H-20 sample increased from $17 \cdot 10^{-5}$ to $13 \cdot 10^{-4}$ A. Probably, at low pressure neutral silver atoms become polarized and, like water molecules, contribute to the transfer of ionic current.

4. CONCLUSION

The electrical parameters of zeolite with different silver content were studied. The conductivity of the samples was studied by changing the pressure in the chamber.

It was found that at a low concentration of silver in the zeolite, the electrical conductivity decreases to 10^{-7} A as the air is pumped out to a pressure of 10^{-1} Torr.

At a high silver concentration, an increase in the current value in the range $17 \cdot 10^{-5} - 3 \cdot 10^{-4}$ A is due to the interaction of polarized silver atoms and positive ions in the negative zeolite framework. As a result of this interaction, the current transfer is carried out by the ions contained in the zeolite, and the silver atoms play the role of water molecules.

-
- | | |
|---|--|
| <p>[1] <i>I.M. Kalogeras, A.B. Vassilikou-Dova.</i> Electrical p properties of Zeolitic Catalysts, Defect and Diffusion Forum, 164, 1998, 1-36.</p> <p>[2] <i>F.J. Jansen, R.A. Schooheydt, W.M. Meier, J.B. Uytterhoeven.</i> (Ed.) Introduction to Zeolites Science and Practice, Adv. In Chemistry Series, American Chemical Society, Washington, 1973, 96-105.</p> <p>[3] <i>M.D. Rutten, R.A. Secco, Y. Huang.</i> Ionic conduction in hydrated zeolite Li-, Na-, K at high pressures, Chem.Phys. Lett., 331, 2000, 189-195.</p> <p>[4] <i>M.I. Ahmad, J. Zaidi, S.U. Rahman, S. Ahmed.</i> Synthesis and proton conductivity of heteropolyacids loaded Y-zeolites as solid proton conductors for fuel cell applications, Microporous and Mezoporous Materials, 91, 2006, 296-304.</p> | <p>[5] <i>K. Praveena, S.R. Murthy.</i> Dielectric Properties Zeolites, Int. J. Emerg. Technol. Adv. Energ. 3, 2013. 363-368.</p> <p>[6] <i>M. Alvaro, J.F. Gabeza, I.D. Fabue, H. Garcia, E. Guijarro, J.L.M. de Juan.</i> Electrical Conductivity of Zeolite Films, Chem. Mater., 18, 2006, 26-33.</p> <p>[7] <i>K. Sahner, G. Hagen, D. Schonauer, S. Reib, R. Moos.</i> Versate materials for gas sensors Solid State ionics, 179, 2008, 2416-2423.</p> <p>[8] <i>P. Allenzar, S. Valeneia, A. Kozma, H. Garsia.</i> Titanium Containing Zeolites and Microporous Mol.Sieves as Photo. Sol. Cell Chem. Phys. Chem., 8, 2007, 1115-1119.</p> <p>[9] <i>K. Suresh, B.V. Siddaramaiah, M.B. Shagan, S. Manjulak, C. Banganatbaiah, R. Narasimha, G.V. Basavalingu, B. Byrappak.</i> Effect of zeolite</p> |
|---|--|

- particulate filler on the properties of polyurethane composites, *J. Polym. Res.*, 17, 2010, 135-42.
- [10] *K. Koseoglu, M. Ozer, B.G. Salamov.* Electrooptical properties of porous zeolite cathode in the gas electronic devices for plasma light source applications, *Japanese, J. of Appl. Phys.*, 53, 2014, 086203.
- [11] *S. Galioglu, M. Isler, Z. Demircioglu, M. Kos, E. Vocanson, N. Dectoches, R. Turan, B. Akata.* Effect of silver encapsulation on the local structure of titanosilicate ETS-10, *Micropor. Mezopor. Mater.*, 159, 2012, 1-8.
- [12] *F. Tiscornial, S. Irusta, P. Pradanos, C. Teller, I. Coronos Santamaria.* Preparation and Characterization of Titanosilicate Ag-ETS-10 for Propylene and Propan Adsorption, *J. Phys. Chem.*, C111, 2007, 4702-4709.
- [13] *S. Silver.* Bacterial silver resistance: molecular biology and uses and misuses of silver compounds, *FEMS Microbiology Reviews*, 27, 2003, 341-353.
- [14] *L.D. Landau, E.M. Lifshitz.* *Electrodinamika sploshnix sred "GITTL"* Moskva, 1957, 69.

LUMINESCENT PROPERTIES OF BIONANOCOMPOSITES LDPE + x vol.% FS**E.M. GOJAEV¹, A.M. NAZAROV², V.V. SALIMOVA³, R.M. SADIGOV¹**¹*Azerbaijan Technical University, AZ1073, H.Javid av. 25, Baku*²*Institute of Physics, AZ1143, H.Javid av. 131, Baku*³*Sumgait State University, AZ5008, quarter 43, Sumgayit**E-mail: afinnazarov@yahoo.com*

In this work, the effect of luminescence in nanocomposites LDPE + x vol.% FS and LDPE + x vol.% FS + y vol.% Fe is studied. The experiments were carried out in a Cary Eclipse spectrofluorimeter. It was found that at wavelengths of 400-800 nm from all samples only 7 vol.% FS and 7 vol.% FS + 3 vol.% Fe samples have the best luminescent properties and can be widely used in solving practical problems.

Keywords: luminescence, nanocomposites, wavelength, intensity, spectrum

PACS: 62.23.Pk

INTRODUCTION

Recently, great attention has been paid to the study of materials of biological origin and composites with their participation. This is because fish skin is covered in scales; the presence of unpaired fins prevents the rotation of the fish around its axis, carry out translational movement, and paired fins provide balance and turns; the lateral line provides the sensitivity of the direction and the speed of the water flow [1-3]. In addition, fish skin protects the body from harmful environmental influences, and is involved in metabolism. Salts, oxygen, water and other substances are released and absorbed through it. Nerve endings are located on the skin, thanks to which it can perform the function of sensitive organs. The surface of the outer layer is porous. The scales have different sizes depending on the location. According to the data [4-5], fish scales consist of natural polymers - collagen. Collagen is a natural polymer belonging to the group of scleroproteins. The primary structure of collagen is a polypeptide chain consisting of alternating amino acid residues. Unlike other proteins, hydroxyproline, proline and glycine predominate in collagen, and hydroxyproline is a specific marker of collagen, since it is not found in any other proteins.

The purpose of this work is to study the luminescence spectra of fish scales and bionanocomposites filled with fish scales.

EXPERIMENTAL TECHNIQUE

Studies of the luminescent properties of fish scales and biocomposites filled with fish scales were carried out using a Cary Eclipse spectrofluorimeter. The device is universal for studying the spectral properties of samples of different nature. The device is focused on use in biological applications and in materials science. The excitation source is a pulsed xenon lamp, rated at 80 flashes per second, 75 kW equivalent peak power. The focusing optics is a Schwarzschild collector. The Czerny-Turner design controls the monochromators and the horizontal slit.

There are six selectable slots: 1.5, 2.5, 5, 10, 20, 10 mm. Eclipse includes 2 monochromators and can be scanned independently by each of the monochromators. If an excitation monochromator is fixed and scanned with an emission monochromator, an emission spectrum or often called a fluorescence spectrum is obtained. The emission spectrum carries information about the molecular structure and the nature of the material. The shape of the fluorescence spectrum does not depend on the wavelength of the exciting light, since the emission is generated by the lowest of the excited states. The fluorescence spectrum is often a "mirror image" of the absorption spectrum. By fixing the emission monochromator and scanning with the excitation monochromator, the fluorescence excitation spectrum can be obtained. The excitation spectrum is the dependence of the emission intensity at a given wavelength when scanning along the wavelengths of the exciting light. It is also possible to carry out simultaneous scanning with both monochromators and obtain spectra of synchronous scanning.

EXPERIMENTAL RESULTS AND THEIR DISCUSSION

A characteristic property of the fluorescence spectrum is high resolution, accompanied by processes associated with the chemical composition of the sample, structural elements, and other dynamic changes. The fluorescence spectrum has a fairly short time range, since fluorescence begins 10–8 sec after light absorption. During this period of time, all processes take place at the molecular level, nonradiative energy transfers, as well as the exchange of charges and energies between the components, are reflected in the fluorescence spectra, in the results of short-term dynamic processes, in the study of static properties and properties, as well as processes that are detected using a light signal detected by narrow luminescence bands.

The results of studying the excitation spectra of fish scales are shown in Fig.1.

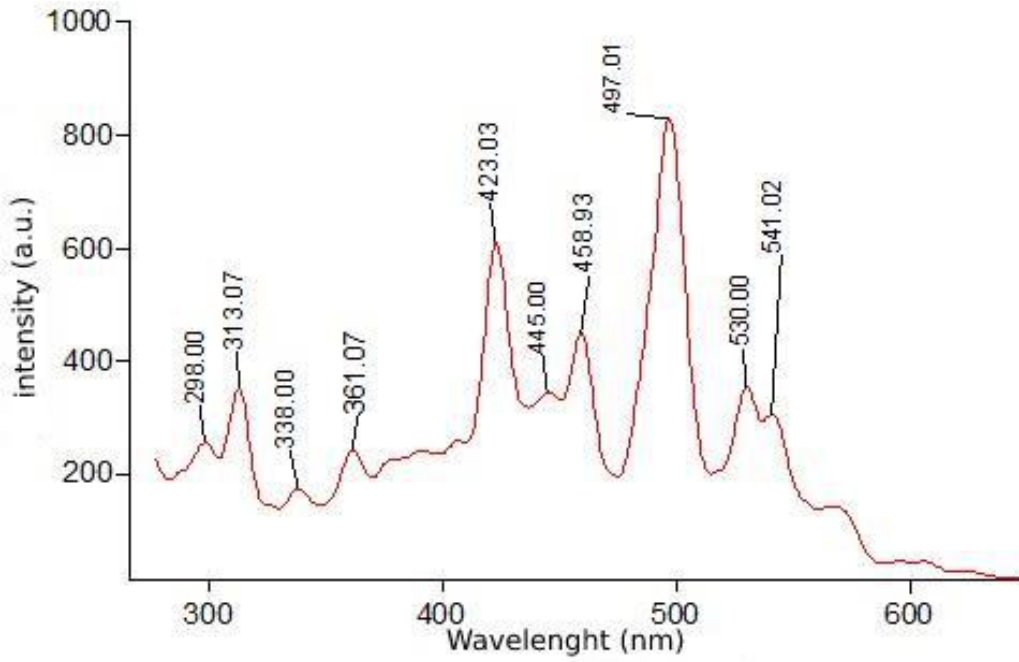


Fig.1. General excitation spectrum of fish scales.

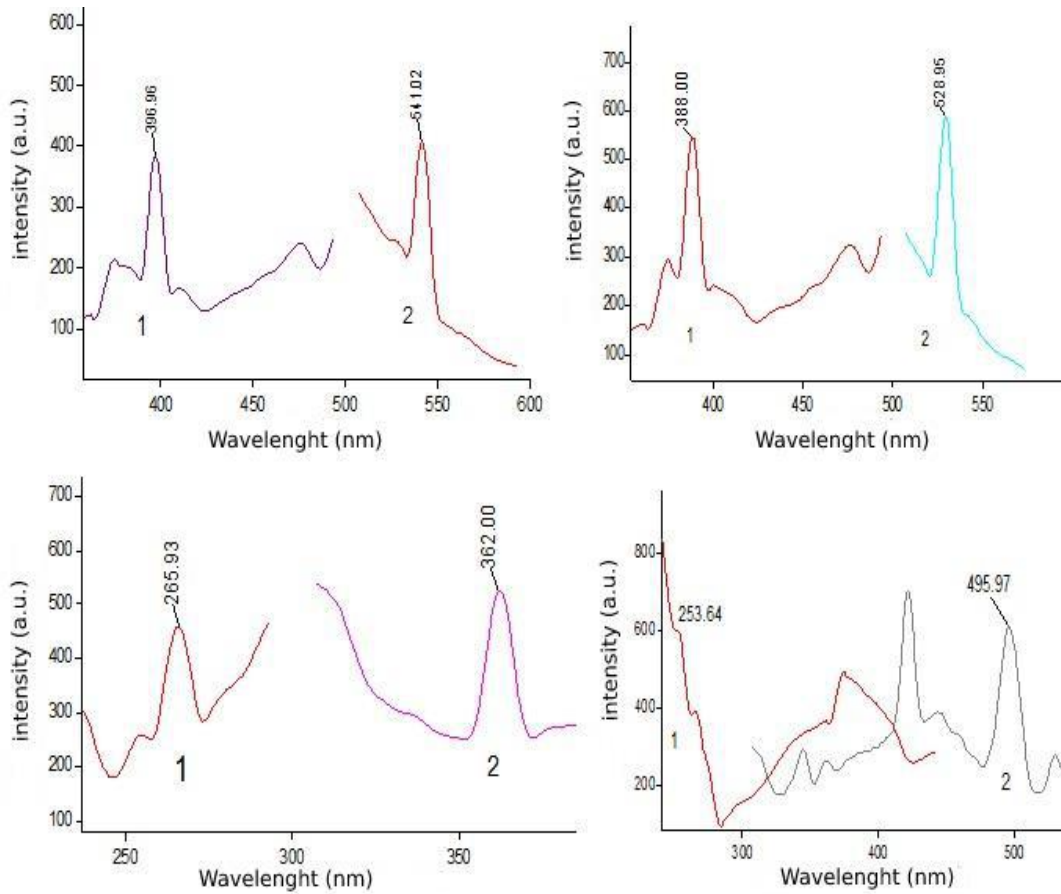


Fig.2. Spectrum of fluorescence at different points of the fish.

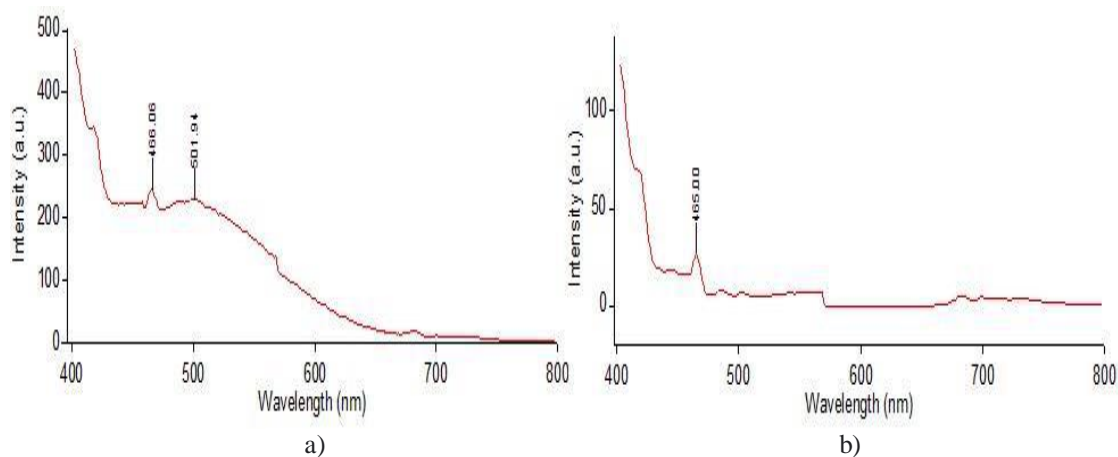


Fig.3. Luminescence spectra of LDPE biocomposite +7 vol.% FS (a) and LDPE bionanocomposite +7 vol.% FS +3 vol.% Fe (b).

The resulting spectrum reflects the characteristic radiation, which is obtained by excitation of fish scales with light at a wavelength of 230 nm. The spectrum includes different peaks that correspond to the fluorescence of fish scales and is attached to Fig.2. As can be seen from Fig.2, with an excitation signal with a wavelength of 396.96; 388; 265.93; 253,64 fluorescence effects are observed. Note that at wavelengths of 541.02; 528.96; 362.00 and 495.97 the intensities of the peaks we detected increase in almost all excitations. Thus, upon excitation at a wavelength of 396.96 nm, the intensity of the fluorescence peaks increases by 28 a.u., and upon excitation at a wavelength of 380 nm, the intensity of the fluorescence peaks increases by 40 a.u. Correspondingly, at a wavelength of 265.95 nm, the intensity of the fluorescence peaks increases by 63 a.u., and upon excitation at a wavelength of 253.64 nm, the intensity of the fluorescence peaks increases by 13 a.u.

Thus, the fluorescence spectra of Kutum fish scales were studied in the wavelength range of 200-600 nm, and it was found that these materials can be widely used in multifunctional electronic devices and used as new-type composites with unique properties. Note that the effects observed in the fluorescence spectrum of Kutum fish scales can be controlled by the choice of scales from different parts of the fish skin.

The luminescence spectra were studied in composites of LDPE + x vol.% FS. Luminescence

effects were also found in composites of LDPE + 7 vol.% FS and LDPE + 7 vol.% FS + 3 vol.% Fe (Fig.3). It was found that in the HPPE + 7 vol.% FS composite, upon excitation at a wavelength of 466.06 nm, the intensity of the luminescence peak is 32 atomic energy units, and upon excitation at a wavelength of 501.94 nm, the luminescence intensity is 9.2 atomic energy units.

In the LDPE bionanocomposite +7 vol.% FS + 3 vol.% Fe, upon excitation at a wavelength of 465 nm, a single relatively pronounced luminescence peak with an intensity of 20 atomic energy units is observed.

Comparing the intensities of the obtained luminescence peaks with the intensities of the excitation signals, we can conclude that in some of the studied biocomposites, pronounced luminescence spectra are obtained. This allows us to conclude that the luminescent property, which is of practical importance, can be achieved by changing the composition of the studied biocomposites and bionanocomposites, as well as choosing the appropriate excitation.

CONCLUSIONS

Studies of the luminescent properties of bionanocomposites LDPE + x vol.% FS + y vol.% Fe revealed that these materials have luminescent properties, practical significance and controllable changes in the volume content of the biofiller and metal nanoparticles.

- [1] С.Л. Баженов [и др.]. Полимерные композиционные материалы: прочность и технология.— Долгопрудный: Интеллект, 2010. 347 с.
- [2] Bai, Gongxin; Tsang, Ming-Kiu; Hao, Jianhua. Luminescent Ions in Advanced Composite Materials for Multifunctional Applications, Advanced Functional Materials, Wiley-Blackwell. 2016. V. 26. No 35. (21). P. 6330.
- [3] О.С. Якубова, А.Л. Котенок. Журнал: Вестник Астраханского государственного технического университета, 2 Технология производства продуктов бытовой химии чешуя как источник получения ихтиожелатина. 2004. В. 2. С. 130.
- [4] Э.М. Годжаев, К.Ш. Кахраманов, Ш.В. Алиева, А.Б. Нагиев. Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология. 2014. № 1. (6). С. 56-61.
- [5] E.M. Gojayev, N.S. Nabiyev, M.A. Ramazanov, K.Sh. Kahramanov, Sh.V. Alieva, A.A. Ismailov. Physical Science International Journal. 2015. V. 6 (Issue1). P. 45.

ON THE ORIGIN OF “SPIDER” PULSARS

A.O. ALLAHVERDIEV, A.I. ASVAROV, S.O. GUSEYNOVA, H.I. NOVRUZOVA

*Institute of Physics, Ministry of Science and Education, Republic of Azerbaijan**a.asvarov@gmail.com, lab31astro@gmail.com*

A new explanation for the origin of a new type of binary millisecond pulsars (spiders) has been proposed.

Keywords: pulsars, binary millisecond pulsars.

INTRODUCTION

Neutron stars are the end products of massive star evolution whose cores collapse during supernova explosions. The number of observed pulsars of all types is more than ~ 3000 . They are detected as radio (~ 2500) and/or gamma-ray (~ 300) pulsars. Usually, the study of pulsars is provided by using the well-known "period – a first derivative of the period diagram", the so-called $P - \dot{P}$ diagram, as these two quantities can be determined with high accuracy by observations (Manchester et al., 2005). The majority of pulsars are single objects, but relatively rarely pulsars are found in binary systems (~ 600). In the above diagram (Figure 1), they are located in the lower left part.

The overwhelming majority of binary pulsars are millisecond pulsars (MSP), spin parameters of which

imply that these pulsars have a weak surface magnetic field of $B_s \sim 10^7 - 10^{10}$ Gs and are old objects with characteristic time $\tau \sim 10^9 - 10^{10}$ years. Usually, MSPs are considered as the ones that undergo reacceleration in binary systems due to accretion at the final stages of the evolution of binary companion stars. When mass transfer ends, the end-stage type binary system (MSP + white dwarf) are formed. Till to Fermi-LAT era (2008), nearly all known field binaries were obtained in these end-stage systems. And since then ~ 60 MSP with small orbital period ($P_{\text{orb}} < 1$ day) low-mass, non-degenerate companions have been revealed. These very compact binary systems were named “spiders” because of evaporative effects due to energetic wind of companion pulsar. At present 44 black widows and 26 redbacks are catalogued (Halpern et al., 2022, Hui & Li, 2019). Here we suggest new approach to establish the origin of these objects.

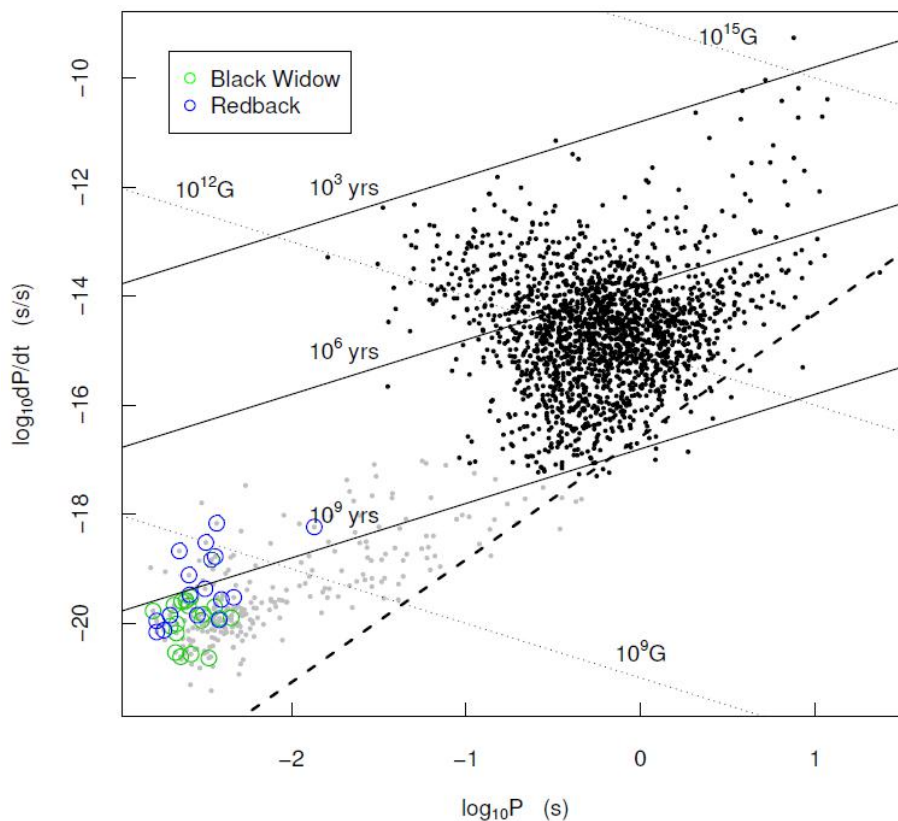


Fig. 1. $P - \dot{P}$ diagram of all currently known pulsars. Some spider pulsars also are shown.

FORMATION OF SPIDER PULSARS AND MAGNETO-ROTATIONAL MECHANISM

It is well known that more than 70% of the progenitors of the pulsars enter the binary systems, but among the pulsars the number of the binary pulsars is too small (~6%). (Manchester et al., 2005). More plausible explanation for this contradiction (the small percentage of binary pulsars) is to involve Blaauw effect, according to which in the past, the disruption of the double system were occur when one of the two components became a SN and as by-effect runaway stars are appeared. This mechanism is considered as the more plausible one, but this mechanism is effective only when a considerable part of the mass of collapsing star is lost during the time scale much shorter than orbital period of the system. The orbital periods of binary star systems varies from $\sim 10^4$ sec (contact binaries) up to hundreds of years (De Marco & Izzard, 2017). And according to Blaauw theory if the collapse time of star more than orbital period of binary system, no disruption will occur. And it is obvious that the closer the binary, the smaller the orbital period. It is interesting to check: may the collapse time be more than orbital period in close binary system? Unfortunately up to day, there is no final theory for the explaining the collapse of star. This event is one of the complicated events in star life. Up today one of more detailed explosion mechanisms is magneto-rotational mechanism (for review, see Nicholl et al., 2017, Bisnovatyi-Kogan, 2011).

The main idea of this mechanism is as follows (Bisnovatyi-Kogan, 1971). As it is well known to maintain hydrostatic equilibrium with its delicate balance between pressure gradient between various layers of star and gravity, the two types of dynamical time scales, namely, the free fall and expansion time scales must be comparable, since stability of star requires that the star should be able to respond with equal rapidity to expansion (due to thermal energy) or contraction (due to gravity) away from the equilibrium point. And this combined time scale is the hydrodynamic time. As mentioned in (Bisnovatyi-Kogan, 1971), a supernova explosion will ensue if the momentum transfer time of angular momentum to the far outer layer of stars would be much longer than hydrodynamic time scale. According this mechanism, as the rotational energy would be dominant with respect to gravitational energy in the precollapse stage of star (due to different dependence on the linear size of the star), time scale of the collapse (in other words, the collapse timescale) in this case will be determined, in general, by the rate of angular momentum transfer via electromagnetic effects. As an order of magnitude, this time can be calculated by using the following formula (Bisnovatyi-Kogan, 1971, 2011)

$$\tau_m \cong \frac{\rho R v}{H^2} \quad (1.1)$$

where R , v , ρ , H are the radius, the rotational velocity, the outer density and magnetic field in the

collapsing star, respectively. Just before the collapse, when the star size approaches neutron star radius, in rough equilibrium between rotation and gravity we can assume the following commonly used values for mentioned quantities: $v \sim 10^{10}$ cm/sec and $R \sim 10^6$ cm (Bisnovatyi-Kogan, 2011). Under this assumptions we get

$$\tau = 10^6 \frac{\rho_8}{H_9^2} \text{ sec} \quad (1.2)$$

here ρ_8 - in units of 10^8 gr cm^{-3} , H_9 - in units of 10^9 Gs and these values are typical for stars just before collapse, therefore the above shown designations were used. For a typical pulsar, the collapse will take place nearly with hydrodynamic time, but for weakly magnetized pulsars the situation will dramatically changed and that is why it is interesting to ascertain, is there binary pulsar systems that have orbital period no more than $\sim 10^6$ sec. According to existing MSP catalogue (<http://astro.phys.wvu.edu/GalacticMSPs/>), orbital periods of about 100 out of 413 binary pulsar systems are less than the abovementioned value.

And as it is mentioned above, new observations (mainly, due to Fermi-LAT data) allows to divide MSPs in binary systems into three sub-classes. These sub-classes are redback, black widow and huntsman pulsars and are distinguished by the companion star's mass or the binary's orbital period (Roberts, 2013). Huntsman pulsars are categorized by orbital periods that is more than 5 days and sub-giant companions. Redbacks host companion stars with masses $M_{cs} \sim 0.2 - 0.4 M_{\odot}$, while black widows host less massive companion stars $M_{cs} < 0.1 M_{\odot}$ (Roberts 2013; Chen et al. 2023). Redbacks and black widows both have short orbital periods of \sim hours (Knight et al., 2023).

NEW IDEA ABOUT THE FORMATION OF SPIDER PULSARS

It is obvious that for a quite wide range of parameters used in formula (1.2), the collapse time of a rotating star is much longer than pure hydrodynamic time that is in range $10^{-2} \sim 10^{-4}$ sec (Bisnovatyi-Kogan, 1971, 2011). The value of magnetic field strength for most pulsars is ($\sim 10^{12}$ Gs), so the collapse occur almost at the hydrodynamic time. But for the weakly magnetized pulsars ($\sim 10^9$ Gs), the collapse time scale (because of inversely squared dependence on magnetic field strength) would be considerably longer than orbital period of binary system and that is why the condition that lead to the disruption of the pair might not be the case. This means that pulsars that enter binary system and have less value of magnetic field at birth could give birth to the spider pulsars. Naturally, this scenario does not exclude the possibility the forming of weakly magnetized pulsars because of dumping of magnetic field due to accretion in binary systems. While the details of the magnetic field decay is still a subject under discussion (e.g., Konar, 2010), it is believed that the surface field of the neutron stars can be somehow buried by the accretion. As for the acceleration of spider pulsars, having very

low-mass companion it was easier for them to achieve such smaller periods as they have had enough time before becoming neutron star to accrete considerable amount of matter from companion star. The low value of magnetic field in its turn also was more favorable for accreting of matter from companion. So, in average, pulsars in spider systems should be more massive and have smaller periods than other pulsars in binary systems. We suggest that alongside with the commonly accepted way about the forming weakly magnetized binary pulsars, described development of events might have taken place at least for some pulsars. Candidate of such systems are spider pulsars.

DISCUSSION AND CONCLUSION

If this scenario for the formation of spider pulsars throughout magneto-rotational mechanism is

valid, it means that the value of magnetic field of pulsars at birth may show some dispersion of strengths that already were found in white dwarfs and other type of stars, say, in Main Sequence stars. It is in good agreement with the idea that pulsars at birth may have a wide range of magnetic field strength and may appear in any part of $P - \dot{P}$ diagram (Beskin et al., 1988).

We argue that numbers of binary millisecond pulsars, namely newly distinguished out of millisecond pulsars - spider pulsars may have been formed through this mechanism. So, we claim that very close (contact, tight) binary systems with pulsar that has low magnetic field strength at birth, evolve to give birth of spider pulsars, if magneto-rotational mechanism of explosion is at work.

-
- [1] V.S. Beskin, A.V. Gurevich & Y.N. Istomin. *Astroph. and Space Science*, 1988, 146, 205.
- [2] G.S. Bisnovatyi-Kogan. *Soviet Astronomy*, 1971, 14, 653.
- [3] G.S. Bisnovatyi-Kogan. *Relativistic astrophysics and physical cosmology*, Moscow, URSS, 2011, 376 p. (in Russian).
- [4] A. Blaauw. *Bull. Astron. Inst. Neth.*, 1961, 15, 265.
- [5] A.H. Knight, A. Ingram, J. van den Eijnden, J.K. Douglas. Buisson, Lauren Rhodes, Matthew Middleton, 2023, (arXiv: astro-ph/2301.13864).
- [6] S. Konar. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 2010, 409, 259–268.
- [7] A.G. Lyne. R.N. Manchester and J.H. Taylor. *ApJ*, 1985, 213, 613.
- [8] R.N. Manchester, G.B. Hobbs. Teoh. A. & Hobbs, M., *Astron. J.*, 129, 1993-2006 (2005)
- [9] O. Marco, R.G. Izzard. *Publications of the Astron. Soc. Australia*, 2017, 34, 35.
- [10] M. Nicholl, J. Guillochon, E. Berger. 2017, *ApJ*, 850, 55.
- [11] J. Chen, M. Cadelano. Pallanca, et al., 2023, (arXiv: astro-ph/2303.11263).
- [12] J.P. Halpern, K.I. Perez, and S. Bogdanov. (arXiv: astro-ph/2207.08198).
- [13] C.Y. Hui, K.L. Li. *High Energy Radiation from Spider Pulsars. Galaxies* 2019, 7, 93.
- [14] M.S.E. Roberts. 2013, in *Neutron Stars and Pulsars: Challenges and Opportunities after 80 years*, ed. J. van Leeuwen, Vol. 291, 127.

ELECTRICAL PROPERTIES OF THIN-FILM CdTe:CdFeTe HETEROJUNCTIONS

M.A. MEHRABOVA^{1,2}, N.I. HUSEYNOV², A.A. ABDULLAYEVA¹, R.M. SADIGOV^{1,3}

¹Azerbaijan Technical University, Baku, Azerbaijan

²Institute of Radiation Problems, Baku, Azerbaijan

³Institute of Physics, Baku, Azerbaijan

nizamiphys@gmail.com

In this work, the recombination processes of charge carriers and electrical properties of CdTe/Cd_{1-x}Fe_xTe ($x=0.08$) thin film heterojunction are investigated. It was determined obtain conditions of heterojunction. XRD investigations confirm that thin films have a face-centered cubic structure with a crystal lattice parameter $a=6.47$ Å. SEM imagines which show smooth surface of obtained thin films. Lifetime of charge carriers defined which is was $\tau=28-35$ μ s, and the surface recombination rate was $s=50$ sm/s. The study showed that the decay of the photocurrent is not mono-exponential, which indicates the presence of several types of recombination. Depending on the energy state of these centers, the effective lifetime was $10^{-6}-10^{-3}$ c. VAX confirm the heterojunction structure of investigated samples.

Keywords: Semimagnetic semiconductor, heterojunction, electrical, lifetime, XRD, SEM, VAX.

PACS: 72.80.Ey, 81.15.-Z, 72.20.Jv

One of the current directions in the development of alternative energy is building photovoltaics, which implies the integration of solar panels with residential buildings or industrial facilities. As a rule, such devices are assembled on a rigid base, however, the assembly of panels on a flexible base would significantly reduce their specific weight, as well as facilitate installation. Thin films based on cadmium telluride can serve as a material for the absorbing layer of flexible solar cells. The advantages of this material include the optimal value of the band gap equal to ~ 1.45 eV, as well as a large absorption coefficient of

solar radiation ($\sim 5 \cdot 10^5$ cm⁻¹). Thin films of semimagnetic semiconductors (SMSC) based on CdTe are of particular interest for the use of these materials in photovoltaics [1–4].

In this work, CdTe/Cd_{1-x}Fe_xTe ($x=0.08$) heterojunction (HJ) was grown on a glass substrate with a SnO₂ conductive layer at a source temperature $T_{sour}=1100$ K and substrate temperature $T_{sub}=670$ K by molecular beam condensation method in a UVN-71-P3 vacuum assembly in a vacuum 10^{-4} Pa. Ni contacts were deposited on front and back side (fig.1).

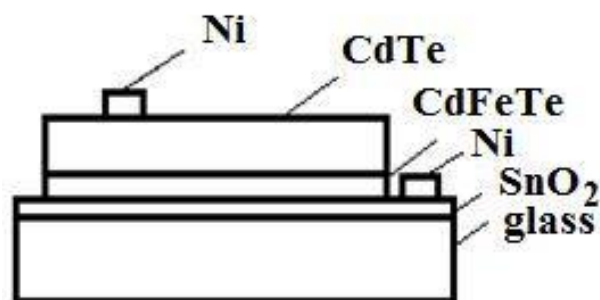


Fig.1. Construction of thin film CdTe:CdFeTe heterojunction.

The crystal structure of the obtained thin films was studied by XRD method on XRD Broker, D8 ADVANCE, Germany X-Ray diffractometer. On X-ray diffraction patterns of Cd_{1-x}Fe_xTe ($x=0.08$) thin films, all diffraction peaks (111), (220), (311), (400), (331) and (422) confirm that thin films have a face-centered cubic structure with a crystal lattice parameter $a=6.47$ Å (fig. 2).

The surface morphology was studied using electron microscopy method on a JEOL JSM-7600F Field Emission Scanning Electron Microscope (SEM) (fig. 3), which confirms the smooth surface of obtained thin films.

In previous works, we have studied a number of physical properties of Cd_{1-x}Fe_xTe SMSC [5-7]. In this work, the recombination processes of charge carriers and electrical properties are investigated.

The study of recombination processes is a necessary essential step in the study of the physical properties of semiconductor materials and devices based on them. The mechanism of recombination of charge carriers determines the features of photoelectric, luminescent, and injection phenomena that consist of most areas of practical use of semiconductors.

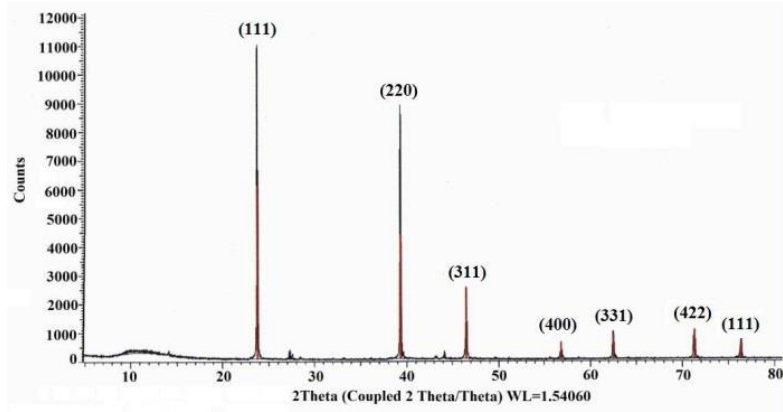


Fig.2. XRD images of Cd_{1-x}Fe_xTe thin films (x=0.08)

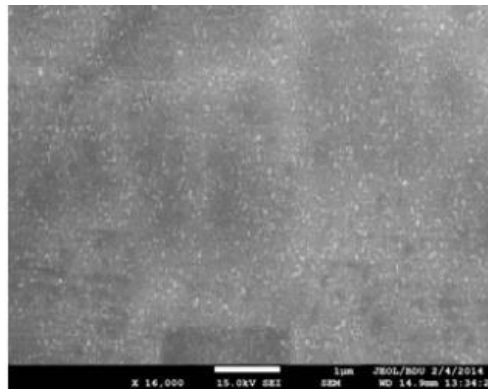


Fig.3. SEM images of Cd_{1-x}Fe_xTe thin films (x=0.08)

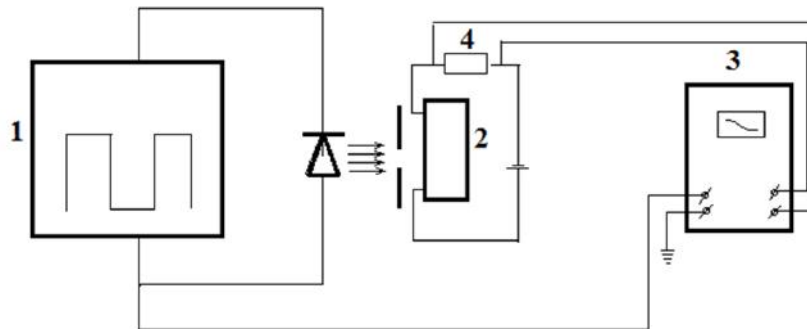


Fig.4. Block diagram of the setup for measuring the kinetics of the photoelectric effect:
1 – give generator; 2 - cell; 3 – amplifier with polarization unit; 4 – oscilloscope.

In order to determine the recombination mechanism, the parameters of recombination centers, and the processes of electronic transitions in HJ, we used a set of stationary and kinetic research methods (fig4). To obtain kinetic characteristics, the HJ was illuminated with short pulses ($t \sim 10^{-6}$ s) of LEDs. The photoelectric signal caused by a change in the HJ potential under the action of pulsed illumination after preliminary amplification by a broadband transistor amplifier was fed to the input of an oscilloscope and recorded by a computer. The temporal resolution of the electoral circuit was no worse than 10^{-8} s, which

made it possible to register the signal in the time interval 10^{-8} - 10^{-2} s (fig5).

It was considered the possibility of estimating the lifetime of nonequilibrium charge carriers in a near-surface layer with defects. In the presence of several types of recombination, the effective carrier lifetime can be found from the expression

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \sum_i \frac{1}{\tau_i}$$

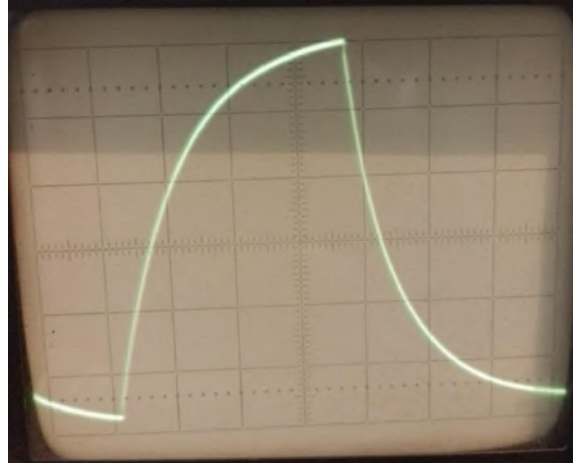


Fig.5. Relaxation of the photoconductivity of a sample excited by rectangular light pulses in CdTe/CdFeTe thin film heterojunction.

For a thin film heterojunction CdTe/CdFeTe, taking into account structural defects and the influence of the surface, the effective lifetime can be determined as

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{1}{\tau_l} + \frac{1}{\tau_s}$$

where $\frac{1}{\tau_s} = \frac{2s}{d}$; τ_l -lifetime taking into account carrier recombination at structural defects in a CdTe:CdFeTe HJ; τ_s - is the surface lifetime; s - is the rate of surface recombination; d - is the thickness of the plate. The analyzes of fig.6 showed that the lifetime of charge

carriers is $\tau=28-35 \mu s$, and the surface recombination rate is $s=50 \text{ sm/s}$. The study showed that the decay of the photocurrent is not mono-exponential, which indicates the presence of several types of recombination. Depending on the energy state of these centers, the effective lifetime was $10^{-6} - 10^{-3} \text{ c}$. Under pulsed illumination, the lifetime of charge carriers was determined from the kinetic decay of the photocurrent.

To study the mechanism of current flow in the HP, we studied the dark current-voltage characteristics and photoconductivity at room temperature. The results showed that the obtained HJs can be used as photoconverters of solar energy.

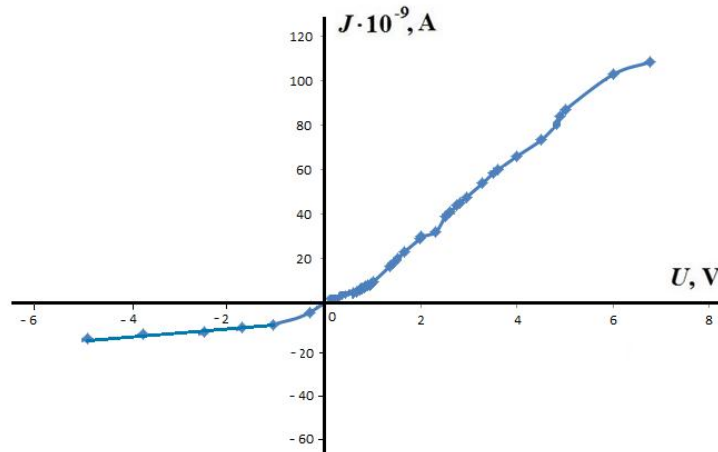


Fig.6. Volt-ampere characteristic of CdTe:CdFeTe thin film heterojunction.

[1] F. Afaneh, M. Okasha, K.J. Hamam, A. Shaheen, M. Maghrabi, B. Lahlouh, H.K. Juwhari. The γ -irradiation Effect on the Optical Properties of CdTe Thin Films Deposited by Thermal

Evaporation Technique. 2018, v.24, №1, p.3-9.

[2] A. Ait Raiss, Y. Sbai, L. Bahmad, A. Benyoussef. Magnetic and magneto-optical properties of doped and co-doped CdTe with (Mn, Fe): Ab-initio study.

- Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2015, v.385, p.295–301.
- [3] *M.A. Mehrabova, H.S. Orujov, N.H. Hasanov, A.I. Kazimova, A.A. Abdullayeva*. Ab initio calculations of defects in CdMnSe semimagnetic semiconductors. Mechanics of Solids, 2020, v.55, №.1, p.108–113.
- [4] *M.A. Mehrabova, I.R. Nuriyev, R.N. Hasanli*. Obtaining of perfect Cd_{1-x}MnXTe epitaxial thin films and their use potentials. 5th WSEAS Int. Conf. Nanotechnology, Cambridge, UK. 2013, p.316-320.
- [5] *M.A. Mehrabova, H.S. Orujov, H.R. Nuriyev, N.H. Hasanov, A.A. Abdullayeva, Z.I. Suleymanov*. Ab-initio calculations of electronic structure of CdFeTe and optical properties. Conference Proceedings Modern Trends In Physics. 2019, p.39-42.
- [6] *M.A. Mehrabova, A.A. Abdullayeva*. Electrical properties of Cd_{1-x}Fe_xTe thin films. The 10th International Conference: “Technical Thermodynamics: Thermophysical Properties and Energy Systems”, September, 9th 2021, University of Rostock, Germany, p.120.
- [7] *M.A. Mehrabova, H.R. Nuriyev, H.S. Orujov, N.H. Hasanov, T.I. Kerimova, A.A. Abdullayeva, A.I. Kazimova*. Effect of gamma irradiation on conductivity of Cd_{1-x}Fe_xTe. Semiconductors, 2020, v. 61, № 12, p. 2306-2309.

DIRAC CONE AND TOPOLOGICAL STATES IN 2D PHONONIC CRYSTALS

ZAFER OZER¹, IZZAT AFANDIYEVA², AMIRULLAH M. MAMEDOV^{3,4},
EKMELOZBAY³¹Mersin Vocational High School Electronic and Automation Department,
Mersin University, Turkiye²Institute for Physical Problems Baku State University, Baku, Azerbaijan³Nanotechnology Research Center (NANOTAM), Bilkent University, Turkiye⁴International Scientific Center, Baku State University, Baku, Azerbaijan
mamedov@bilkent.edu.tr

Dirac cones show many extraordinary properties, like phase reconstruction, topological edge state, and pseudo-diffusive behavior. A Dirac-cone-like dispersion at the center of the Brillouin zone where the wave number $k = 0$, is rare and only happens due to accidental degeneracy. At certain frequencies, the Dirac cone breaks the time-reversal symmetry of acoustic waves, which has not yet been fully explored. In present report, microarchitecture of phononic crystals (PnCs) in a periodic structure can be modulated to obtain the accidental triple degeneracies that make a Dirac-like cone at the $k = 0$. While doing so, it was observed that the frequency of a nondispersive "deaf" band obtained from any arbitrary periodic structure made of similar PnCs remains unaltered. Then, a deaf band based predictive modulation of the PnCs is realized, and multiple occurrences of the Dirac-like points are demonstrated. In addition, the Dirac cone frequency decreases gradually with increasing filling ratio, which indicates a possible way to control wave propagation on the subwavelength scale. Numerical simulation results show that acoustic metamaterials can behave like zero-refractive-index media and can be applied to acoustic tunnelling.

Keyword: double Dirac cone; topological edge state; rectangular phononic crystal; topological phase transition.

PACS: 43.30.+m; 43.20.+g; 42.70.Qs

1. INTRODUCTION

Acoustic metamaterials are periodic, semi-periodic or non-periodic artificial structures with acoustic properties not found in materials in nature. These materials have a wide variety of potential applications, including acoustic lens, [1-3], acoustic cloaking, [4,5] subwavelength resolution imaging [6–9], and acoustic super-tunneling, [10,11].

One of the reasons for band formation, which is the most important feature of acoustic metamaterials, is Bragg scattering that occurs in composite materials with different material densities and different elastic modulus [12–16].

Another reason for band formation is local resonance in acoustic metamaterials [17]. Locally resonant materials using a combination of high-density materials and soft coating materials can create band gaps with lattice constants two times smaller than the respective wavelength [17].

The most well-known locally resonant acoustic metamaterials, mass-spring systems [18–21], Helmholtz resonators [22–26], materials with Mie resonances [27,28] are stretched membranes [25,29–31].

Dirac cone structures showed many new extraordinary properties such as topological edge states [32-36], quantum Hall effect, [37,38]. Dirac cones in acoustic wave systems can be divided into three different categories: Dirac-like cone,[39] Dirac cone, [40-43] and double Dirac cone [44,45,47].

The first of these categories is the Dirac-like cone, which has triple degeneration of two linear distribution bands. A two-dimensional phononic crystal with a

square lattice has been shown to have an effective zero mass density around the Dirac-like cone [39].

The second category is structures with a double degenerate Dirac cone located at the Brillouin region corner of the hexagonal or triangular lattice. [40–43] The third category is structures with double Dirac cones in the center of the Brillouin region [44–48].

In this study, the formation of sub-wavelength Dirac cones and the effect of the angle of the triangular resonators on the formation of Dirac cones in acoustic metamaterials consisting of circular, triangular and hexagonal Helmholtz resonators with hexagonal lattice were investigated using the finite element method.

2. MATERIAL AND METHODS

Phononic Crystal (PnC) consists of Helmholtz resonators made of different geometries BiTeI, BiTeCl and BiTeBr materials arranged in a triangular lattice shape in air. The elastic constant for BiTeBr is $c_{44}=14.9$ GPa, its density is 6760 kg/m^3 , for BiTeI its elastic constant is $c_{44} = 24.3$ GPa, its density is 6869 kg/m^3 , for BiTeCl its elastic constant $c_{44} = 1.7$ GPa and its density 6414 kg/m^3 . According to the formula $\mathbf{c}_{\text{mat}} = \sqrt{\frac{c_{ij}}{\rho}}$,

the formula of advance in the material was calculated as 1484 m/s for BiTeBr, 1881 m/s for BiTeI, and 514 m/s for BiTeCl respectively.

In Fig.1 for triangular inclusion $b=26 \text{ mm}$, $c=9.37 \text{ mm}$, $w=1 \text{ mm}$, $t=1 \text{ mm}$, for circular inclusion $R=15 \text{ mm}$, $w=1 \text{ mm}$, $t=1 \text{ mm}$, for hexagonal inclusion 1 $b=15 \text{ mm}$, $c=7 \text{ mm}$, $w=1 \text{ mm}$ $t=1 \text{ mm}$ and for hexagonal inclusion 2 $b=18.85 \text{ mm}$, $c=8.5 \text{ mm}$, $w=1 \text{ mm}$ $t=1 \text{ mm}$ respectively.

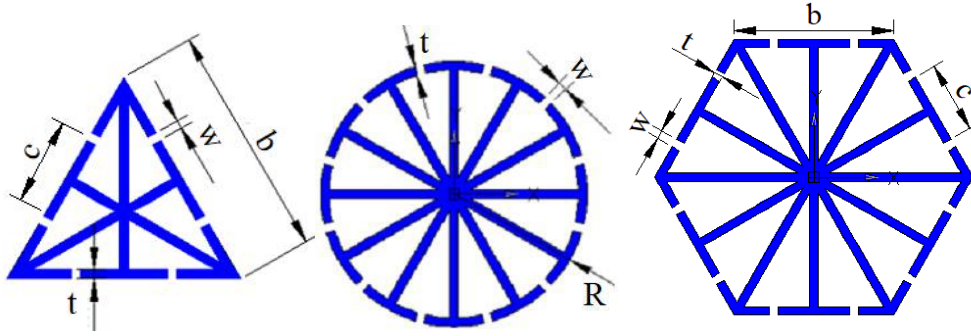


Fig. 1. Resonator sections and dimensions.

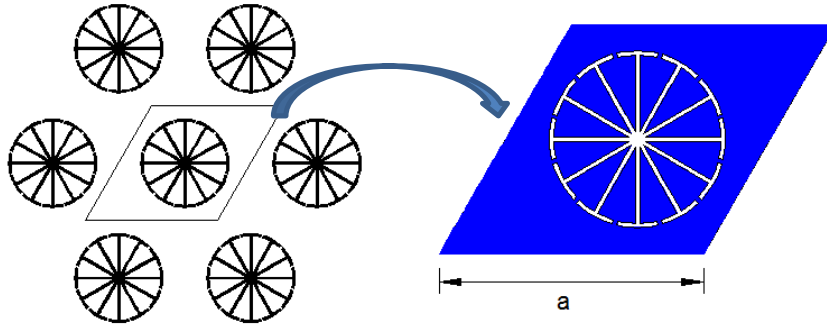


Fig. 2. Unit cell with triangular lattice.

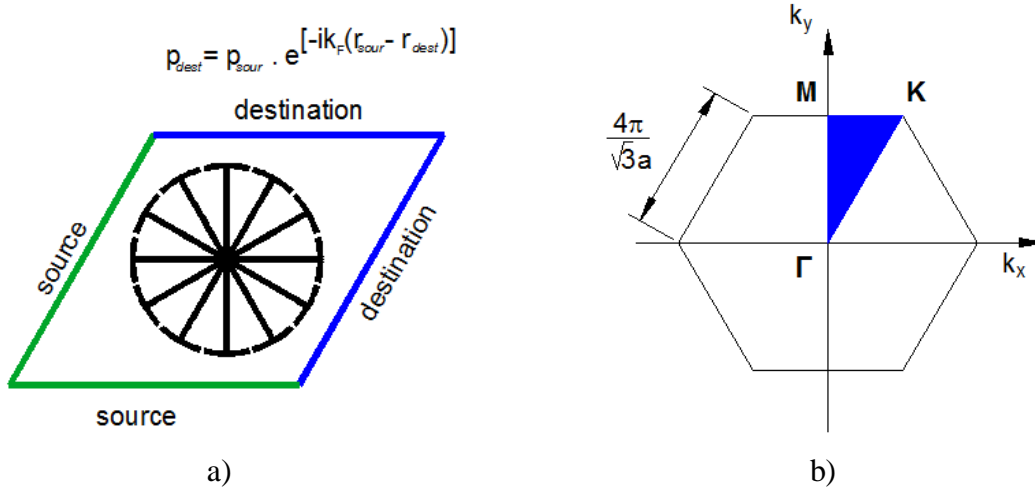


Fig. 3. a) Periodic boundary conditions applied to the unit cell b) 1. Brillouin zone of triangular lattice.

The geometry of the resonators is triangular, circular and hexagonal as shown in Fig.1.

The unit used to obtain the band structure of the triangular lattice PnC is as in Fig.2 and given for the circular resonator, the lattice constant is $a=40$ mm and other dimensions are as in Fig.1. To obtain the band structure, Floquet boundary conditions applied to the edges of the rhombic unit cell (Fig.3a). Fig.3b shows the 1st Brillouin region of the reciprocal lattice and the high symmetry

3. RESULTS AND ANALYSIS

We begin with the acoustic system that is shown in Fig. 4, which is a two-dimensional acoustic

metamaterial that consists of a triangular array of regular columns with Helmholtz resonators. This acoustic metamaterial consists of six Helmholtz resonators. The first Brillouin zone of the triangular lattice is shown in Fig. 3, where the blue shading indicates the irreducible Brillouin zone.

Figure 4(a) shows that the dispersion relation becomes linear in the vicinity of the Dirac cone, which corresponds to the normalized frequency of 0.4346 (3727 Hz). For comparison, we also calculated the band structure of the complete triangular lattice with 90° rotation of resonant cavity, with results as shown in Fig. 4b. The phononic crystal has a Dirac cone at the normalized frequency of 0.4597 (3942 Hz). These

results show that Helmholtz resonators can be used successfully to reduce the Dirac cone frequency. The introduction of acoustic metamaterials, therefore, offers the possibility that low-frequency Dirac cones can be obtained on a subwavelength scale.

To investigate the effects of the different space group symmetries on the Dirac cone, we discussed the unit cells with three different types of space group symmetry. As plotted in Fig. 2(a), the acoustic metamaterial with the space group symmetry $p6mm$ is arranged in a hexagonal lattice with a lattice constant $a=40$ mm. It should be noted that the gapless band structure has a Dirac cone at a normalized frequency of 0.2549 (2186 Hz). The band structure of the acoustic metamaterial with a rotation angle shows a Dirac cone at a normalized frequency of 0.2423 (1979 Hz). We observed that the Dirac cone frequency decreased after

rotation; this reduction was induced by the spatial compression distribution after the rotation process. The angular dependence of the Dirac cone frequency is shown in Table 2. These results show the weak angular dependence of the Dirac cone frequency and indicate that when the acoustic metamaterial has the $p6mm$ space group symmetry, the Dirac cone remains robust to rotation.

We obtained the band structure when I rotate the triangular resonator 90° to the left is as follows. As seen in the picture, the band narrowed by 60% from the range of 0.4-0.55 (Fig.4a) to the range of 0.47-0.5 (Fig.4b).

Bands between 0.3514 and 0.3558 are formed in the circular resonator (Fig.5). A narrow band between 0.265-0.27 was formed in the hexagonal resonator (Fig.6).

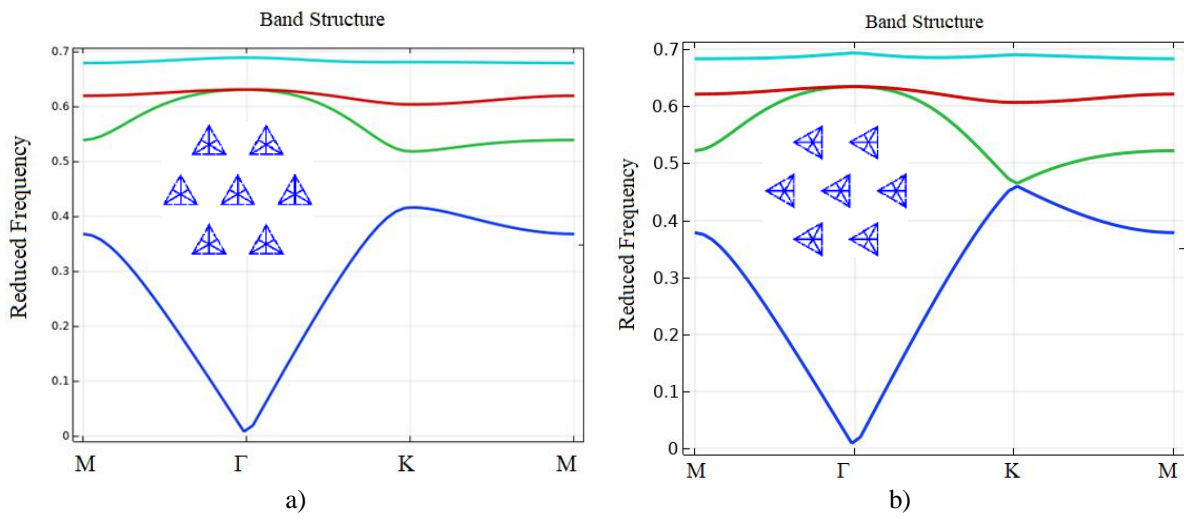


Fig. 4. Band structure of BiTeI triangular resonator.

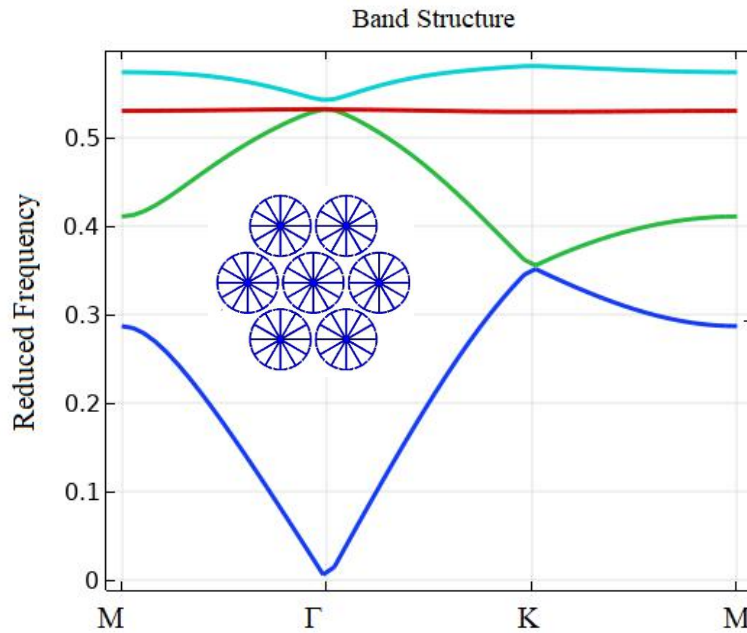


Fig. 5. Band structure of BiTeI circular resonator.

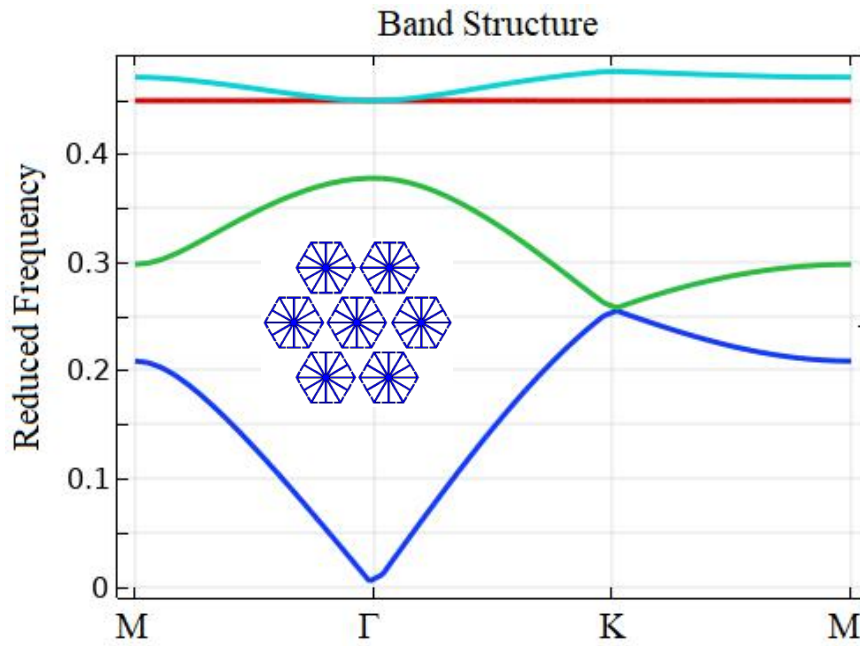


Fig. 6. Band structure of BiTeI hexagonal resonator.

Table 1.

Mid gap-gap size of different materials and cross-section of resonator.

	BiTeI		BiTeCl		BiTeBr	
	Mid Gap (a/c)	Gap Size (%)	Mid Gap (a/c)	Gap Size (%)	Mid Gap (a/c)	Gap Size (%)
Triangular resonator	0.475	31.579	0.395	1.113	0.468	20.771
90° rotated triangular resonator	0.485	6.186	-	-	-	-
Circular resonator	0.354	1.244	0.353	1.160	0.353	1.104
Hexagonal resonator	0.268	1.869	0.254	3.072	0.256	1.054

Table 1 shows the mid-gap, gap size values of the resonators in different sections made from BiTeI, BiTeCl and BiTeBr. As seen table 1 In the triangular resonator made of BiTeI, a band of 31.58% was observed in the range of 0.40-0.55, while a band of 6% was formed in the range of 0.47-0.50 when the resonator was rotated 90 degrees. While 1.2% band was formed in the range of 0.351-0.356 in the circular resonator, 2% band was formed in the range of 0.265-0.270 in the hexagonal resonator.

The resonator made of BiTeBr, a band of 1.11% was observed in the range of 0.393-0.397 in the

triangular, 1.16% band was formed in the range of 0.351-0.356 in the circular resonator and 3% band was formed in the range of 0.250-0.258 in the hexagonal resonator.

The resonator made of BiTeCl, a band of 20.7% was observed in the range of 0.420-0.517 in the triangular, 1.1% band was formed in the range of 0.351-0.355 in the circular resonator and 1.05% band was formed in the range of 0.255-0.257 in the hexagonal resonator.

Table 2.

Dirac cone frequencies and normalized frequencies

	BiTeI		BiTeCl		BiTeBr	
	(Hz)	(f.a/c ₀)	(Hz)	(f.a/c ₀)	(Hz)	(f.a/c ₀)
Triangular resonator	3727	0.4346	3369	0.3929	3569	0.4162
Triangular (90° rotated) resonator	3942	0.4597	-	-	-	-
Circular resonator	3012	0.3513	3013	0.3514	3368	0.3928
Hexagonal resonator	2186	0.2549	2187	0.2551	2187	0.255

4. CONCLUSIONS

In this study, the band structure of PnCs consisting of Helmholtz resonators of different cross-sections with triangular lattice was obtained and the Dirac cone formation frequencies were investigated. Acoustic metamaterials composed of Helmholtz

resonators enable Dirac cones to be obtained at the sub-wavelength scale. To investigate the effects of inclusions of different cross-sections on the Dirac cone, we created a unit cell in three different cross-sections, as shown in Fig. 2. Dirac cone frequencies in table 2 shows that rotation angle of inclusions affect the Dirac cone frequency.

-
- [1] S. Zhang, L. Yin and N. Fang. 2009 Focusing Ultrasound with an Acoustic Metamaterial Network *Phys. Rev. Lett.* 102: 194301. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.194301>
- [2] W. Wang, Y. Xie, A. Konneker, B.I. Popa and S.A. Cummer. 2014 Design and demonstration of broadband thin planar diffractive acoustic lenses *Appl. Phys. Lett.* 105: 101904. <https://doi.org/10.1063/1.4895619>
- [3] N. Kaina, F. Lemoult, M. Fink and G. Lerosey. 2015 Negative refractive index and acoustic superlens from multiple scattering in single negative metamaterial *Nature* 525: 77-81. <https://doi.org/10.1038/nature14678>
- [4] B.I. Popa, L. Zigoneanu and S.A. Cummer. 2011 Experimental Acoustic Ground Cloak in Air *Phys. Rev. Lett.* 106: 253901. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.253901>
- [5] X. Zhu, B. Liang, W. Kan, X. Zou and J. Cheng. 2011 Acoustic Cloaking by a Superlens with Single-Negative Materials *Phys. Rev. Lett.* 106: 014301. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.014301>
- [6] A. Sukhovich, B. Merheb, K. Muralidharan, J. Vasseur, Y. Pennec, P. Deymier and J. Page. 2009 Experimental and Theoretical Evidence for Subwavelength Imaging in Phononic Crystals *Phys. Rev. Lett.* 102: 154301. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.154301>
- [7] J. Zhu, J. Christensen, J. Jung, L. Martin-Moreno, X. Yin, L. Fok, X. Zhang and F. Garcia-Vidal. 2011 A holey-structured metamaterial for acoustic deep-subwavelength imaging *Nat. Phys.* 7: 52. <https://doi.org/10.1038/nphys1804>
- [8] J. Christensen and F.J.G. de Abajo. 2012 Anisotropic Metamaterials for Full Control of Acoustic Waves *Phys. Rev. Lett.* 108: 124301. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.124301>
- [9] M. Moleron and C. Daraio. 2015 Acoustic metamaterial for subwavelength edge detection *Nat. Commun.* 6: 8037. doi: 10.1038/ncomms9037 (2015).
- [10] Z. Liang and J. Li. 2012 Extreme Acoustic Metamaterial by Coiling Up Space *Phys. Rev. Lett.* 108: 114301. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.114301>
- [11] Y. Cheng, C. Zhou, B.G. Yuan, D.J. Wu, Q. Wei and X.J. Liu. 2015. Ultra-sparse metasurface for high reflection of low-frequency sound based on artificial Mie resonances *Nat. Mater.* 14: 1013. <https://doi.org/10.1038/nmat4393>
- [12] M.S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani. 1993 Acoustic band structure of periodic elastic composites *Phys. Rev. Lett.* 71: 2022. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.2022>
- [13] M.S. Kushwaha and P. Halevi. 1994 Band-gap engineering in periodic elastic composites *Appl. Phys. Lett.* 64: 1085. <https://doi.org/10.1063/1.110940>
- [14] M.S. Kushwaha, P. Halevi, G. Martinez, L. Dobrzynski and B. Djafari-Rouhani. 1994 Theory of acoustic band structure of periodic elastic composites *Phys. Rev. B* 49: 2313. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.49.2313>
- [15] Y. Pennec, J.O. Vasseur, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski and P.A. Deymier. 2010 Two-dimensional phononic crystals: Examples and applications *Surf. Sci. Rep.* 65: 229. <https://doi.org/10.1016/j.surfrep.2010.08.002>
- [16] L. Xie, B. Xia, J. Liu, G. Huang and J. Lei. 2017 An improved fast plane wave expansion method for topology optimization of phononic crystals *Int. J. Mech. Sci.* 120: 171. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2016.11.023>
- [17] Z. Liu, X. Zhang, Y. Mao, Y. Zhu, Z. Yang, C. Chan and P. Sheng. 2000 Locally Resonant Sonic Materials *Science* 289: 1734. DOI: 10.1126/science.289.5485.1734
- [18] H.H. Huang and C.T. Sun. 2009 Wave attenuation mechanism in an acoustic metamaterial with negative effective mass density *New J. Phys.* 11: 013003. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/11/1/013003>
- [19] H.H. Huang and C.T. Sun. 2011 Theoretical investigation of the behavior of an acoustic metamaterial with extreme Young's modulus *J. Mech. Phys. Solids* 59: 2070. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2011.07.002>
- [20] H.H. Huang and C.T. Sun. 2012 Anomalous wave propagation in a one-dimensional acoustic metamaterial having simultaneously negative mass density and Young's modulus *J. Acoust. Soc. Am.* 132: 2887. <https://doi.org/10.1121/1.4744977>
- [21] S.H. Lee and O.B. Wright. 2016 Anomalous wave propagation in a one-dimensional acoustic metamaterial having simultaneously negative mass density and Young's modulus *Phys. Rev. B* 93: 024302. <https://doi.org/10.1121/1.4744977>
- [22] N. Fang, D. Xi, J. Xu, M. Ambati, W. Srituravanich, C. Sun and X. Zhang. 2006 Ultrasonic metamaterials with negative modulus *Nat. Mater.* 5: 452. <https://doi.org/10.1038/nmat1644>
- [23] X. Hu, K.M. Ho, C. Chan and J. Zi. 2008 Homogenization of acoustic metamaterials of Helmholtz resonators in fluid *Phys. Rev. B* 77:

172301.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.172301>
- [24] V. Garcia-Chocano, R. Gracia-Salgado, D. Torrent, F. Cervera and J. Sanchez-Dehesa. 2012 Quasi-two-dimensional acoustic metamaterial with negative bulk modulus Phys. Rev. B 85: 184102.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.184102>
- [25] S.H. Lee, C.M. Park, Y.M. Seo, Z.G. Wang and C.K. Kim. 2010 Composite Acoustic Medium with Simultaneously Negative Density and Modulus Phys. Rev. Lett. 104: 054301.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.054301>
- [26] B. Xia, Y. Qin, N. Chen, D. Yu and C. Jiang. 2017. Dirac cones in two-dimensional acoustic metamaterials Sci. China: Technol. Sci. 60: 385.
<https://doi.org/10.1063/1.4998438>
- [27] Y. Wu, Y. Lai and Z.Q. Zhang. 2007. Effective medium theory for elastic metamaterials in two dimensions Phys. Rev. B 76: 205313.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.205313>
- [28] X. Zhou and G. Hu. 2009. Analytic model of elastic metamaterials with local resonances Phys. Rev. B 79: 195109.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.195109>
- [29] Z. Yang, J. Mei, M. Yang, N. Chan and P. Sheng. 2008 Membrane-Type Acoustic Metamaterial with Negative Dynamic Mass Phys. Rev. Lett. 101: 204301 (2008).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.204301>
- [30] C.M. Park, J.J. Park, S.H. Lee, Y.M. Seo, C.K. Kim and S.H. Lee. 2011 Amplification of Acoustic Evanescent Waves Using Metamaterial Slabs Phys. Rev. Lett. 107: 194301.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.194301>
- [31] Y. Gu, Y. Cheng, J.S. Wang and X. J. Liu. 2015 Controlling sound transmission with density-near-zero acoustic membrane network J. Appl. Phys. 118: 024505.
<https://doi.org/10.1063/1.4922669>
- [32] S.R. Zandbergen and de M.J. Dood. 2010 Experimental Observation of Strong Edge Effects on the Pseudodiffusive Transport of Light in Photonic Graphene Phys. Rev. Lett. 104: 043903.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.043903>
- [33] Y.R. Poo, X. Wu, Z. Lin, Y. Yang and C.T. Chan. 2011 Experimental Realization of Self-Guiding Unidirectional Electromagnetic Edge States Phys. Rev. Lett. 106: 093903.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.093903>
- [34] P. Wang, L. Lu and K. Bertoldi. 2015 Topological Phononic Crystals with One-Way Elastic Edge Waves Phys. Rev. Lett. 115: 104302.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.104302>
- [35] Z. Yang, F. Gao, X. Shi, X. Lin, Z. Gao, Y. Chong and B. Zhang. 2015 Topological Acoustics Phys. Rev. Lett. 114: 114301.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.114301>
- [36] D. Torrent, D. Mayou and J. Sanchez-Dehesa. 2013 Elastic analog of graphene: Dirac cones and edge states for flexural waves in thin plates Phys. Rev. B 87: 115143.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.115143>
- [37] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Katsnelson M.I, Grigorieva I.V, Dubonos S.V & A.A. Firsov. 2005 Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene Nature 438: 197.
<https://doi.org/10.1038/nature04233>
- [38] K.I. Bolotin, K.J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim and H.L. Stormer. 2008 Ultrahigh electron mobility in suspended graphene Solid State Commun. 146: 351.
<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2008.02.024>
- [39] F. Liu, Y. Lai, X. Huang and C.T. Chan. 2011 Dirac cones at $k=0$ in phononic crystals Phys. Rev. B 84, 224113.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.224113>
- [40] X. Zhang and Z. Liu. 2008 Extremal Transmission and Beating Effect of Acoustic Waves in Two-Dimensional Sonic Crystals Phys. Rev. Lett. 101: 264303.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.264303>
- [41] D. Malko, C. Neiss, F. Vines and A. Gorling. 2012 Competition for Graphene: Graphynes with Direction-Dependent Dirac Cone Phys Rev Lett 108: 086804.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.086804>
- [42] D. Torrent and J. Sanchez-Dehesa. 2012 Acoustic Analogue of Graphene: Observation of Dirac Cones in Acoustic Surface Waves Phys Rev Lett 108: 174301 (2012).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.174301>
- [43] J. Lu, C. Qiu, S. Xu, Y. Ye, M. Ke and Z. Liu. 2014 Dirac cones in two-dimensional artificial crystals for classical waves Phys Rev B 89: 134302.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.134302>
- [44] Y. Li, Y. Wu and J. Mei. 2014 Double Dirac cones in phononic crystals Appl Phys Lett 105: 014107.
<https://doi.org/10.1063/1.4890304>
- [45] Y. Li and J. Mei. 2015 Double Dirac cones in two-dimensional dielectric photonic crystals Opt Express 23: 12089.
<https://doi.org/10.1364/OE.23.012089>
- [46] K. Sakoda. 2012 Double Dirac cones in triangular-lattice metamaterials Opt Express 20: 9925. <https://doi.org/10.1364/OE.20.009925>
- [47] H. Dai, T. Liu, J. Jiao, B. Xia and D. Yu. 2017 Double Dirac cone in two-dimensional phononic crystals beyond circular cells Journal of Applied Physics 121: 135105.
<https://doi.org/10.1063/1.4979852>
- [48] Z.G. Chen, X. Ni, Y. Wu, C. He, X.C. Sun, L.Y. Zheng, M.H. Lu and Y.F. Chen. 2014 Accidental degeneracy of double Dirac cones in a phononic crystal Sci Rep 4: 4613. DOI: 10.1038/srep04613

SECOND HARMONIC GENERATION IN LOCALLY RESONANT NONLINEAR WEYL SEMIMETAL BASED ACOUSTIC METAMATERIALS: FINITE ELEMENT ANALYSIS

ZAFER OZER¹, CHINGIZ AKHUNDOV², AMIRULLAH M. MAMEDOV^{3,4},
EKMEL OZBAY³

¹*Mersin Vocational High School Electronic and Automation Department,
Mersin University, Turkiye*

²*Institute for Physical Problems, Baku State University, Baku, Azerbaijan*

³*Nanotechnology Research Center (NANOTAM), Bilkent University, Turkiye*

⁴*International Scientific Center, Baku State University, Baku, Azerbaijan*

Weyl semimetal based locally resonant metamaterials, which have applications such as imaging and sound / vibration isolation, wave focusing, are high performance materials with superior properties that are obtained artificially. In this study, second harmonic generation due to the energy induced in nonlinear locally resonant metamaterials is demonstrated by the finite element method. The second energy transfer mechanism has recently been arises from a nonlinear interaction between propagating and evanescent waves triggered by autoparametric resonance manifesting itself through the appearance of a subharmonic transmission attenuation zone.

Keywords: Second Harmonic Generation, Acoustic Metamaterials, Metamaterials

PACS: 43.25.Rq; 43.25.Jh; 43.20.Mv

INTRODUCTION

Metamaterials are artificial materials designed to achieve unusual properties not found in natural materials [1,2]. These materials, which have band gaps in which the propagation of acoustic/elastic waves at certain frequencies are prevented, have attracted the attention of researchers because of their potential application areas [3-5]. These materials have potential applications such as wide band gap at low frequencies, noise and vibration reduction [5], wave reduction, and high-resolution acoustic imaging.

In these periodic structures band gaps at lower wavelengths can be obtained by using locally resonant unit cells where band gaps are formed due to multiple scattering [6-8]. Locally resonant metamaterials have enabled new applications such as acoustic diodes [14], logic gates [15] due to their non-linear operating region [9-13].

Despite the great interest of researchers, there are few studies on nonlinear metamaterials due to the difficulty of modeling [16-20]. In some of these limited studies, resonator structures with irreversible energy transfer mechanism triggered by non-linear energy sinks have been studied [21-24].

Also, few papers have examined wave propagation in materials with nonlinear periodic resonators. In such structures, two types of mechanisms, called intermodal and modal inner tunneling, can occur. This mechanism [25-30], which is based on the energy transition between modes in propagating waves, which was first put forward by Lazarov and Jensen [31], has been theoretically studied [25] and confirmed experimentally [26].

The other theoretically predicted [32] energy transfer mechanism arises from the formation of a subharmonic transmission attenuation region, which

provides new, advanced tools for wave attenuation and control, resulting from the non-linear interaction between propagated and vanishing waves generated by the resonance mechanism. Nonlinear locally resonant metamaterials consisting of rubber between the resonator and the base material were investigated theoretically and numerically [32].

In this study, a locally resonant structure made of $ZrTe_5$ – Weyl semimetal was designed, inspired by the locally resonant designs commonly used in micromechanical systems [43-48], and the existence of second harmonic generation was investigated by the finite element method.

MATERIAL METHOD

The designed metamaterial with spring-mass mechanism with local resonance consists of the periodic arrangement of the unit cells in figure 1.a. In this structure, the resonator springs must be non-linear in order for the sub-harmonic weakening region to occur. Silva et al. demonstrated by [32]. It can be accomplished by different methods [39] such as contact dynamics [36-38], electrostatic actuation [33-35].

Examples of studies on second-order non-linear resonators are micromechanical cantilever system [40], hanging cables [41], M-shaped resonator [42] arc resonators [43-48] not connected with metamaterials.

According to the Bloch-Floquet periodicity condition [49], the displacement field u can be expressed as:

$$u(x, k, t) = Ue^{i(k \cdot x - \omega t)} \quad (1)$$

where U denotes a periodic Bloch displacement vector, x position vector, k wave vector, ω frequency. Since the longitudinal waves propagating in the chain of unit

cells are taken into account, the band structure of the Brillouin region along the Γ -X path was obtained using the commercial software COMSOL Multiphysics. Bloch-Floquet periodic boundary conditions are applied along the x -direction on the left and right sides of the 3D unit cell, while all other surfaces are released.

The unit cell of the locally resonant structure seen in Figure 1.a consists of an internal mass of Weyl semimetal – ZrTe₅ (Young modulus $E = 63$ GPa and density $\rho = 3.400$ kg/m³) connected to the main frame with a single beam. In the unit cell, $h=40$ mm, $w=20$ mm, $d=2.75$ mm, $r=4$ mm, $s=0.25$ mm, $l=13.25$ mm and its thickness in the z direction is 5 mm.

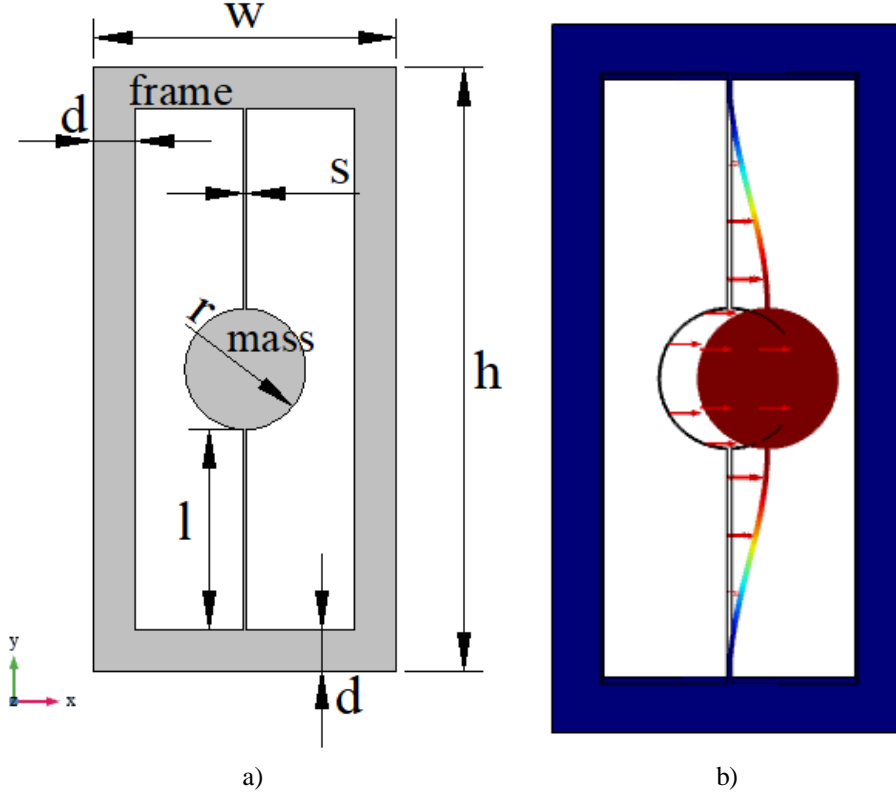


Fig. 1. a) Unit cell of a metamaterial with nonlinear local resonance b) resonance mode of the 3D unit cell (416.89 MHz)

Due to the design of the unit cell, the properly excited structure transmits the wave in the x -direction. The source of the nonlinear terms in force-displacement relations is the beams holding the mass in the unit cell.

As seen in Figure 1.b, the back-and-forth movements of the beam-bound mass in the unit cell explain the nonlinear behavior of the structure required to provide the sub-harmonic resonance energy exchange mechanism.

The degree of freedom in the unit cell is important for designing nonlinear locally resonant metamaterials. By changing the parameter h , which determines the preliminary deflection of the beam in the unit cell, the magnitude of the quadratic term relative to the cubic term can be controlled and thus the desired design can be obtained. The second harmonic is obtained by changing the desired h parameter in the proposed structure.

LINEAR BEHAVIOR

The locally resonant unit cell shown in Figure 1.a was designed and simulated in COMSOL. Floquet Periodicity Boundary conditions were applied to the x -

direction walls of the unit cell, while the other surfaces were released.

In Figure 2.a, the band structure of the unit cell obtained by using COMSOL Multiphysics software [50-54] is shown, it is seen that the band gap occurs around the natural frequency of the in-plane bending mode according to the band structure. Figure 2.b shows the mode shapes of the unit cell at different frequencies.

A finite structure in the form of a chain consisting of 50-unit cells was designed to ensure the interaction between the propagating and disappearing waves and to represent the dynamic behavior of the resonators.

The finite structure would be excited with a prescribed displacement from the left end with a displacement of 10^{-6} m in the x direction. Parametric scanning was performed between 200-900 Hz to obtain the transmission diagram. By obtaining the displacements on the left and right sides of the finite structure in Figure 2, the transmission diagram in Figure 3 was obtained according to the relation $20 \cdot \log_{10}(U_2/U_1)$.

Here, U_1 denotes the displacement at the left margin, and U_2 the displacement at the right margin. As seen in Figure 3, there are two modes that result in an increase in the input signal around the frequency at which the transmission decreases.

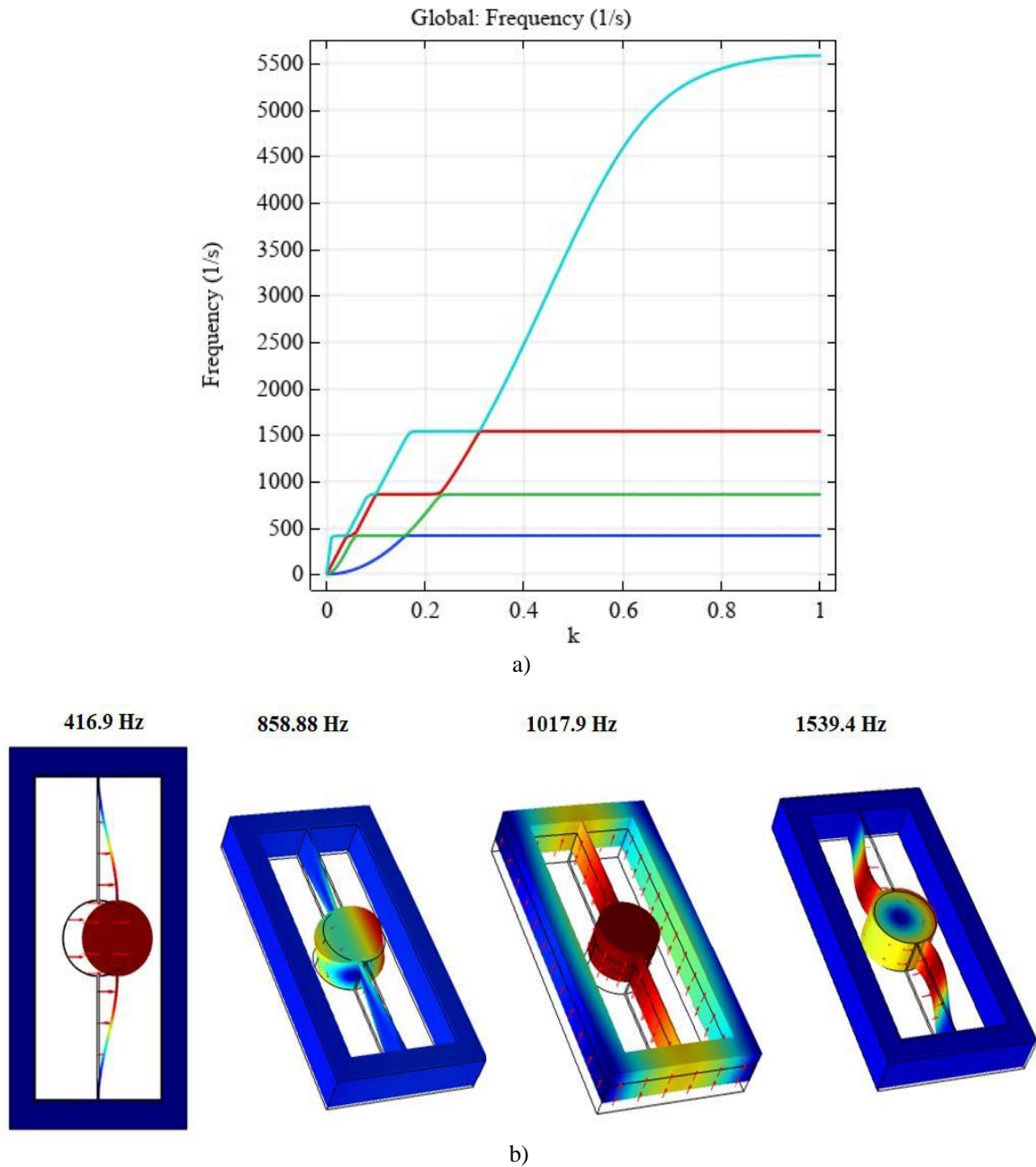


Fig. 2 a) The band structure of the unit cell in the $\Gamma - X$ direction, b) the mode shapes of the unit cell

NONLINEAR BEHAVIOR

In locally resonant metamaterials, the resonator generates a band gap and a vanishing wave. Harmonic excitation at one end of the metamaterial generates the same frequency wave propagation and near-field waves [32].

When there is a second-order non-linear interaction between the local resonator and the main frame and there is a resonance frequency around half the excitation frequency, the sub-harmonic wave and the propagating waves match, and in nonlinear systems, the energy is transferred from the advancing wave to the vanishing wave [32]. In this study, the propagating

initial wave around 850 Hz was transformed into a vanishing wave at a quasi-harmonic frequency around 440 Hz in the band gap close to the local resonance frequency.

The chain-like finite structure consisting of unit cells with resonators excited from the left side reflects elasto-acoustic waves and prevents their progression in a finite structure. Thus, the energy flow to the other (right) end of the metastructure is significantly reduced.

The transmission diagram of the finite structure consisting of 50-unit cells, obtained by using COMSOL Multiphysics, is shown in figure 3. The normalized displacement obtained at the rightmost edge of the finite structure is shown in Figure 3.b.

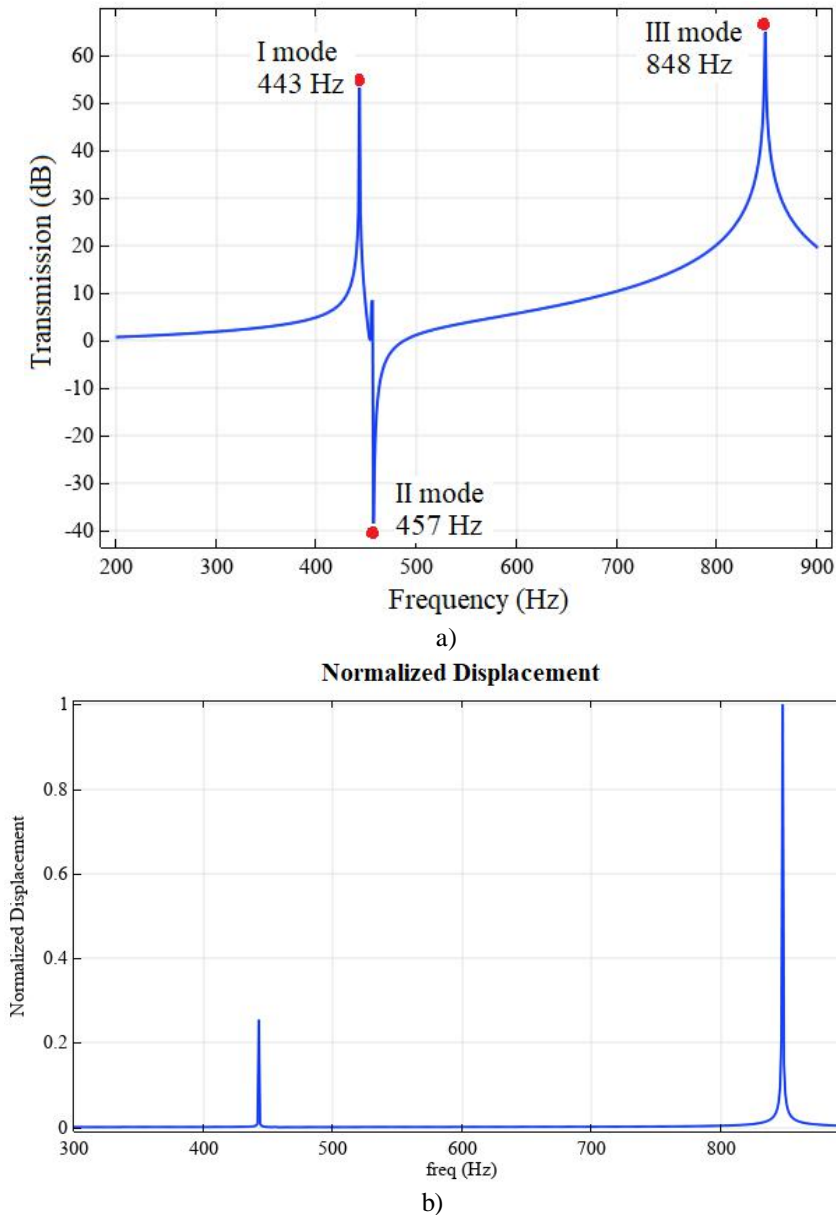


Fig. 3. a) Transmission diagram of the finite structure b) normalized displacement of the right edge of the finite structure.

CONCLUSION

In conclusion, we numerically investigated nonlinear propagation and second harmonic generation in acoustic metamaterial with periodic array of elastic plates with nonlinear resonators. According to the results obtained, the energy exchange between the sub-harmonic wave and the first wave is seen with the effect of autoparametric resonance. A unit cell metastructure consisting of a nonlinear resonator frame with

autoparametric resonance to provide sub-harmonic attenuation is designed. The results showed that

- High performance nonlinear locally resonant metamaterials can be developed.
- Tunable metamaterials with amplitude-dependent attenuation regions can be developed.
- New applications such as multi-harmonic tunable filters and display devices can be developed.

[1] T. Chen, W. Li, D. Yu. A tunable gradient acoustic metamaterial for acoustic sensing, *Extreme Mechanics Letters*, 49, 101481, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.eml.2021.101481>

[2] C. Yang, T. Zhong, J. Li S. You, S. Yang, H. Zhang, Z. Zheng. Extended tube acoustic metamaterial: Its modeling and application to a kitchen hood, *Applied Acoustics*, 185, 108398,

2022. <https://doi.org/10.1016/j.apacoust.2021.108398>

[3] M. Moscatelli, R. Ardito, L. Driemeier, C. Comi. Band-gap structure in two- and three-dimensional cellular locally resonant materials, *Journal of Sound and Vibration*, 454,73-84, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2019.04.027>

- [4] G.Y. Zhang, X.L. Gao. Elastic wave propagation in 3-D periodic composites: Band gaps incorporating microstructure effects, *Composite Structures*, 204, 920-932, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2018.07.115>
- [5] S. Kacin, M. Ozturk, U.K. Sevim, B.A. Mert, Z. Ozer, O. Akgol, E. Unal, M. Karaaslan. Seismic metamaterials for low-frequency mechanical wave attenuation, *Natural Hazards*, 107(1), 213–229, 2021. doi: 10.1007/s11069-021-04580-5
- [6] X. Tian, W. Chen, R. Gao, S. Liu. Merging Bragg and Local Resonance Bandgaps in Perforated Elastic Metamaterials with Embedded Spiral Holes, *Journal of Sound and Vibration*, 500, 116036, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2021.116036>
- [7] N. Bachelard, C. Ropp, M. Dubois, R. Zhao, Y. Wang and X. Zhang. Emergence of an enslaved phononic bandgap in a non-equilibrium pseudo-crystal, *Nature Materials*, 16, 808–813 (2017). <https://doi.org/10.1038/nmat4920>
- [8] A. Mehaney, A. M. Ahmed. Locally Resonant Phononic Crystals at Low frequencies Based on Porous SiC Multilayer. *Sci Rep* 9, 14767, 2019. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-51329-z>
- [9] X. Tian, W. Chen, R. Gao, S. Liu. Merging Bragg and Local Resonance Bandgaps in Perforated Elastic Metamaterials with Embedded Spiral Holes, *Journal of Sound and Vibration*, 500, 116036, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2021.116036>
- [10] F. Basone, O. S. Bursi, F. Aloschi and G. Fischbach. Vibration mitigation of an MDoF system subjected to stochastic loading by means of hysteretic nonlinear locally resonant metamaterials, *Scientific Reports* volume 11, 9728, 2021. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-88984-0>
- [11] R.L. Thomes, J.A. Mosquera-Sánchez, C. De Marqui Jr. Bandgap widening by optimized disorder in one-dimensional locally resonant piezoelectric metamaterials, *Journal of Sound and Vibration*, 512, 116369, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2021.116369>
- [12] K. Vorotnikov, Y. Starosvetsky, G. Theocharis, P.G. Kevrekidis. Wave propagation in a strongly nonlinear locally resonant granular crystal, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 365, 27-41, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.physd.2017.10.007>
- [13] L. Liu, G. James, P. Kevrekidis, A. Vainchtein. Breathers in a locally resonant granular chain with precompression, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 331, 27-47, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.physd.2016.05.007>
- [14] F. Li, P. Anzel, J. Yang et al. Granular acoustic switches and logic elements. *Nat Commun* 5, 5311, 2014. <https://doi.org/10.1038/ncomms6311>
- [15] Z. Ren, L. Ji, R. Tao, M. Chen, Z. Wan, Z. Zhao, D. Fang. SMP-based multi-stable mechanical metamaterials: From bandgap tuning to wave logic gates, *Extreme Mechanics Letters*, 42, 101077, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.eml.2020.101077>
- [16] O.S. Bursi, F. Basone, M. Wenzel. Stochastic analysis of locally resonant linear and hysteretic metamaterials for seismic isolation of process equipment, *Journal of Sound and Vibration*, 510, 116263, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2021.116263>
- [17] F. Zeighami, A. Palermo, A. Marzani. Rayleigh waves in locally resonant metamaterials, *International Journal of Mechanical Sciences*, 195, 106250, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2020.106250>
- [18] M. Vakilifard, M.J. Mahmoodi. Evanescent waves attenuation and stiffness enhancement of viscoelastic locally resonant metamaterials by nanofiller addition- a multi-scale $k(\omega)$ based modeling, *Mechanics of Materials*, 160, 103969, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2021.103969>
- [19] M.A. Lewińska, V.G. Kouznetsova, J.A.W. van Dommelen, A.O. Krushynska, M.G.D. Geers. The attenuation performance of locally resonant acoustic metamaterials based on generalised viscoelastic modelling, *International Journal of Solids and Structures*, 126–127, 163-174, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2017.08.003>
- [20] S. Lin, Y. Zhang, Y. Liang, Y. Liu, C. Liu, Z. Yang. Bandgap characteristics and wave attenuation of metamaterials based on negative-stiffness dynamic vibration absorbers, *Journal of Sound and Vibration*, 502, 116088, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2021.116088>
- [21] A. Luongo et al. Dynamic analysis of externally excited NES-controlled systems via a mixed Multiple Scale/Harmonic Balance algorithm. *Nonlinear Dyn.* 70, 2049, 2012. DOI:10.1007/s11071-012-0597-6
- [22] C. Wang, S. Tawfikci, A. F. Vakakis. Irreversible energy transfer, localization and non-reciprocity in weakly coupled, nonlinear lattices with asymmetry, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 402, 132229, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.physd.2019.132229>
- [23] R. Bellet, B. Cochelin, P. Herzog, P.-O. Mattei. Experimental study of targeted energy transfer from an acoustic system to a nonlinear membrane absorber, *Journal of Sound and Vibration*, 329 (14), 2768-2791, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2010.01.029>
- [24] M. Gzal, A.F. Vakakis, L.A. Bergman, O.V. Gendelman. Extreme intermodal energy transfers through vibro-impacts for highly effective and rapid blast mitigation, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 103, 106012, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2021.106012>
- [25] E.W. Chen, J.F. Yuan, N.S. Ferguson, K. Zhang, W.D. Zhu, Y.M. Lu, H.Z. Wei. A wave solution

- for energy dissipation and exchange at nonclassical boundaries of a traveling string, *Mechanical Systems and Signal Processing*, 150, 107272, 2021.
<https://doi.org/10.1016/j.ymssp.2020.107272>
- [26] *I. Arretche and K.H. Matlack*. Experimental Testing of Vibration Mitigation in 3D-Printed Architected Metastructures. *ASME. J. Appl. Mech.*, 86(11): 111008, 2019. <https://doi.org/10.1115/1.4044135> Fang, X. et al. Wave propagation in nonlinear metamaterial multiatomic chains based on homotopy method. *AIP Adv.* 6, 121706 (2016). DOI: 10.1063/1.4971761
- [27] *X. Fang et al.* Wave propagation in nonlinear metamaterial multiatomic chains based on homotopy method. *AIP Adv.* 6, 121706 (2016). DOI: 10.1063/1.4971761
- [28] *X. Fang et al.* Wave propagation in one-dimensional nonlinear acoustic metamaterials. *New J. Phys.* 19, 053007 (2017). <https://doi.org/10.1088/1367-2630/aa6d49>
- [29] *W. Jiao et al.* Intermodal and subwavelength energy trapping in nonlinear metamaterial waveguides. *Phys. Rev. Appl.* 10, 024006 (2018). <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.10.024006>
- [30] *W. Jiao et al.* Mechanics of inter-modal tunneling in nonlinear waveguides. *J. Mech. Phys. Solids* 111, 1–17 (2018). DOI: 10.1016/j.jmps.2017.10.008
- [31] *B.S. Lazarov et al.* Low-frequency band gaps in chains with attached non-linear oscillators. *Int. J. Non-Linear Mech.* 42, 1186–1193 (2007). DOI: 10.1016/j.ijnonlinmec.2007.09.007
- [32] *P.B. Silva et al.* Emergent subharmonic band gaps in nonlinear locally resonant metamaterials induced by autoparametric resonance. *Phys. Rev. E* 99, 063003 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevE.99.063003
- [33] *I.V. Uvarov*. Migration of adhesive material in electrostatically actuated MEMS switch, *Microelectronics Reliability*, 125, 114372, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.microrel.2021.114372>
- [34] *Z. Li et al.* Nonlinear behavior analysis of electrostatically actuated multilayer anisotropic microplates with residual stress, *Composite Structures*, 255, 112964, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.112964>
- [35] *D.I. Caruntu, M.A. Botello, C.A. Reyes, J. Beatriz*. Frequency–amplitude response of superharmonic resonance of second order of electrostatically actuated MEMS cantilever resonators, *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 133, 103719, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.ijnonlinmec.2021.103719>
- [36] *A. Guerrieri. et al.* An investigation on the effects of contact in MEMS oscillators. *J. Microelectromech. Syst.* 27(6), 963–972 (2018). DOI: 10.1109/JMEMS.2018.2875338
- [37] *T.-V. Hoang, L.Wu, S. Paquay, J.-C. Golinval, M. Arnst, L. Noels*. A computational stochastic multiscale methodology for MEMS structures involving adhesive contact, *Tribology International*, 110, 401-425, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.triboint.2016.10.007>
- [38] *W.S.H. Wong, C.H.Lai*. Mitigation of MEMS switch contact bouncing: Effectiveness of dual pulse actuation waveforms and robustness against variations in switch and waveform parameters, *Sensors and Actuators A: Physical*, 194, 188-195, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2013.02.011>
- [39] *M. Baiù, V. Ferrari, D. Marioli, Em. Sardini, M. Serpelloni, A. Taroni*. Contactless electromagnetic excitation of resonant sensors made of conductive miniaturized structures, *Sensors and Actuators A: Physical*, 148 (1), 44-50, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2008.06.034>
- [40] *M. Hassen, H.M. Sedighi*. Rippling effect on the structural response of electrostatically actuated single-walled carbon nanotube based NEMS actuators, *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 87, 97-108, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.ijnonlinmec.2016.09.009>
- [41] *Y. Zhao, et al.* Analytical solutions for resonant response of suspended cables subjected to external excitation. *Nonlinear Dyn.* 78, 10171032 (2014). <https://doi.org/10.1007/s00707-018-2224-1>
- [42] *S. Leadenham, et al.* M-shaped asymmetric nonlinear oscillator for broadband vibration energy harvesting: harmonic balance analysis and experimental validation. *J. Sound Vibr.* 333, 62096223 (2014). DOI: 10.1016/j.jsv.2014.06.046
- [43] *Md A. Al Hafiz, S. Tella, N. Alcheikh, H. Fariborzi, M. I. Younis*. Axially modulated arch resonator for logic and memory applications, *Mechatronics*, 56,254-260, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.mechatronics.2018.01.004>
- [44] *M. Soltan Rezaee, M. Bodaghi and A. Farrokhhabadi*. A thermosensitive electromechanical model for detecting biological particles. *Sci Rep* 9, 11706, 2019. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-48177-2>
- [45] *B. Li, X. Wang, H. Jung et al.* Printing Highly Controlled Suspended Carbon Nanotube Network on Micro-patterned Superhydrophobic Flexible Surface. *Sci Rep* 5, 15908, 2015. <https://doi.org/10.1038/srep15908>
- [46] *A.Z. Hajjaj, F.K. Alfosail, M.I. Younis*. Two-to-one internal resonance of MEMS arch resonators, *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 107, 64-72, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.ijnonlinmec.2018.09.014>
- [47] *V. Zega, P.B. Silva, M.G.D. Geers &*

- V.G. *Kouznetsova*. Experimental proof of emergent subharmonic attenuation zones in a nonlinear locally resonant metamaterial, *Scientific Reports*, 10, 12041, 2020. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-68894-3>
- [48] *M. Ghommem, V. Puzyrev, F. Najjar*. Deep learning for simultaneous measurements of pressure and temperature using arch resonators. *Applied Mathematical Modelling*. 93, 728-744, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2021.01.006>
- [49] *L. Liu, M.I. Hussein*. Wave Motion in Periodic Flexural Beams and Characterization of the Transition Between Bragg Scattering and Local Resonance, *J. Appl. Mech.* 79(1): 011003, 2012. <https://doi.org/10.1115/1.4004592>
- [50] *L. D'Alessandro, V. Zega, R. Ardito, et al.* 3D auxetic single material periodic structure with ultra-wide tunable bandgap. *Sci Rep* 8, 2262, 2018. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-19963-1>
- [51] *L. D'Alessandro, A.O. Krushynska, R. Ardito et al.*, A design strategy to match the band gap of periodic and aperiodic metamaterials. *Sci Rep* 10, 16403, 2020. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-73299-3>
- [52] *J. Priester*. Acoustic Micro-Slitted Resonant Metamaterials Stop Band Optimization and Structural-Aeroacoustic Characterization, Master's Thesis, Eindhoven University of Technology, Department of Mechanical Engineering, Eindhoven, November 11, 2020
- [53] *S. Hossain, S. Hossain*. Mathematical and computational modeling for the determination of optical parameters of breast cancer cell, *Electromagnetic Biology and Medicine*, 40:4, 447-458, 2021. <https://doi.org/10.1063/1.5031513>
- [54] *M. Miniaci, R. K. Pal, R. Manna, and M. Ruzzene*. Valley-based splitting of topologically protected helical waves in elastic plates, *Phys. Rev. B*, 100, 024304, 2019. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.024304>

SYNTHESIS OPTIMIZATION AND CHARACTERIZATION OF Fe OXIDE NANOPARTICLES

N.N. MUSAYEVA, S.A. GULUZADE, H.Kh. KHALILOVA, B.M. IZZATOV,
M.T. ALIZADE

*Azerbaijan Ministry of Science and Education, Institute of Physics, H. Javid ave, 131,
AZ1143, Baku, Azerbaijan*

Corresponding author: Guluzade Sevinj Allahverdi – sgseva92@gmail.com

The paper discusses the results of researches carried out to define the optimal conditions of synthesis of Fe oxide nanoparticles using a simple and low-cost method. In addition, the results derived from XRD and IR spectroscopy analyses conducted for the characterization of the obtained nanoparticles are provided.

Keywords: Fe₂O₃, sensor, sol-gel, nanoparticles.

INTRODUCTION

A large number of researches have been devoted to the study of the electrical and optical properties of nanostructured materials during the last decades. Special optical and electronic properties were defined as compared to those of bulk materials. The study of such materials is interesting not only from a fundamental scientific viewpoint, at the same time they have been applied in a wide range of our lives. This is due to their electronic structure, chemical and mechanical stability, and the sensitivity to the ambient conditions.

Metal-oxide nanoparticles (NPs) are among the most used nanostructured materials (NMs). The metal oxide NPs (ZnO, TiO₂, Ga₂O₃, SnO₂, NiO and CuO, etc.) have been effectively applied as optical and electrical-resistive sensors [3-6], catalysts [7] due to their strong absorption properties, large surface area, high porosity and good permeability [8,9].

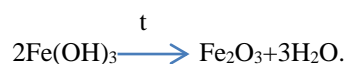
Transition metal oxides RuO₂, MnO₂, CuO, NiO, and Fe₂O₃ [10-15], which have excellent redox reversibility, high theoretical specific capacitance [10] were successfully applied in supercapacitors as electrodes [11,12], potential anode materials for Li-ion batteries, mainly due to their excellent stability and safety features [13]. From this end of view, NPs of NiO and Fe₂O₃ have attracted considerable attention. Fe₂O₃ is also attractive for its low cost, abundance, nontoxicity, and eco-friendliness [14,15].

There are different ways of the synthesis of Fe₂O₃ and NiO NPs, such as spray pyrolysis [16,17], hydrothermal [18], Sol-gel [19] methods. Both the synthesis methods and costs of the starting materials significantly influence the end material cost, which are important in the developing and commercialization of the fabricated device.

In this work, we presented the results of the researches carried out to develop a simple and cost-effective method for the synthesis of Fe oxide NPs. The resulting powdery nanomaterial was characterized by XRD, Raman, and IR spectroscopy.

EXPERIMENTAL

Nanosize particles of iron oxide (Fe₂O₃) are synthesized by a simple Sol-gel method. 0.1 M FeCl₃·6H₂O was dissolved in 100 ml deionized water (Solution 1) and 5M sodium hydroxide (NaOH) was dissolved in 16 ml DI water (Solution 2). First, the solution 1 is stirred in 1500/min speed with heating. When the temperature of the Solution 1 was increased to 90 °C, the Solution 2 was added to it dropwise under constant magnetic stirring during 1 h to maintain the pH at 7 and the obtained solution was stirred constantly for 1 h until the temperature was decreased to 25°C. The obtained precipitate was recovered by centrifugation, washed several times with DI water to remove chloride and other unreacted ions, and then dried in the open air at 150 °C. Finally, the samples were annealed at 300 and 500°C for 3 h in the open air to obtain dark reddish colored powders Fe₂O₃ nanoparticles from Fe(OH)₃ according to the reaction:



All the samples are characterized by X-Ray diffraction method for determination crystallinity and formatted phases and the particle size using D2 Phaser diffractometer from Bruker with CuK α radiation of wavelength 1.5406 Å. IR spectroscopy methods were used for using Irrafinity 1 FRIR spectrometer from Shimadzu Japan in 2,5 – 25 mkm of wavelength range

RESULTS

X-Ray diffraction analysis has been performed to identify the phase formation and crystallinity of the obtained powder like Fe-O compound by two calcination temperatures. Fig.1 shows that better crystallinity is obtained at 500°C. The strong diffraction peaks are compared with Standard JCPDS card no.86-0550, which confirm the crystallization in rhombohedral hexagonal phase α -Fe₂O₃. The extra small peaks are explained with remained impurities. The average crystallite size was calculated using Sherrer's formula ($L = k \cdot \lambda / \beta \cos \theta$, where β – is full width at half maximum), which is 10 nm.

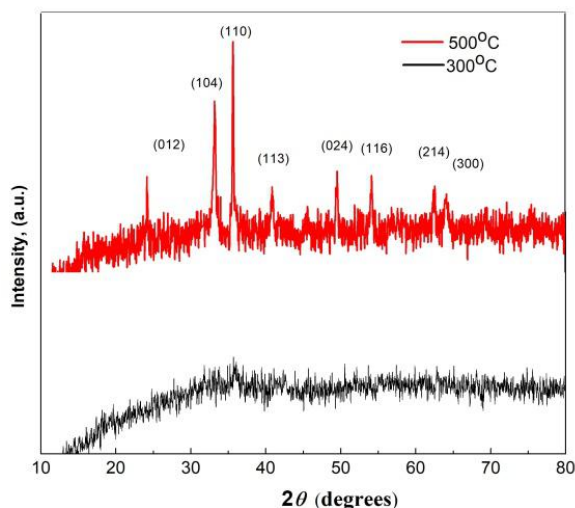


Fig.1. X-ray pattern of α -Fe₂O₃ NPs at different calcination temperatures.

IR SPECTROSCOPY ANALYSIS

Fig 2 shows IR spectra of Fe oxide in three different (300, 500 and 700°C) calcination temperatures. The bands near 3409 cm⁻¹, 1624cm⁻¹, 1401 cm⁻¹ and 600 cm⁻¹ are observed in all spectra. The bands at about 540 cm⁻¹ and 465-455 cm⁻¹ are observed only in the samples calcinated at 500 and 700°C.

The stretching vibration of the O-H group characterizes by wide band at 3409 cm⁻¹, and

1624cm⁻¹ may be attributed to the bending vibration of the H-O-H group, and both due to physisorbed water molecules on the surface. The band at 1401 cm⁻¹ corresponds to C-O-H stretching. The formation of α -Fe₂O₃ is proved by presence of the bands at about 540 cm⁻¹ and 460 cm⁻¹ in the calcined samples [20,21]. The band at 600 cm⁻¹, which is attributed Fe-O vibration shows presence of γ -Fe₂O₃ phase, while its characterized line (at 430 cm⁻¹) is not observed on the graphs, which require future analysis.

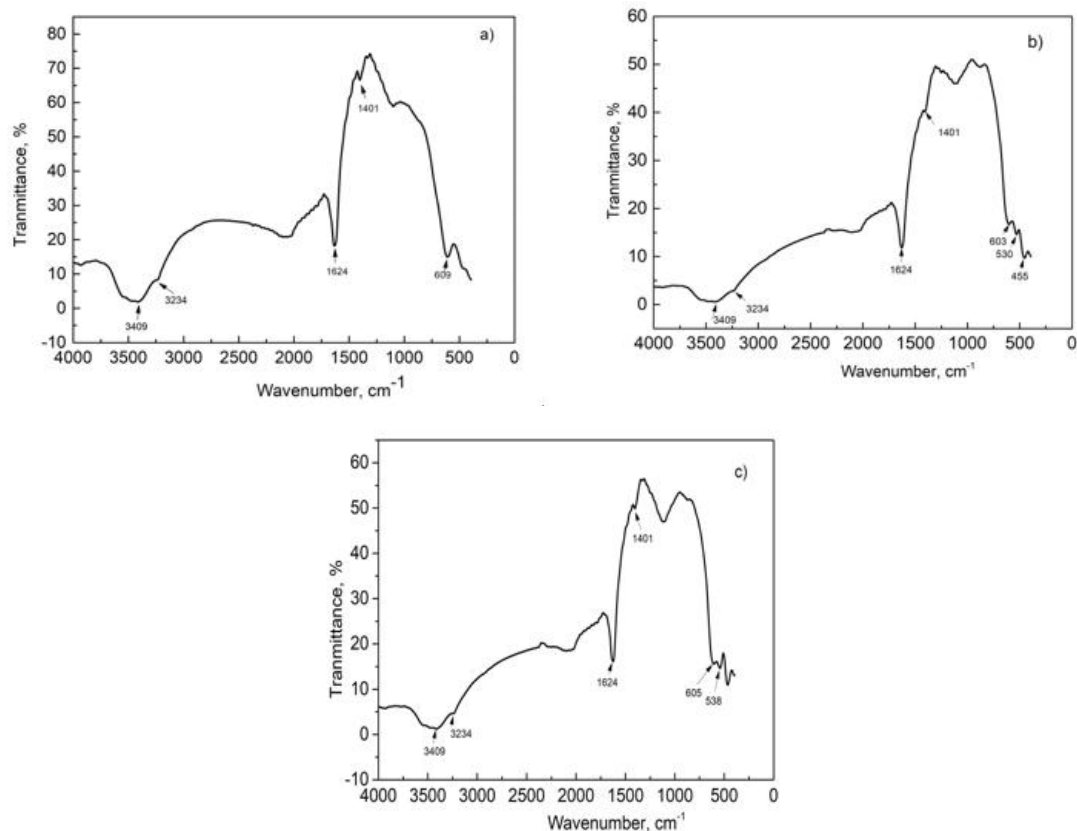


Fig.2. FT-IR spectra of Fe oxide nanoparticles calcined in different temperatures: (a) 300°C; (b) 500°C; (c) 700°C .

CONCLUSION

Optimal and cost-effective method to synthesize of Fe oxide nanoparticles have been developed. Both

analyzing X-ray diffraction and IR spectroscopy methods showed that α -Fe₂O₃ is formed, which is crystallization in rhombohedral hexagonal phase.

- [1] M. Ghadiry, M. Gholami, L. Choon Kong, C. Wu Yi, H. Ahmad, Y. Alias. Nano-Anatase TiO₂ for High Performance Optical Humidity Sensing on Chip. *Sensors* 2016, 16, 39. <https://doi.org/10.3390/s16010039>],
- [2] Halima Ghorbel, Luc Damé, Mustapha Meftah, Xavier Arrateig, Faustine Bouyssou, et al.. Preparation and Characterization of β -Ga₂O₃-based Photo detectors for UV Detection Applications. 7th International Conference on Sensors Engineering and Electronics Instrumentation Advances (SEIA' 2021), Sep 2021, Palma de Mallorca, Spain.
- [3] C. Wang, L. Yin, L. Zhang, D. Xiang, R. Gao. Metal Oxide Gas Sensors: Sensitivity and Influencing Factors. *Sensors* 2010, 10, 2088–2106. <http://dx.doi.org/10.3390/s100302088>
- [4] K. Wetchakuna, T. Samerjai, N. Tamaekonga, C. Liewhirana, C. Siriwonga, V. Kruefua, A. Wisitsoraat, A. Tuantranont, S. Phanichphant. Semiconducting metal oxides as sensors for environmentally hazardous gases. *Sens. Actuators* 2011, 160, 580–591. [CrossRef]
- [5] R. Dhahri, M.Hjiri, L.El Mir, H. Alamri, A. Bonavita, D. Iannazzo, S.G. Leonardi, G. Neri. CO sensing characteristics of In-doped ZnO semiconductor nanoparticles, *Journal of Science: Advanced Materials and Devices* 2(2017) 34-40, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jsamd.2017.01.003>
- [6] N.V. Duy, N.V. Hieu, P.T. Huy, N.D. Chien, M. Thamilselvan, J. Yi. (2008). Mixed SnO₂/TiO₂ included with carbon nanotubes for gas-sensing application. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 41(2), 258–263. <https://doi.org/10.1016/J.PHYSE.2008.07.007>
- [7] N.H. Khadary, A.S. Alayyar, L.M. Alsarhan, S. Alshihri, M. Mokhtar. Metal Oxides as Catalyst/Supporter for CO₂ Capture and Conversion, Review. *Catalysts* 2022, 12, 300. <https://doi.org/10.3390/catal12030300>
- [8] H. Kim, M.-C. Kim, S. Kim, Y.-S. Kim, J.-H. Choi, K.-W. Park. *RSC Advances* 2020, v.10 (18), p.10519. <https://doi.org/10.1039/D0RA00531B>
- [9] Y. Zou, S. Chen, J. Sun, J. Liu, Y. Che, X. Liu, D. Yang. *ACS Sensors* 2017, v. 2 (7), p. 897. <https://doi.org/10.1021/acssensors.7b00276>
- [10] X. Zhang, W. Shi, J. Zhu, W. Zhao, J. Ma, S. Mhaisalkar, T.L. Maria, Y. Yang, H. Zhang, H.H. Hng, Q. Yan. Synthesis of porous NiO nanocrystals with controllable surface area and their application as supercapacitor electrodes, *Nano Res.* 3 (2010) 643–652. <https://doi.org/s12274-010-0024-6>
- [11] A. Roy, A. Ray, S. Saha, M. Ghosh, T. Das, B. Satpati, M. Nandi, S. Das. NiO-CNT composite for high performance supercapacitor electrode and oxygen evolution reaction, *Electrochimica Acta* (2018), <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2018.06.154>
- [12] S. Zhang, X. Wang, Y. Li, X. Mu, Y. Zhang, J. Du, G. Liu, X. Hua, Y. Sheng, E. Xie, Z. Zhang. *Beilstein J. Nanotechnol.* 2019, 10, 1923–1932. <doi:10.3762/bjnano.10.188>
- [13] H. Kim, S.-M. Oh, B. Scrosati, Y.-K. Sun. 9-High-performance electrode materials for lithium-ion batteries for electric vehicles, *Woodhead Publishing Series in Energy*, 2015, Pages 191-241 <https://doi.org/10.1016/B978-1-78242-377-5.00009-1>
- [14] T. Li, H. Yu, L. Zhi, W. Zhang, L. Dang, Z. Liu, Z. Lei. Facile Electrochemical Fabrication of Porous Fe₂O₃ Nanosheets for Flexible Asymmetric Supercapacitors. *J. Phys. Chem. C* 2017, 121, 18982–18991. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b04330>
- [15] Z. Zhang, H. Wang, Y. Zhang, X. Mu, B. Huang, J. Du, J. Zhou, X. Pan, E. Xie. *Chem. Eng. J.* 2017, 325, 221–228. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.05.045>
- [16] P.S Patil, L.D Kadam, Preparation and characterization of spray pyrolyzed nickel oxide (NiO) thin films, *Applied Surface Science*, Volume 199, Issues 1–4, 2002, Pages 211-221, [https://doi.org/10.1016/S0169-4332\(02\)00839-5](https://doi.org/10.1016/S0169-4332(02)00839-5)
- [17] Rich Kant, Dinesh Kumar and Viresh Dutta. High coercivity α -Fe₂O₃ nanoparticles prepared by continuous spray pyrolysis *RSC Adv.*, 2015,5, 52945-52951
- [18] Kiwamu Sue, Shin-ichiro Kawasaki, Muneyuki Suzuki, Yukiya Hakuta, Hiromichi Hayashi, Kunio Arai, Yoshihiro Takebayashi, Satoshi Yoda, Takeshi Furuya. Continuous hydrothermal synthesis of Fe₂O₃, NiO, and CuO nanoparticles by superrapid heating using a T-type micro mixer at 673K and 30MPa, *Chemical Engineering Journal*, Volume 166, Issue 3, 2011, Pages 947-953, <https://doi.org/10.1016/j.cej.2010.11.080>
- [19] K. Raja, M. Mary Jaculine, M. Jose, Sunil Verma, A.A.M. Prince, K. Ilangovan, K. Sethusankar, S. Jerome Das. Sol-gel synthesis and characterization of α -Fe₂O₃ nanoparticles, Superlattices and Microstructures, Vol. 86, 2015, Pages 306-312, <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2015.07.044>

- [20] A. Pachla, Z. Lenzion-Bieluń, D. Moszyński, A. Markowska-Szczupak, U. Narkiewicz, R.J. Wróbel, G. Żołnierkiewicz. 2016. Synthesis and antibacterial properties of Fe₃O₄-Ag nanostructures. *Polish Journal of Chemical Technology*, 18(4), 110–116. <https://doi.org/10.1515/pjct-2016-0079>
- [21] Geetu Sharma and Pethaiyan Jeevanandam. Synthesis of self-assembled prismatic iron oxide nanoparticles by a novel thermal decomposition route. *RSC Adv.*, 2013, 3, pp.189-200, <https://doi.org/10.1039/C2RA22004K>

CALCULATION OF ELECTRONIC PROPERTIES AND FORMATION ENERGY OF NANOSTRUCTURE OF OXIDES Li_2O , B_2O_3 AND Y_2O_3

M.M. ASADOV^{1,2}, E.S. KULI-ZADE¹, S.N. MUSTAFAEVA³

¹*Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry. Ministry of Science and Education Azerbaijan. Baku*

²*Azerbaijan State Oil and Industry University, SRI GPOGC. Azerbaijan. Baku*

³*Institute of Physics. Ministry of Science and Education Azerbaijan. Baku*

E-mail: solmust@gmail.com; mirasadov@gmail.com

The previous physicochemical descriptions of the boundary systems of the $\text{Li}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{Y}_2\text{O}_3$ quasi-ternary system have been modified taking into account the literature data and our experimental results. The nature of the physicochemical interaction of quasibinary $\text{Li}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3$, $\text{Y}_2\text{O}_3 - \text{B}_2\text{O}_3$, $\text{Li}_2\text{O} - \text{Y}_2\text{O}_3$ systems and the properties of their components (Li_2O , B_2O_3 и Y_2O_3) were optimized using the electronic structure calculation data from this work. Based on the optimized properties Li_2O , B_2O_3 and Y_2O_3 , a comparison with experimental data was made. The agreement between calculated and experimental data is improved. The initial configurations of lithium, boron and yttrium oxides (Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3) were calculated by taking into account the optimized crystal structure of these compounds with density functional theory. The structures of lithium and yttrium oxides (Li_2O , Y_2O_3) are accepted as a cubic system, and for boron oxide (B_2O_3), as a trigonal system. DFT calculated the electronic properties of these compounds, which are compared with the results of existing studies. Densities of electronic states (DOS) and energy gap HOMO-LUMO of these oxides are analyzed. Taking into account the fact that the ionization energy of the atomic orbitals of oxides differ greatly from each other, the effects of the s-, p-, and d-states on the chemical bond in Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3 compounds are analyzed. The calculated values of the formation energy of Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3 compounds, as well as their melting temperatures, are compared with known data. The change in the enthalpy of formation of these oxides does not correlate with an increase in their melting point.

Keywords: nanostructure of oxides Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3 , density functional theory (DFT), DFT calculation, density of electronic states (DOS), formation energy.

PACS: 61.72.-y; 71.20.Nr; 72.20.-i

1. INTRODUCTION

Oxide materials are used in nano and optoelectronics. For example, they will be used for the manufacture of lasers, storage of solar panels, optical detectors, waveguides. Materials based on oxide glasses make it possible to fabricate samples of a given size and shape [1–3]. Materials containing Li_2O (modifier) and B_2O_3 (glass former) have ionic conductivity. For example, lithium borate glasses containing lithium ions are used in solid state batteries with a high charge density [4, 5]. Ions of rare earth elements (REE), in particular, Y_2O_3 , can change the properties of boron oxide and lithium [6]. The resulting glassy materials can be slowly transformed into a crystalline state. When REE are introduced into oxide compounds, REE electrons pass from the low-valence state to the excited high-valence state. In this case, the properties of the material change, for example, the refractive index, band gap, and laser gain increase [7]. The electrical conductivity of oxide glasses can decrease with an increase in the concentration of introduced rare earth elements [8].

Phase equilibria of binary boundary systems $\text{Li}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3$, $\text{Y}_2\text{O}_3 - \text{B}_2\text{O}_3$, $\text{Li}_2\text{O} - \text{Y}_2\text{O}_3$ were studied by methods of physicochemical and thermodynamic analyzes [1-3]. The electronic properties of binary oxides Li_2O [9-11], Y_2O_3 [12,13] and B_2O_3 [14-18] have been studied: band structure, electronic density of states, atomic and electronic structure of crystals. The experimentally found and model calculated enthalpies of formation of these

compounds are also known [19–22]. The purpose of this work is to improve the agreement between the known and our calculated and experimental data of $\text{Li}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3$, $\text{Y}_2\text{O}_3 - \text{B}_2\text{O}_3$, $\text{Li}_2\text{O} - \text{Y}_2\text{O}_3$ systems based on the optimized properties of the components (Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3). In addition to the above, the calculation of the electronic properties and enthalpies of formation of oxides (Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3) in the framework of the theory of electron density of states.

2. METHOD OF CALCULATIONS AND EXPERIMENT

DFT calculation. The band structure and density of electronic states were calculated based on the density functional theory (DFT) using a quantum chemical software package [23]. The atoms in the ground state contained in binary components (Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3) were considered as the initial electronic configurations. Supercells containing oxide components of the $\text{Li}_2\text{O} - \text{Y}_2\text{O}_3 - \text{B}_2\text{O}_3$ system were used. In DFT calculations of the properties of compounds, the effects of exchange and correlation in the total energy of the system were taken into account in the framework of the generalized gradient approximation (GGA) according to the Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) scheme [24, 25]. The energy change was calculated for the basis set, taking into account the valence s-, p-, and d-orbitals of the component atoms.

The geometry of the unit cells Li_2O , B_2O_3 and Y_2O_3 was optimized. When calculating the self-consistent field, the basis was constructed using plane

waves with a kinetic energy ≤ 300 eV. In calculations, the wave cutoff energy was chosen such that the convergence in the total energy of the unit cell was $\geq 5 \times 10^{-6}$ eV/atom. The convergence threshold for interatomic forces was 10^{-4} eV/Å. The choice of k-points of the reciprocal lattice in the Brillouin zone was carried out using the Monkhorst–Pack method [26]. To subdivide the Brillouin zone, a $2 \times 2 \times 2$ k-grid was used. This choice of values ensures high accuracy in calculating the supercell parameters of the compounds.

The optimized unit cell parameters of binary oxides were used in the calculations. The energy of formation (E_f) (or the enthalpy $\Delta_f H^0$ of formation) of the compounds was calculated at zero temperature using a similar formula [27]. For example, for the Li_2O compound, the value of E_f was calculated using the equation:

$$E_f = \left(\frac{1}{2}\right) [E_{\text{Li}_2\text{O}}^{\text{total}} - (2E_{\text{Li}} + E_{\text{O}})] \quad (1)$$

where $E_{\text{Li}_2\text{O}}^{\text{total}}$ total is the total unit cell energy of the Li_2O compound (per formula unit), E_{Li} and E_{O} are the energies of the elements Li and O (per atom), respectively.

Sample preparation and experimental procedure. Samples for refinement of phase diagrams and equilibria in the $\text{Li}_2\text{O} - \text{Y}_2\text{O}_3 - \text{B}_2\text{O}_3$ system were synthesized from the following starting materials: Li_2CO_3 (chemically pure), H_3BO_3 (OSCh 12-13), and

Y_2O_3 with a purity of 99.99%. Synthesis of samples of the system was carried out according to the procedure described in [1]. The synthesized samples were identified by methods of physico-chemical analysis (PCA), X-ray diffractometry (XRD; DRON-2 diffractometer, $\text{CuK}\alpha$ radiation) and differential thermal analysis (DTA; Jupiter STA 449 Netzsch).

3. RESULTS AND DISCUSSION

Lithium oxide Li_2O at atmospheric pressure and room temperature has a cubic antiferroite structure (CaF_2 -type) with parameter $a_0 = 4.610$ Å, space group $Fm\bar{3}m$ (No 225), $Z = 4$. Due to deformation of the cubic phase, $\alpha - \text{Li}_2\text{O}$, a rhombohedral phase ($Rm\bar{3}H$) is formed, which coexists with it, $\alpha = 90.16^\circ$. DFT GGA-PBE calculations of the lattice parameter ($a_0 = 4.57$ Å), band structure, and density of electronic states (DOS) of the $\alpha - \text{Li}_2\text{O}$ compound are in good agreement with other calculated [9,10] data. The calculated band gap $E_g = 5.39$ eV $\alpha - \text{Li}_2\text{O}$ is smaller than the experimental data E_g (Table 1).

Structural, electronic properties, and enthalpies of formation of $\alpha - \text{Li}_2\text{O}$ binary oxides were studied using DFT GGA-PBE. The calculated properties for $\alpha - \text{Li}_2\text{O}$ agree well with calculated and experimental data [9]. The direct band gap of the $\alpha - \text{Li}_2\text{O}$ phase is 5.1 eV. The total density of states TDOS $\alpha - \text{Li}_2\text{O}$ and the partial densities of states PDOS Li and O are shown in Fig. 1.

Table 1.

Crystal	$a, \text{Å}$	E_g, eV
$\alpha - \text{Li}_2\text{O}$	4.533, 4.631 [9], 4.573 [10]	5.1, 5.39 [9], 5.5 [10], 5 [28]

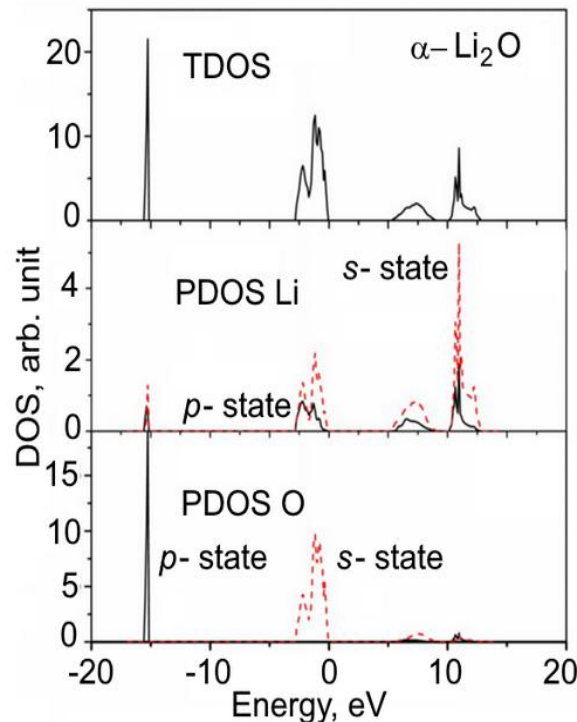


Fig. 1. Total (DOS) and partial (PDOS) electron densities of states for the cubic phase of $\alpha - \text{Li}_2\text{O}$.

The shape of the PDOS of the Li and O atoms differ from each other because their electronic configurations are different. The theoretically calculated ionization energies of atomic orbitals of chemical elements [29] also differ from each other. The calculated ionization energies of the orbitals of Li and O atoms are: for Li, the 2s state (5.3 eV), for O, the 2s state (28.5 eV), and the 2p state (7.1 eV). Figure 2 shows that Li s-orbitals and O p-orbitals have a relatively large contribution to the total electron density of the system.

Yttrium oxide Y_2O_3 . For the crystal structure of Y_2O_3 , three polymorphic modifications are known: cubic C-type ($\alpha - Y_2O_3$), monoclinic (B-type) and hexagonal H-type ($H - Y_2O_3$) systems [1]. The $\alpha - Y_2O_3$ (space group $Ia\bar{3}$ (No 206); $a = 10.60 \text{ \AA}$, $\beta = 90^\circ$) structure transforms into the high-temperature form $H - Y_2O_3$ at a temperature $\sim 2700 \text{ K}$, [1]. This $H - Y_2O_3$ structure has a hexagonal syngony (space group $P3m1$ (No 164)).

For the Y_2O_3 compound, the following data are given in early sources of information [30-33]. The B-type has a monoclinic structure (space group $C2m$) with lattice constants: $a = 13.91$, $b = 3.483$, $c = 8.093 \text{ \AA}$, $\beta = 100.15^\circ$. Phase transition temperature $T = 1380 \text{ K}$, enthalpy $\Delta H_{tr(C-B)} = 310 \text{ cal/mol}$, and entropy $\Delta S_{tr(C-B)} = 0.24 \text{ cal/(mol} \cdot ^\circ\text{C)}$. The existence of a hexagonal H-type with lattice constants at 2653 K is also reported: $2600 \pm 30 \text{ K}$ phase transition has an enthalpy $\Delta H_{tr(B-H)} = 6000 \pm 2000 \text{ cal/mol}$. A melting temperature of $T_m = 2700 \pm 10 \text{ K}$ and an enthalpy of melting $\Delta H_m = 20000 \pm 2000 \text{ cal/mol}$ were proposed [30].

Low-temperature modification $\alpha - Y_2O_3$ (CaF_2 -type, or Mn_2O_3 ; space group $Ia\bar{3}$ (No 206)) with cell parameter $a = 10.605\text{--}10.640 \text{ \AA}$, $Z = 4$ [31]. The structure of the $\alpha - Y_2O_3$ crystal is analogous to the unit cell of fluorite, in which part of the anion is missing. $\alpha - Y_2O_3$ is an insulator under room conditions, with a direct band gap of $4.54\text{--}5.5 \text{ eV}$, located at point Γ in reciprocal space.

Various thermodynamic data are known for the Y_2O_3 phase transition temperature [32]. The following values are given for the C \rightarrow B phase transition: $\Delta H_{C \rightarrow B} = 12.833 \text{ kJ/mol}$; $\Delta S_{C \rightarrow B} = 4.080 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)}$. A for the C \rightarrow H phase transition, on average, the following values are given: $\Delta H_{C \rightarrow H} = 36.25 \pm 5.75 \text{ kJ/mol}$; $\Delta S_{C \rightarrow H} = 14.1 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)}$. For the phase transition (C \rightarrow H) is given on average $T_{C \rightarrow H} = 2590 \pm 18 \text{ K}$. And for the melting point Y_2O_3 is known $T_m = 2590 \pm 18 \text{ K}$.

For the monoclinic structure Y_2O_3 (B-type; space group $C2m$) different authors give lattice parameters that vary in the following intervals: $a = 13.871\text{--}14.060 \text{ \AA}$, $b = 3.4487\text{--}3.5360 \text{ \AA}$, $c = 8.567\text{--}8.629 \text{ \AA}$, $\beta = 100\text{--}100.12^\circ$ [33].

The results of calculations of the total density of states (DOS) and partial DOS (PDOS) for the Y and O atoms of the $\alpha - Y_2O_3$ compound show the following. The nature of the spectra of total DOS and partial PDOS for $\alpha - Y_2O_3$ corresponds to the spectra of the low-energy configuration. The same energy spectra are characteristic of the Y_6O_9 cluster [12].

The Y-4s states lie at low energies and are not visible in Fig. 3. The Y-4p states are observed in the lower energy part of the spectra. The 2s orbitals of oxygen atoms predominate in the middle energy part of the spectra.

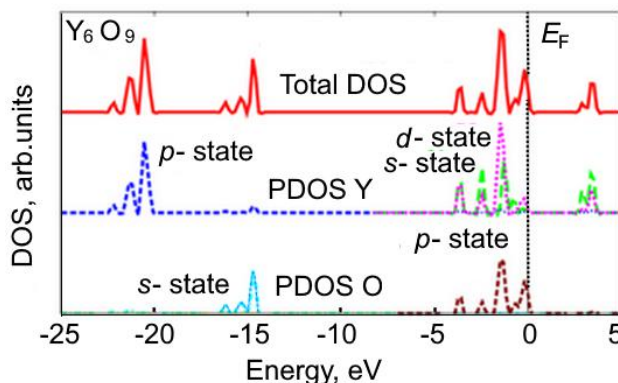


Fig. 2. Total (DOS) and partial (PDOS) electron densities of states for the Y_6O_9 cluster.

The formation of molecular orbitals (MO), taking into account the hybridization of electron orbitals, can explain the formation of Y^{3+} ions. When distributing electrons over MO atoms $\alpha - Y_2O_3$ in accordance with the principles of distribution, the last electrons must occupy unfilled orbitals, one electron per orbital. Therefore, the presence of unpaired electrons on MO imparts new properties to the $\alpha - Y_2O_3$ molecule.

In the HOMO-LUMO theory of molecular orbitals, the gap is the energy gap between the highest

occupied molecular orbital (HOMO) and the lowest vacant molecular orbital (LUMO). The HOMO-LUMO gap is an important parameter of nanostructures and can serve as an analogue of the band gap for nanotubes. States near the HOMO level (Fig. 3) consist of hybridized 5s and 4d states of Y atoms along with O-2p states. The 4d electrons of Y atoms make a significant contribution to interatomic bonds. In the HOMO band structure, the $\alpha - Y_2O_3$ level mainly consists of O-2p orbitals. And LUMO energy $\alpha - Y_2O_3$ is mainly composed of Y-5s orbitals.

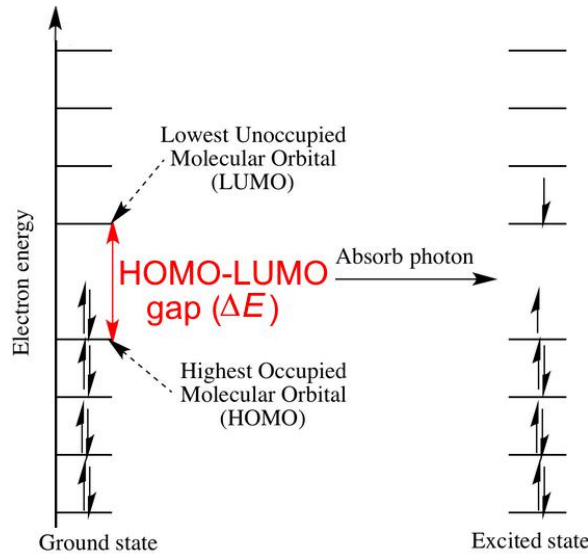


Fig. 3. Diagram of the HOMO-LUMO gap of the optical spectrum.

The calculated ionization energies of the orbitals of the Y and O atoms are [29]: for Y the 5s state (5.3 eV), the 4d state (5.6 eV), for O the 2s state (28.5 eV), the 2p state (7.1 eV).

Boron oxide B_2O_3 has two polymorphs (trigonal $\alpha - B_2O_3$ and orthorhombic $\beta - B_2O_3$ systems). with different coordination numbers of boron atoms [14–16]. At room temperature and normal pressure, the low-temperature modification $\alpha - B_2O_3$ has a trigonal structure. $\alpha - B_2O_3$ is characterized with a three-dimensional grid formed from triangles of BO_3 structural units. $\alpha - B_2O_3$ with lattice parameters $a = 4.35 \text{ \AA}$, $c = 8.39 \text{ \AA}$ belongs to the space group $P3/121$

(№ 152) [15]. At high pressure, the orthorhombic modification ($\beta - B_2O_3$) is stable. It consists of a framework of linked BO_4 tetrahedra [16].

Crystalline $\alpha - B_2O_3$ is a wide-gap insulator. The calculated band gap is about 9 eV. This corresponds to the known values of 9.1 eV [7, 17].

Densities of states (PDOS) of oxygen and boron crystal $\alpha - B_2O_3$ (Figure 4) indicate the following. The valence band is primarily made up of oxygen 2p orbitals, while the bottom of the conduction band is made up primarily of boron orbitals. The PDOS of the (101) surface of the $\alpha - B_2O_3$ compound [18] is also characterized by such an electron density distribution.

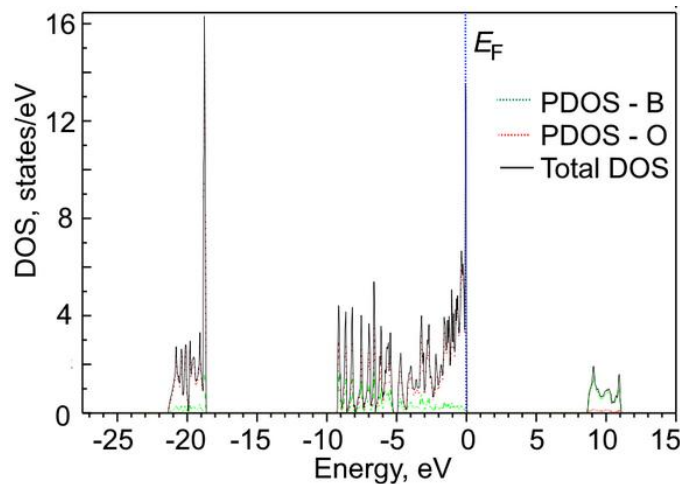


Fig. 4. Total (DOS) and partial (PDOS) electron densities of states for $\alpha - B_2O_3$.

The calculated ionization energies of the orbitals of the B and O atoms are [29]: for B, the 2s-state (12.6 eV), 2p-state (6.7 eV), for O, the 2s-state (28.5 eV), 2p-state (7.1 eV).

Enthalpy of formation. In calculating the energy of formation of Li_2O , Y_2O_3 , B_2O_3 the standard states of the elements Li, Y, B, and O at 298.15 K were used.

DFT GGA-PBE the enthalpy of formation ($E_f \approx \Delta_f H^0$) Li_2O , Y_2O_3 , B_2O_3 calculated by us at $T = 0 \text{ K}$ is given in Table. 2. Comparison of the calculated values of $\Delta_f H^0$ with the known data [1, 19-22] of compounds Li_2O , Y_2O_3 , B_2O_3 indicates a small spread between the values of $\Delta_f H^0$ (Table 2).

Table 2.

DFT GGA-PBE calculated enthalpy of formation of compounds Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3

Compound (solid)	$-E_f$, calc eV / atom	$-\Delta_f H^0$, calc kJ / mol	$-\Delta_f H_{298}^0$, kJ / mol [1, 19-22]	T_m , K [1]
Li_2O	1.99	596	598	1711
B_2O_3	2.56	1235	1273	753
Y_2O_3	3.85	1856	1905	2698

From the point of view of the development of functional materials with the participation of binary oxides Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3 data on phase equilibria and structural-phase states in a multicomponent system $\text{Li}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{Y}_2\text{O}_3$ are of interest. Some ternary oxide compounds in the $\text{Li}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{Y}_2\text{O}_3$ system exhibit lattice instability in different temperature ranges. These unstable structural-phase states of the crystal lattice manifest themselves in the features on the temperature dependences of the physicochemical and mechanical properties. Transition states are difficult to study experimentally. Therefore, theoretical studies are needed according to the forecast of regularities taking into account structural data.

Taking into account the stability limits of ternary compounds in a $\text{Li}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{Y}_2\text{O}_3$ quasi-ternary system, we have established phase boundaries between compounds with different stoichiometric compositions.

Equilibrium phase regularities in boundary $\text{Li}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3$, $\text{Y}_2\text{O}_3 - \text{B}_2\text{O}_3$, $\text{Li}_2\text{O} - \text{Y}_2\text{O}_3$ quasi-binary systems are established on the basis of PCA and analysis of crystal parameters. This approach made it possible to reveal inconsistencies between known data, typical and special stoichiometric compositions, and phase boundaries in $T - x$ phase diagrams.

The formation of stoichiometric compositions of triple oxides, in particular, is determined by geometric factors: the desire of the crystal system to completely fill the structural space, to the highest symmetry and to create the maximum possible number of "bonds" between atoms. Based on the synthesized samples, we refined the $T-x$ phase diagrams of $\text{Li}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3$, $\text{Y}_2\text{O}_3 - \text{B}_2\text{O}_3$, $\text{Li}_2\text{O} - \text{Y}_2\text{O}_3$ systems (Figs. 5a-d). The analysis shows that the agreement between the known and our calculated and experimental data on these systems is improved.

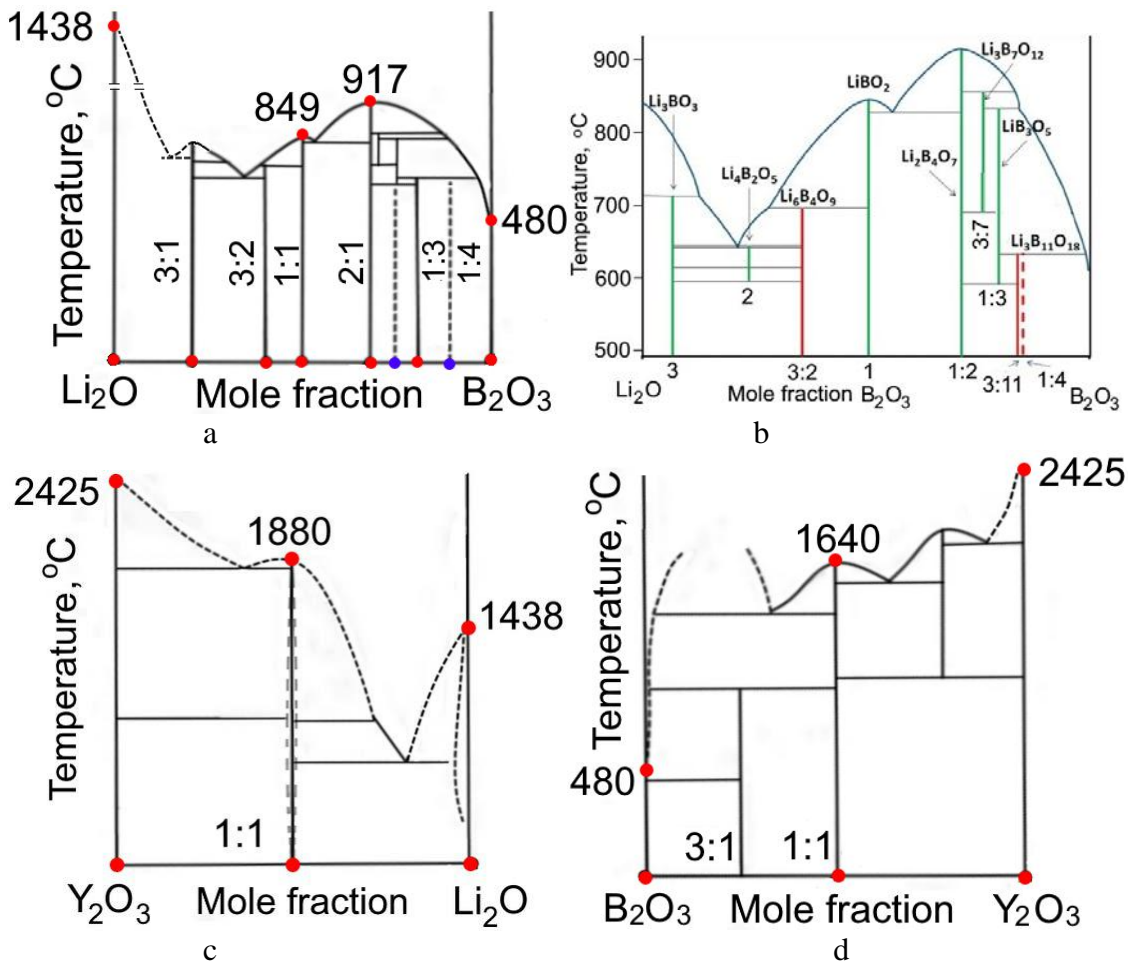


Fig. 5. $T - x$ phase diagrams of systems: $\text{Li}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3$ (a) [1], $\text{Li}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3$ (b) [34], $\text{Li}_2\text{O} - \text{Y}_2\text{O}_3$ (c), $\text{Y}_2\text{O}_3 - \text{B}_2\text{O}_3$ (d).

The conditions for the formation and stability of crystal structures depend on the ratio and combination of the geometric parameters of atoms and their electronic structure. As can be seen from Figs. 5a-d, in the systems $\text{Li}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3$, $\text{Y}_2\text{O}_3 - \text{B}_2\text{O}_3$, $\text{Li}_2\text{O} - \text{Y}_2\text{O}_3$, a different number of ternary compounds with a three-dimensional periodic structure with different systems are formed. In crystal lattices, in which atoms are arranged in strictly fixed positions.

For binary A-B systems, the use of such characteristics as, for example, the size factor (ratio of element radii r_A/r_B or $\delta = 1 - r_A/r_B$) seems to be ineffective for determining structural features. To determine the stability limits of crystal structures of different syngonies, in addition to the influence of the size factor on the stability of compounds, modern calculation methods are also used. This is due to the fact that the stability of crystal structures of different syngonies depends on many factors (for example, the electronic structure), which must be taken into account when determining the stability of structural-phase states. Below, we consider the results of calculations of the electronic properties and enthalpy of formation of oxides Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3 in the framework of the theory of electron density of states.

CONCLUSIONS

The initial supercell configurations of Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3 oxide crystals were optimized and the structures were calculated using the density functional theory. The spectra of the density of states reflect the regularities of the influence of the atomic orbitals of oxygen, lithium, boron and yttrium on the chemical bond in the compounds Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3 .

The formation of ions in these oxides, as in other crystalline compounds, is explained by the formation of

molecular orbitals (MOs), taking into account the hybridization of electron orbitals. When distributing electrons over MO atoms of a compound, in accordance with the principles of distribution, the last electrons must occupy orbitals, one electron per orbital. Therefore, the presence of unpaired electrons on the MO imparts new properties to the substance molecule. In the $\alpha - \text{Y}_2\text{O}_3$ crystal the orbitals of the valence bond, in particular, the oxygen atom ($2p^4$) are less than half filled, and the valence orbital of the yttrium atom ($5s^2$) is filled. Then the probability of filling the $2p^4$ orbital of oxygen with electrons $\alpha - \text{Y}_2\text{O}_3$ is greater than the filling of the $5s^2$ orbital Y. The main contribution to the $2s$ -, $2p$ -states of oxygen is associated with low-energy molecular orbitals, including the corresponding atomic orbitals of lithium ($1s$ -, $2s$ -states), boron ($1s$ -, $2s$ -, $2p$ -states) and yttrium ($5s$ -, $4d$ - states).

The change in the enthalpy of formation of these oxides does not correlate with an increase in their melting points. For the formation energy of Li_2O , B_2O_3 , Y_2O_3 compounds, the following values were obtained ($-E_f$, eV / atom): 1.99, 2.56 and 3.85 eV/atom, respectively.

ACKNOWLEDGMENTS

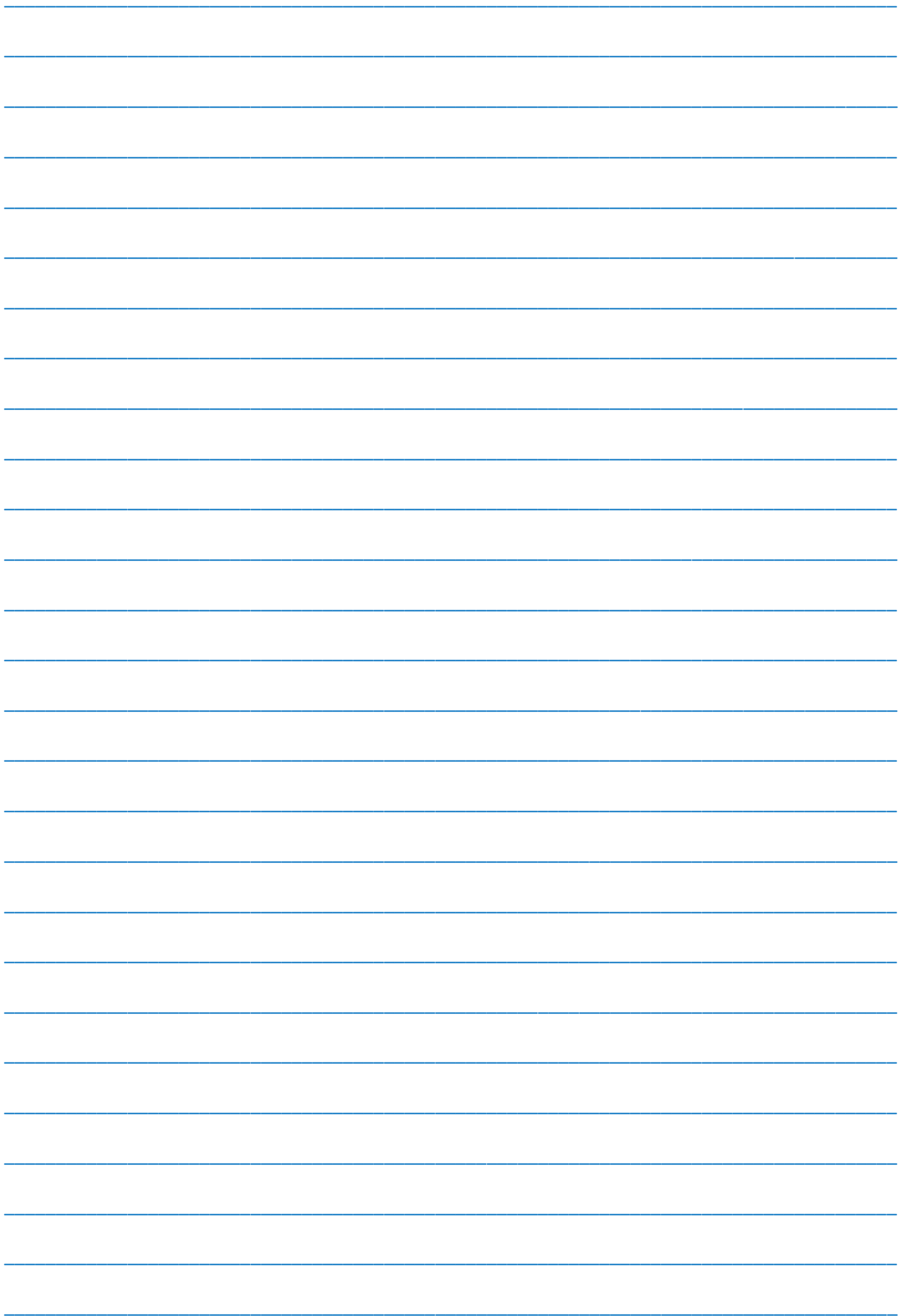
The work has been partially funded by from the Science Development Foundation with the President of the Republic of Azerbaijan (EIF) (grant No EIF-BGM-3-BRFTF-2+/2017-15/05/1-M-13) and the Russian Foundation for Basic Research (RFBR) (project № Az a2018).

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare that they have no conflict of interest.

- [1] M.M. Asadov, E.S. Kuli-zade. J. Alloys Compd. 2020. V. 842. P. 155632. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.155632>
- [2] M.M. Asadov, N.A. Akhmedova. Russ. J. Inorg. Chem. 2020. V. 65. № 7. P. 1061. <https://doi.org/10.1134/S0036023620070013>
- [3] M.M. Asadov, N.A. Akhmedova. Russ. J. Inorg. Chem. 2018. V. 63. № 12. P. 1617. <https://doi.org/10.1134/S0036023618120021>
- [4] D.D. Ramteke, R.S. Gedam. Solid State Ion. 2014. V. 258. P. 82. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2014.02.006>
- [5] A.V. Egorysheva, O.G. Ellert, Yu.V. Maksimov et al. J. Alloys Compd. 213. V. 579. P. 311. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2013.06.096>
- [6] F. Berkemeier, M. S. Abouzari, G. Schmitz. Appl. Phys. Lett. 2007. V. 90. 113110. <https://doi.org/10.1063/1.2713138>
- [7] R. Korthauer (Ed.), Lithium-Ion Batteries. Basics and Applications. Springer-Verlag GmbH Germany, 2018. 415 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-53071-9>
- [8] P. Knauth. Solid State Ion. 2009. V.180. P. 911. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2009.03.022>
- [9] Y. Duan, D.C. Sorescu. Phys. Rev. B. 2009. V. 79. № 1. P. 014301. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.014301>
- [10] M. M. Islam, T. Bredow, C. Minot. J. Phys. Chem. B. 2006. V. 110. P. 9413.
- [11] L. Liu, V.E. Henrich, W.P. Ellis, I. Shindo. Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 2236.
- [12] A.B. Rahane, P.A. Murkute, M.D. Deshpande et al. J. Phys. Chem. A. 2013. V. 117. № 26. P. 5542–5550. <https://doi.org/10.1021/jp404225k>
- [13] X. Jiang, Z. Zhang, D. Luo, et al. Int. J. Quantum Chem. 2021. V. 121 Iss. 23. e26802. <https://doi.org/10.1002/qua.26802>.
- [14] G.E. Gurr, P.W. Montgomery, C.D. Knutson, B.T. Gorres. Acta Cryst. B. 1970. V. 26. P. 906.
- [15] H. Effenberger, C.L. Lengauer, E. Parthe. Monats. Chem. 2001. V. 132. P. 1515.
- [16] C.T. Prewitt, R.D. Shannon. Acta Cryst. B. 1968. V. 24. P. 869.

- [17] V.V. Maslyuk, M.M. Islam, T. Bredow. Phys. Rev. B. 2005. V. 72. P. 125101
- [18] T. Bredow, M.M. Islam. Surface Sci. 2008. V. 602. № 13. P. 2217. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2008.04.032>
- [19] V.P. Glushko. Thermal constants of substances. Database. URL: <http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html>.
- [20] O. Kubaschewski, C.B. Alcock. Metallurgical Thermochemistry. 5th ed., Pergamon Press. Oxford, New York, Toronto. 1979.
- [21] I. Barin, G. Platzki. Thermochemical Data of Pure Substances. Third ed. Weinheim. VCH, New York. 1995. 1900 p.
- [22] Thermal constants of substances. Directory in ten issues / Ed. Glushko V.P. VINITI AN USSR. Moscow. 1978. Issue. 8. Part 1. 535 p. (in Russian)
- [23] S.N. Mustafaeva, M.M. Asadov, S.S. Guseinova et al. Phys. Solid State. 2022. T. 64. № 6. C. 628. <https://doi.org/10.21883/FTT.2022.06.52388.299>
- [24] M.M. Asadov, S.N. Mustafaeva, S.S. Guseinova et al. Phys. Solid State. 2021. V. 63. № 5. P. 797. <https://doi.org/10.1134/S1063783421050036>
- [25] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. № 18. P. 3865. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.3865>
- [26] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Phys. Rev. B. 1976. V. 13. № 12. P. 5188. <https://doi.org/10.1103/physrevb.13.5188>
- [27] M.M. Asadov, S.N. Mustafaeva, S.S. Guseinova et al. Microelectronics. 2023. V. 52, № 1. C. 46. <https://doi.org/10.31857/S0544126922700181>, EDN: CXXQYI
- [28] L. Liu, V.E. Henrich, W.P. Ellis, I. Shindo. Physical Review B. 1996. V. 54. № 3. P. 2236. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.2236>
- [29] J.-J. Yeh. Atomic Calculation of Photoionization Crosssection and Asymmetry Parameters. Gordon and Breach, New Jersey, 1993.
- [30] S.P. Gordienko, B.V. Fenochka, G.Sh. Viksman. Thermodynamics of lanthanide compounds. Handbook. Kyiv: Naukovo Dumka. 1979. P. 186. (in Russian). <https://materialsproject.org/materials/mp-2652/>
- [31] M. Zinkevich. Prog. Mater. Sci. 2007. V.52. № 4. P. 597. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2006.09.002>
- [32] E.I. Suvorova, O.V. Uvarov, A.V. Ovcharov et al. Philosophical Magazine A. 2018. V. 98. № 35. P. 3127. <https://doi.org/10.1080/14786435.2018.1521013>
- [33] G. Rousse, B. Baptiste, G. Lelong. Inorg. Chem. 2014. P. 1-9. <https://doi.org/10.1021/ic500331u>



MÜNDƏRİCAT

1.	Polivinilidenftorid materialının bəzi elektrofiziki xassələrinin polimerin üst molekulyar strukturu ilə əlaqələrinin tədqiqi A.M. Həşimov, L.Ç. Süleymanova, K.B. Qurbanov, F.Ş. Cəfərova, Z.A. Tağıyeva, V.M. Hacıyeva, S.S. Əhədova	3
2.	$Pb_{0.75}Sn_{0.25}Te_{<Sn>}$ kristalları əsasında metal-yarımkeçirici strukturların elektrik xassələri T.C. Əliyeva, G.Z. Bağiyeva, G.C. Abdinova, N.M. Axundova	6
3.	Aşqarlı yarımkeçiricilərdə termomaqnetik dalğalar E.R. Həsənov, Ş.Q. Xəlilova, R.K. Mustafayeva	11
4.	Bərpa olunan enerji mənbələrinin elektrik stansiyalarında hidroakkumulyasiya imkanları Ülkər İzzət qızı Aşurova	16
5.	Qaz turbin elektrik stansiyalarının faydalığının artırılması Şıxəliyeva Səadət	22
6.	Yupiterin diskində böyük qırmızı ləkənin ətraf mühitlə qarşılıqlı dinamikası Ə.Ə. Hübətova	26
7.	Kvant təbəqəsində cərəyanın dispersiyası R.Q. Ağayeva	31
8.	Civə buxarının elektrik boşalması plazmasında ionların paylanması T.X. Hüseynov, B.B. Davudov, E.A. Rəsulov, Ş.A. Allahverdiyev, E.Q. Tağıyeva	34
9.	Davamlı dərman çatdırılması üçün nanoməsəmali qeyri-üzvi membranlar və örtüklər implantasiya edilə bilən vasitələr kimi Ş.O. Eminov, C.A. Quliyev, A.X. Kərimova, S.H. Abdullayeva	37
10.	$K_{0.94}Cs_{0.06}NO_3$ kristalında II \leftrightarrow III çevrilmələri zamanı III və II modifikasiya kristallarının böyümə morfologiyası R.B. Bayramlı, V.İ. Nəsirov, İ.M. Məhərrəmov, E.V. Nəsirov	43
11.	Ağır ionlar dəstəsinin fokuslandırılması zamanı plazma linzasında fəza yükünün formalaşması F.V. Həsənlı	47
12.	Xarici elektromaqnit sahələrində metalların və yarımkeçiricilərin səthində pH-həssas polielektrolit təbəqələrinin fiziki-kimyəvi xassələrinin tədqiqi Təranə Firqət qızı Yusibova, Rayihə Şəmsəddin qızı Ağayeva, Aygün Aydın qızı Orucova	51
13.	Molekulyar quruluş modeli əsasında Ge-As-Se-S xalkogenid şüşəvari sistemində Raman səpilməsinin tədqiqi S.İ. Mehdiyeva, R.İ. Ələkbərov, S.M. Məmmədov	55
14.	PET aparatları üçün detektorların yeni tiplərinin hazırlaması Xəyalə Elbrus qızı Hüseynzadə	60
15.	Polipropilenin elektrofiziki xassələrinə nanogilin təsiri A.R. Sadıqova, P.B. Əsilbəyli, A.Ə. Hadıyeva, X.O. Sadiq, İ.M. İsmayılov, V.Ə. Ələkbərov	63
16.	$MnIn_2S_4$ monokristallarında aşırma effektinin tədqiqi O.B. Tağıyev, T.Ş. İbrahimova, F.A. Kazımova, G.S. Hacıyeva, E.Q. Əsədov	67
17.	Perovskitəbənzər laylı $La_2Ti_2O_7$ birləşməsində yüksək təzyiqlərdə faza keçidləri A.G. Asadov, A.İ. Mammadov, D.P. Kozlenko, S.E. Kichanov, R.Z. Mehdiyeva, E.V. Lukin, O.N. Lis, A.V. Rutkauskas, E.R. Hüseynova, X.İ. Əhmədov	69

18	TlGaSe ₂ <Pr> kristallarının optik xassələri P.H. İsmayılova, N.Z. Həsənov, A.A. Hacıyeva, S.S. Abdinbəyov, X.Ş. Vəlibəyov	75
19	Koordinatdan asılı kütləyə malik yarımsonsuz harmonik ossilyatorun su(1,1) dinamik simmetriya cəbrinin dəqiq realizasiyası Ş.M. Nağıyev, E.İ. Cəfərov	80
20	Bi ₂ Te _{2,7} Se _{0,3} <Ni> kristallarında işıqın udulma dinamikası N.M. Abdullayev, S.R. Əzimova	84
21	Sn _{1-x} Tb _x Se monokristallarının termoelektik hərəkət qüvvəsinə γ -şüaların təsiri T.A. Cəfərov, C.İ. Hüseynov	87
22	Mikrodünyanın “qeyri-səlis” mahiyyətinin dərk edilməsində Maks Plank və Boltzmannın kompleksionları: Aristotel və Lütfi Zadə məntiqləri E.A. İsayeva	90
23	Nano ölçülü Al nazik təbəqələrinin alınması və onların quruluş xüsusiyyətləri X.N. Əhmədova, S.H. Cabarov, Ş.N. Əliyeva, X.O. Sadiq	94
24	In _{1-x} Sm _x Se monokristallarında In atomlarının Sm atomları ilə əvəz edilməsinin elektrik xassələrinə təsiri Q.İ. İsaqov, A.A. İsmayılov*, M.C. Nəcəfzadə, V.I. Eminova, A.A. İsmayılov, Ə.B. Məhərrəmov	98

CONTENTS

1.	The complex investigation of separate structural elements of compositional material T.M. Khalina, M.V. Khalin, S.A. Guseynova	3
2.	Temperature dependence of the kinetic coefficients of Bi _{0.88} Sb _{0.12} alloy A.A. Musayev, E.R. Yuzbashov	9
3.	Features of delocalization of particles from a rectangular potential well at decrease of its depth with time A.Ch. Izmailov	16
4.	Effect of electrothermopolarization on dielectric properties in PE/Ta ₂ O ₅ nanocomposite A. Huseynova	22
5.	Effect of nanoislands and nanowires on the thermoelectric quality of Bi ₂ Te ₃ <Ni> and Bi ₂ Te ₃ <Zn> K.Sh. Gahramanov, A.Sh. Gahramanov, S.Sh. Gahramanov, H.V. Orujova, N.A. Abdullayev, N.N. Abdulzade, G.M. Ahmedov	25
6.	New rotation electron-diffraction methods and their applications M.G. Kyazumov, S.M. Rzayeva, E.A. Isayeva, L.V. Rustamova, N.A. Aliyeva	31
7.	The formation of In and Sn small-sized narrow strips by means of liquid metal ion source technique F.E. Mammedov, E.A. Ibrahimova, E.M. Akberov, I.I. Gurbanov, G.H. Mammedova, S.A. Aliyev	35
8.	Dependence of the dielectric properties of the Al-TiW-PtSi/n-Si Schottky diode on the alternating signal Izzat Afandiyeva	39
9.	Current oscillations in impurity semiconductors in external electric and weak magnetic fields ($\mu_{\pm}H \ll C$) Esmira O. Mansurova	43
10.	Simulation of the growth of a TlInS ₂ <Yb> single crystal, DFT calculation of electronic properties, and ac conductivity of samples S.M. Asadov, S.N. Mustafaeva, S.S. Huseynova	47
11.	Thermal conductivity properties of Carbon Nanotube-Gobu natural bentonite ceramic composites at high temperatures Mammadova A. Samira, Huseynov B. Asgar, Zeynalov B. Eldar, Ahmadova Dursadaf, Aliyeva R. Valida, Shukurlu E. Gumru, Mammadova A. Mehriban	53
12.	Electrical parameters of zeolite with different silver content G.M. Eyvazova, I.M. Afandiyeva, V.I. Orbukh, N.N. Lebedeva	57
13.	Luminescent properties of bionanocomposites LDPE + x vol.% FS E.M. Gojaev, A.M. Nazarov, V.V. Salimova, R.M. Sadigov	61
14.	On the origin of “spider” pulsars A.O. Allahverdiev, A.I. Asvarov, S.O. Guseynova, H.I. Novruzova	64
15.	Electrical properties of thin-film CdTe: CdFeTe heterojunctions M.A. Mehrabova, N.I. Huseynov, A.A. Abdullayeva, R.M. Sadigov	67
16.	Dirac cone and topological states in 2D phononic crystals Zafer Ozer, Izzat Afandiyeva, Amirullah M. Mamedov, Ekmel Ozbay	71

17.	Second harmonic generation in locally resonant nonlinear weyl semimetal based acoustic metamaterials: finite element analysis Zafer Ozer, Chingiz Akhundov, Amirullah M. Mamedov, Ekmel Ozbay	77
18.	Synthesis optimization and characterization of Fe oxide nanoparticles N.N. Musayeva, S.A. Guluzade, H.Kh. Khalilova, B.M. Izzatov, M.T. Alizade	84
19.	Calculation of electronic properties and formation energy of nanostructure of oxides Li_2O , B_2O_3 and Y_2O_3 M.M. Asadov, E.S. Kuli-zade, S.N. Mustafaeva	88



www.physics.gov.az