



Azerbaijan Journal of Physics

FIZIKA



www.physics.gov.az

C

2024

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

ISSN 1028-8546
Section: C Conference
Magsud Aliyev-100 2024

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
Dieter Hochheimer, USA
Victor L'vov, Israel
Majid Ebrahim-Zadeh, Spain
Natig Atakishiyev, Mexico

Huseyn Ibragimov, Azerbaijan
Nazim Mamedov, Azerbaijan
Anatoly Boreysho, Russia
Mikhail Khalin, Russia
Javad Abdinov, Azerbaijan
Faik Mikailzade, Türkiye
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-1073, 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

It is authorized for printing:

**Akademik Magsud Əliyevin
100 illik yubileyinə həsr olunmuş**

Fizikanın Aktual Problemləri

beynəlxalq elmi konfrans

**azərbaycan dilində məqalələr
Gəncə - 2024**



BİOLOJİ MAYELƏRİN İNDUKTİV ƏLAQƏLİ PLAZMA KÜTLƏ SPEKTROMETRİ VASİTƏSİLƏ ANALİZİ ZAMANI MEYDANA ÇIXAN MATRİS EFFEKTLƏRİ

N.Ş. CƏFƏR

1. Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu
H.Cavid pr, 131, Bakı AZ-1073 nurlanajafarr@gmail.com.

Tədqiqatda bioloji mayelərin analizi zamanı komponentlərin aşkarlanma həddinə matris effektlərin təsiri araşdırılmış, həmçinin birbaşa seyrəltmə və mineralizasiya metodları ilə nümunə hazırlığının müqayisəsi aparılmışdır. Nəticələr göstərir ki, cihazın ayırma qabiliyyətinin azalması, üzvi həlledicilərin təsiri ilə əlaqədar, analizatorun bir sıra hissələrinin, o cümlədən sampler və skimmer dəliklərinin diametrlərinin kiçilməsi ilə əlaqədardır. Analiz olunan məhlulların üzvi komponentlərinin təsirini azaltmaq üçün iki üsul, mikrodalğalı və sadə parçalanma, təklif edilmişdir. İşdə sadə seyrəltmənin üstünlükləri vurğulanmışdır. Eyni zamanda, bioloji mayelərin, xüsusilə qan analizi zamanı, turşu ilə mineralaşdırma üsulunun müxtəlif üzvi matrisi aradan qaldırmaq və biotəhlükəni azaltmaq üçün optimal metod kimi istifadə olunduğu qeyd edilmişdir. Məqalədə matris effektlərini aradan qaldırmaq və daha dəqiq nəticələr əldə etmək üçün daxili standartların istifadəsi mümkünlüyü izah edilmişdir. Əldə olunan nəticələr analitik-eksperimentatorlar üçün dəqiqlik dərəcəsini qiymətləndirmək və artırmaq, eyni zamanda həkimlərə dializ zamanı xəstənin bədəninə itirilmiş vacib elementlərin bərpası üçün mühüm məlumatlar təqdim edilmişdir.

Açar sözlər: Bioloji maye, induktiv əlaqəli plazma kütlə spektrometriyası, spektral və qeyri-spektral matris effektlər, daxili standart.

PACS: 29.30.-h

GİRİŞ

Tibbdə hazırda mikroelementlərin insan orqanizmindəki rolu mühüm diqqət mərkəzinə malikdir, çünki onların çoxluğu və ya qida rasionundakı çatışmazlığı ciddi xəstəliklərə səbəb ola bilər [1]. Mikroelementlər zülallarda və yağlarda, karbohidratlar isə immun reaksiyalarında iştirak edir. Aparılan tədqiqatlar torpaqda, suda və atmosferdə makro- və mikroelementlərin miqdarının artmasının insan saçındakı və bioloji mayelərdəki elementlərin səviyyəsinə təsir etdiyini göstərir [2].

İnduktiv əlaqəli plazma kütlə spektrometriyası (İƏP-KS) tibbi diaqnostik metodlardan biridir və bioloji mayelərdə mikroelementlərin konsentrasiyasını öyrənməklə xəstəliklərin müəyyən edilməsinə kömək edir. Hal-hazırda İƏP-KS metodu yüksək həssaslığı və geniş konsentrasiyalarda çox elementli analiz aparmaq imkanı ilə bioloji obyektlərin element analizində aparıcı mövqeyə malikdir.

İƏP-KS metodunun üstünlükləri arasında çox elementli analiz, aşağı aşkarlama hədləri, sürətli analiz prosesi və kiçik nümunə həcmi yer alır. Bu xüsusiyyətlər, metodu bioloji mayelərin analizi üçün əvəzolunmaz edir. Eyni zamanda, metod yüksək əlçatanlıq və məhsuldarlıq təqdim edir, kimyəvi elementlərin və onların izotoplarının aşağı aşkarlanma həddi ilə seçilir, bu da onun effektivliyini artırır. [3]

Bununla belə, hər hansı analitik metodda olduğu kimi, İƏP-KS də analiz nəticələrinə təsir edən bəzi çatışmazlıqlara malikdir. Bu çatışmazlıqlara spektral və qeyri-spektral matris effektləri daxildir. Mürəkkəb tərkibli nümunələrin analizi zamanı bu təsirlər, təyin olunan elementlərin aşağı aşkarlanma həddini əhəmiyyətli dərəcədə artırır və mürəkkəb bioloji nümunələrdə onların düzgün identifikasiyasını çətinləşdirir. Bu səbəbdən, analitik nəticələrin dəqiqliyini artırmaq üçün uy-

ğun matris təsirini azaltma strategiyalarının tətbiqi vacibdir [4,5]. Son on beş il ərzində müxtəlif bioloji nümunələrin İƏP-KS metodu ilə analizi mövzusunda bir çox məqalə dərc edilmişdir [6, 7]. Nümunənin növü, tərkibi və hazırlanma qaydası, İƏP-KS-də alınan nəticələrin təhrif olunmasına səbəb ola biləcək spesifik problemlər yarada bilər. Bu işin əsas məqsədi, böyrək çatışmazlığı olan xəstələrdən alınan qan və sidik nümunələrinin analizi zamanı İƏP-KS metodunda meydana gələn interferensiyaların araşdırılması və aradan qaldırılmasıdır.

Beləliklə, məqalə İƏP-KS metodunun mürəkkəb tərkibli bioloji nümunələrdə kimyəvi elementlərin təyin edilməsinə yönəlib. Eyni zamanda, nümunələrin hazırlanmasında birbaşa seyrəltmə və turşu mineralaşması kimi müxtəlif üsulların tətbiqi, bioloji mayelərin analizi zamanı yaranan matris effektlərinin nəzərə alınması və azaldılması məsələlərini əhatə edir. Bu yanaşma, analitik nəticələrin dəqiqliyini artırmaq məqsədinə əsaslanır.

1. Eksperimental hissə

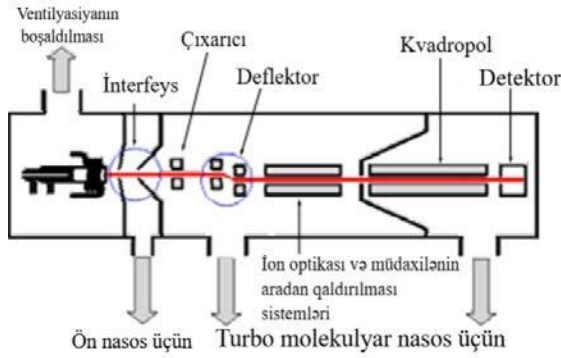
1.1. Avadanlıq

Ölçmələr "Agilent Technologies" şirkətinin 7700 model İƏP-KS cihazında sabit iş şəraitində aparılmışdır. İƏP-KS metodu, ion mənbəyi olaraq arqon İƏP istifadə etməklə kvadrupollu kütlə spektrometrinin tətbiqinə əsaslanır [7-9].

Şəkil 1-də İƏP-KS "Agilent 7700" cihazının əsas hissələrinin diaqramı təqdim edilmişdir. Nümunə daxil etmə sistemi peristaltik nasos, püskürdücü və püskürtmə kamerasından ibarətdir. Tədqiq olunan maddənin məhlulu peristaltik nasos vasitəsilə 0,1 ml/dəq sürətlə sorulur; sonra aerosol yaradılır və püskürdücü kamera-

dan keçir. Nəticədə, incə aerosol birbaşa üfüqi quraşdırılmış plazma borusuna yönləndirilir. Plazma borusu 4 dolaqlı sarğaca daxil edilərək 27.1 MHz tezliyində gərginlik verilir. Bu prosesdə plazma yüksək tezlikli sahədə elektronlarla zənginləşir və arqon atomları ilə toqquşaraq plazma “yanması” baş verir. Plazma mərkəzində temperatur 8000 ilə 10000 K arasında yüksəlir. Aerosollaşdırılmış nümunə həlledicidən azad edilərək ionlaşır, nəticədə analiz olunan nümunədən ion dəstəsi əmələ gəlir. Bu ionlar, konuslar və linzalar sistemi vasitəsilə kütlə analizatoruna daxil olur. Tətbiq olunan gərginliklərin xüsusi kombinasiyası ilə kvadropolun mərkəzindən yalnız müəyyən m/z nisbətində malik ionlar keçə bilər.

Kvadropol gərginliyin çox sürətli (mişarvari) dəyişməsinə təmin edərək, 100 ms-də 2 ilə 260 Da arasında bütün kütlə diapazonunu skan edə bilər. Bu, bütün elementlərin intensivliyə uyğun kütlə spektrlərinin eyni anda qeydə alınmasını mümkün edir. Kvadropoldan keçdikdən sonra, ionlar ikinci elektron çoxaldıcısı vasitəsilə aşkar edilir, bu da analizin həssaslığını artırır.



Şəkil 1. İOP-KS Agilent 7700-in diaqramı.

Cədvəl 1. Təcrübə rejimində İOP-KS-in bəzi məlumatları göstərilmişdir

Plazma, generatorun gücü, W	1450
Arqonun axın sürəti, l/dəq	1.2
Nümunənin ötürülmə sürəti, l/dəq	1
Kütlə spektrometrin ayırdetmə qabiliyyəti, Da	0.2
Plazmasız vakuüm, Torr	$4 \cdot 10^{-4}$
Toqquşdurucu yuva, qaz	Helium
Ölçmə vaxtı, s	0,1–0,5

1.2. Nümunə hazırlığı

Mikro ölçülü nümunələrlə işləmək üçün kiçik həcmli qablarla təchiz edilmiş və temperaturun dəyişdirilməsi imkanına malik olan “Speedwave Xpert” (Almaniya) mikrodalğalı sobada minerallaşdırılmışdır. Təcrübə zamanı “Pipet4u” və “Eppendorf” (Almaniya) istehsalı olan 100–1000 µl və 1–10 ml həcmli nümunə qabları, birdəfəlik ucluqlar, eləcə də 15 və 50 ml həcmli polipropilen borulardan istifadə olunmuşdur.

Nümunə məhlulları, əsas məhlulun ardıcıl seyrəldilməsi ilə hazırlanmışdır. Standart məhlullar 10 mq/l

konsentrasiyası olan 32 elementdən ibarət olub, “High Purity Standards” (ABŞ) tərəfindən istehsal edilmişdir. Matris effektlərinin təsirini öyrənmək üçün isə Na, K, Ca tək elementli məhlullardan istifadə olunmuşdur. Daxili standartlar Rh, In, Sc, Ge (ABŞ) 1 mq/l konsentrasiya ilə hazırlanmışdır.

Nümunələrin minerallaşdırılması və kalibrəmə məhlullarının hazırlanması üçün Suprapuz (Merck, Almaniya) istehsalı olan 65% azot turşusu (HNO₃) və 30% hidrogen peroksid (H₂O₂) istifadə edilmişdir. Bütün məhlullar deionlaşdırılmış su (18,2 MΩ·sm) ilə durulaşdırılmışdır.

Cihaz, kalibrəmə standartları ilə 1-dən 50 ppb-ə qədər verilən həcmdə kalibrəlanmış və çıxışda müvafiq düz xətlər alınmışdır. İntensiv hemodializ keçirən 30-40 yaşlı böyrək çatışmazlığı olan xəstələrdən birdəfəlik polietilen borularda qan və sidik nümunələri toplanmışdır. Sidik, azot turşusu ilə (HNO₃ konsentrasiyası 20 ml nümunə üçün 0,4 ml) durulaşdırılmışdır.

Təmiz qan, həm qeyri-üzvi, həm də üzvi maddələrin yüksək tərkibinə malik olan müxtəlif birləşmələrdən ibarət bioloji mayedir. Qanın qorunması üçün EDTA-HNO₃ qarışığı istifadə edilmişdir. Nümunə götürüldükdən sonra sidik və qan nümunələri bir neçə gün soyuducuda 2–4 °C temperaturda saxlanılmışdır. Daha sonra, bu nümunələr analiz edilmiş və dializ mayesi 0,2% azot turşusunda həll edilmişdir.

Qan (0,5–1 ml) və sidik (1–2 ml) nümunələri, sıxılmış HNO₃ və H₂O₂ istifadə edilərək mikrodalğalı sobada ayrılmışdır. Minerallaşdırma rejimləri cədvəl 2-də təqdim olunmuşdur, bu da prosesin şərtlərini və parametrlərini əks etdirir.

Cədvəl 2. Sidik və qan nümunələri üçün Minerallaşma rejimi

Mərhələ nömrəsi	Temperatur, °C	Vaxt, dəq
1	15-80	4
2	80-160	3
3	160-190	5
4	190-210	14

Tədqiqatlar göstərdi ki, yüksək temperaturda və nümunənin uzun müddət minerallaşması zamanı bəzi yüksək uçuculuğa malik elementlər buxarlandığından, optimal iş rejimi seçilmişdir: qan üçün 3-cü, sidik üçün isə 2-ci mərhələ. Ölçmə üçün hazırlanmış məhlullara müvafiq elementin konsentrasiyası 20–50 µg/l olan daxili standartlar əlavə edilmişdir.

2. Nəticələr və onların müzakirəsi

Məlum olduğu kimi, qan çoxlu sayda üzvi birləşmələrdən ibarət olduğundan, onun İOP-KS ilə analizi üçün müxtəlif nümunə hazırlama üsullarından istifadə olunur. Nümunənin hazırlanması üsullarından asılı olmayaraq, bütün üzvi maddələr komponentlərinə tam ayrılma bilmir, bu da kütlə-spektrometrin ion-optik sistemində, konusların və plazma borusunun səthində duzların və ya oksidlərin çökməsinə səbəb olur. Konusların səthində adsorbsiya olunan duzlar, onların dəliklərinin diametrlərini azaldaraq, cihazın ayırdetmə qabiliyyətini

pisləşdirir [3]. Üzvi həlledicilərin plazmaya həddindən artıq daxil olması (0,2%-dən yuxarı) istilik xüsusiyyətlərinin əhəmiyyətli dərəcədə dəyişməsinə, xüsusən də temperaturun azalmasına səbəb ola bilər. Bu temperatur azalması, maddələrin ionlaşması və dissosiasiyası üçün əlavə enerji tələb edir, nəticədə analizlərin dəqiqliyi və həssaslığı pisləşə bilər. Bu səbəbdən, plazmada üzvi həlledicilərin optimal konsentrasiyası diqqətlə seçilməlidir.

Buna görə də, komponentlərin təsirini azaltmaq məqsədilə iki müxtəlif nümunə hazırlığı üsulu öyrənilmişdir: analiz edilən nümunələrin birbaşa seyrəldilməsi və mikrodalğada parçalanma. Birbaşa seyrəltmə metodunun üstünlükləri arasında nümunənin qısa müddətdə asan analizi, aşağı qiymət və minimal çirklənməyə malik olmasıdır. Lakin, bu metodla hazırlanmış nümunələr kütlə spektrometrin bəzi hissələrinin, xüsusən nümunə götürmə şlanqlarının sıradan çıxmasına və kənar dəliklərinin tıxanmasına səbəb ola bilər. Nəticədə, həll olunmayan duzların komponentləri matris effektlərinin (spektral və qeyri-spektral) təsirini gücləndirir. [10, 11]. Bu çatışmazlıqlara baxmayaraq, tibbi laboratoriyalarda tələb olunan çoxlu nümunələri qısa müddətdə hazırlamaq imkanı sayəsində, birbaşa seyrəltmə üsulu praktikada daha tez-tez istifadə olunur. Bu yanaşma, analitik işlərin sürətini artıraraq laboratoriya iş yükünü azaltmağa kömək edir. [12-14]. Müxtəlif üzvi matrisi və belə obyektlərlə işləyərkən bioloji təhlükəni azaltmaq məqsədilə turşu ilə minerallaşma üsulundan istifadə etməklə biomayelərin və qanın element analizini aparmaq mümkündür [15-18]. Bununla belə, bu növ nümunənin hazırlanmasının bir sıra çatışmazlıqları vardır: konkret nümunə üçün müxtəlif proqram təminatı tələb olunur, nümunənin hazırlama müddəti uzun (3–4 saat) olur, kənar məhlulların əlavə edilməsi zamanı çirklənmə riski artır, analitin çox miqdarda istifadə olunması ilə bağlı çətinliklər yaranır və bəzi uçucu elementlərin itirilməsi baş verə bilər [19, 20].

Tədqiqatlar göstərmişdir ki, hər iki nümunə hazırlığı zamanı dializatlarda atom kütləsi az olan bəzi elementlərin konsentrasiyası dəyişmir, lakin atom kütləsi daha yüksək olan elementlərin konsentrasiyası 2–3 dəfə artır. Müəyyən edilmişdir ki, birbaşa seyrəltmə ilə mikrodalğalı parçalanma arasında müqayisədə misin konsentrasiyası 2 dəfə, sinkin 1,6 dəfə, stronsiumun konsentrasiyası isə 2 dəfə artmışdır (şəkil 2a). Bu analiz nəticələrinin müxtəlifliyi, onların üzünə təsir edən spektral matris interferensiyasının olması ilə izah olunur.

Ümumiyyətlə, spektral matris effektləri daha çox nümunənin hazırlanması zamanı özünü göstərir. Bu səbəbdən, əksər hallarda bu effekti aradan qaldırmaq üçün İÖP-KS-nin ion-optik sistemindən sonra toqquşma yuvacıqları ilə təchiz edilmiş hissədən istifadə olunur. Toqquşma yuvacıqları adətən helium (He) qazı ilə zənginləşdirilir, nadir hallarda isə hidrogen (H₂) və ya ammoniyak (NH₃) qazlarından istifadə olunur. Spektral matris effektləri aşağıdakılara aid ola bilər:

1. İzobar interferensiyalar kütləcə bir-birinə yaxın olan müxtəlif elementlərin izotoplarından gələn siqnalların interferensiyasıdır.
2. Digər elementlərin atom kütlələrinin m/q qiymətinə uyğun gələn çoxsaylı yüklü atomlar.

3. Çox atomlu ionlar — eyni kütləli analitlərin siqnalına çox atomlu ionların analitik siqnallarının üst-üstə düşməsi. İÖP-KS-də ən güclü spektral effektlər, çox atomlu ionlar tərəfindən yaradılır. Onların aradan qaldırılması (və ya azaldılması) kütlə spektrometriyanın ən vacib məsələlərindən biridir.

İnduktiv əlaqəli plazmada spektral interferensiyalara səbəb olan müxtəlif növ poliatomik ionlar aşağıdakılardır:

1. Poliatomik fon ionları — yalnız plazma qazının, atmosfer havasının və suyun komponentləri (Ar, C, H, O, N) tərəfindən əmələ gələn ionlardır.

2. Həll olunmuş nümunənin komponentləri tərəfindən əmələ gələn çox atomlu ionlar — bu qrupa nümunəyə daxil olan elementlərin oksidi (MO⁺), hidrokسيد (MOH⁺) və hidrid ionları (MH⁺) aiddir (M — analiz edilən element).

3. Çoxatomik arqon tərkibli ionlar — nümunənin və plazma qazının komponentlərindən əmələ gələn ionlardır: ArCl⁺, ArS⁺, ArF⁺, ArM⁺ və s.

Oksid poliatomik ionlarının əmələ gəlməsi, havadan və turşulardan gələn, nümunənin həllində istifadə olunan və nümunənin özündə yerləşən oksigen atomlarının, yüksək temperaturda (10,000 K) induktiv əlaqəli plazmaya daxil olması ilə izah olunur. Bu atomlar arqon atomları ilə və ya kütləsi analitlərin (hidridlər, oksidlər və s.) atom kütlələrinə oxşar olan digər ionlarla birləşirlər. Məsələn, ⁶³Cu siqnalı üçün interferensiyalar ²³Na⁴⁰Ar⁺, ⁴⁷Ti¹⁶O ola bilər; ⁶⁶Zn üçün ³²S¹⁶O¹⁸O, ³²S¹⁷O⁺², ⁸⁸Sr üçün isə ⁷²Ge¹⁶O⁺ və ⁴⁰Ar⁴⁸Ca⁺ kimi formalar müşahidə olunur.

Şəkil 2-də nümunənin hazırlanma şəraitindən asılı olaraq toqquşma yuvası olmadan və toqquşma yuvası olduqda dializatlarda elementlərin konsentrasiyası göstərilmişdir. Spektral interferensiyanın qarşısını almağın ən effektiv yolu toqquşma yuvasında bufer kimi helium qazından istifadə etməkdir. Optimal helium axını sürəti isə 3 ml/dəq müəyyən edilmişdir.

Şəkil 1, b-dən aydın olur ki, İÖP-KS-də helium qazı əlavə edildikdən sonra bir neçə siqnalın interferensiya təsirinin azalması müşahidə olunmuşdur (şəkil 2). Metodun mahiyyəti ondan ibarətdir ki, ion dəstəsi kütlə analizatoruna daxil olmadan əvvəl helium ionları ilə toqquşur. Bu toqquşmalar zamanı helium ionları, dəstədəki böyük molekulyar ionlarla və daha az diametrlı metal ionları ilə qarşılıqlı təsir edir, nəticədə detektora daxil olan molekulyar ionların axımının intensivliyi azalır. Bu proses, spektral interferensiyaların azaldılmasına və analizlərin dəqiqliyinin artırılmasına kömək edir.

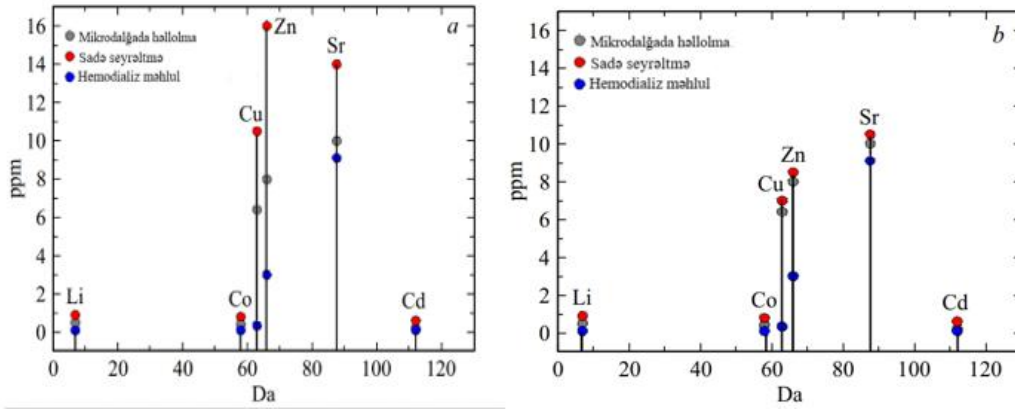
Aparılan təcrübələr göstərir ki, dializ zamanı insan orqanizmindən mis, sink, dəmir və digər mühüm elementlər yuyulur. Bu elementlərin sərbəst buraxılması, onların çatışmazlığına səbəb olur ki, bu da xəstənin immun sisteminin zəifləməsinə təsir göstərə bilər. Mis, insan həyatı üçün vacib elementdir, ürək, böyrək və qaraciyərdə toplanır; həmçinin dəmirin sorulmasına kömək edir və enerji mübadiləsində rol oynayır. Mis çatışmazlığı, soyuqdəymə, sümüklərin kövrəkləşməsi və hərəkətlə bağlı problemlərin yaranma ehtimalını artırır. Sink çatışmazlığı isə nevroloji pozğunluqlara, görmə kəskinliyinin azalmasına və dərinin vəziyyətinin pisləşməsinə səbəb olur. Alınan nəticələr həkimlərə dializ za-

manı itirilən elementlərin tərkibini bərpa etməyə və hemodializ zamanı əlavə təsirlərin qarşısını almağa kömək edəcək.

Sidik, üzvi turşuların duzlarına nəzərən yüksək konsentrasiyaya malik duzlu məhluldur və iş zamanı iki yolla hazırlanmışdır. Tədqiqatlar göstərir ki, hər iki üsulun nəticələri demək olar ki, eynidir, bu da birbaşa seyrəltmə metodunun praktikliyini sübut edir. Üç müxtəlif yaş qrupundan olan könüllülərdən sidik nümunələri birdəfəlik polipropilen borularda toplanmış, 65% azot turşusu əlavə edilmiş və deionlaşdırılmış su ilə 10-20 dəfə seyrəldilmişdir. Ancaq birbaşa seyrəltmənin çatışmazlığı, plazma borusunun, samplərin və skimlərin səthində karbon təbəqəsinin yaranmasıdır. Sidik və

qan komponentlərinin tam həll olunmaması, konusların səthində müsbət ionlardan ibarət dielektrik təbəqənin yaranmasına səbəb olur ki, bu da bu konuslardan keçən ionların trayektoriyasını təhrif edir.

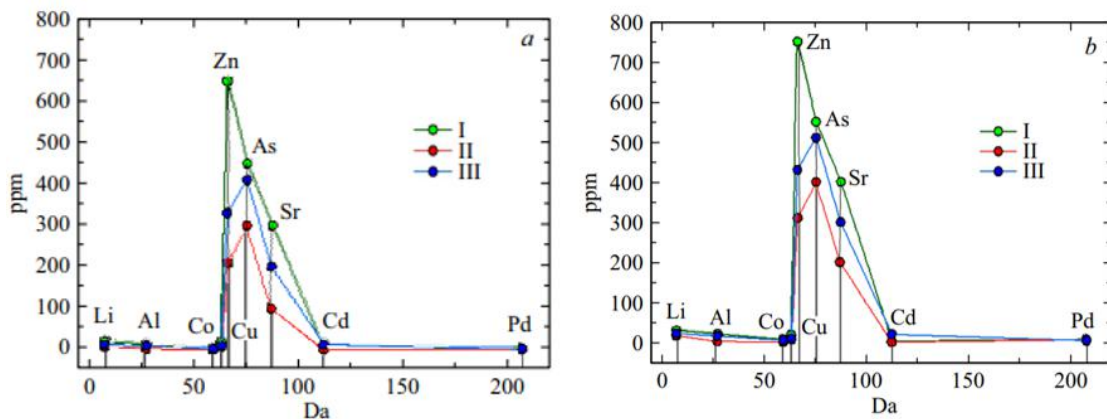
Bu təsiri aradan qaldırmaq üçün arqon plazmasına 1-5% oksigen qazı əlavə etmək kifayətdir. Təcrübələr göstərdi ki, oksigen qazının əlavə edilməsi ilə qeyri-spektral matris effektini aradan qaldırmaq və konusların işləmə müddətini artırmaq mümkündür. Oksigenin arqon plazmasına daxil olması, üzvi birləşmələrlə reaksiyaya girərək onları aradan qaldırır və daha az atom kütləsinə malik birləşmələr əmələ gətirir. Bu yeni birləşmələr, nümunə konuslarının dəliklərindən asanlıqla keçərək ion-optik sistemə daxil olur.



Şəkil 2. Müxtəlif nümunə hazırlığı şəraitinin dializatlarda olan elementlərin konsentrasiyası: (a) toqquşma yuvası olmadıqda, (b) toqquşma yuvası olduqda.

Şəkil 3-də oksigenin plazmaya əlavə edilməsindən əvvəl (şəkil 3a) və sonra (şəkil 3b) üç xəstənin sidik tərkibinin analiz nəticələri göstərilmişdir. Şəkildən aydın olur ki, oksigen əlavə edildikdən sonra elementlərin konsentrasiyası artmışdır. Bu, konusların səthinə çökən üzvi birləşmələrin miqdarının azalması ilə izah olunur, bu da konuslardan keçən ionların sayını artırır. Qan,

biotibbi tədqiqatlarda ənənəvi biomaterialdir və onun analizi üçün bir neçə üsul ədəbiyyatda təsvir edilmişdir. Qanın bir çox üzvi birləşmələrlə zəngin olması və birbaşa analizin düzgün olmaması səbəbindən, daha dəqiq nəticələr əldə etmək və İOP-KS-də qeyri-spektral matris effektinin təsirini azaltmaq üçün daxili standart metodundan istifadə etmək vacibdir[27].

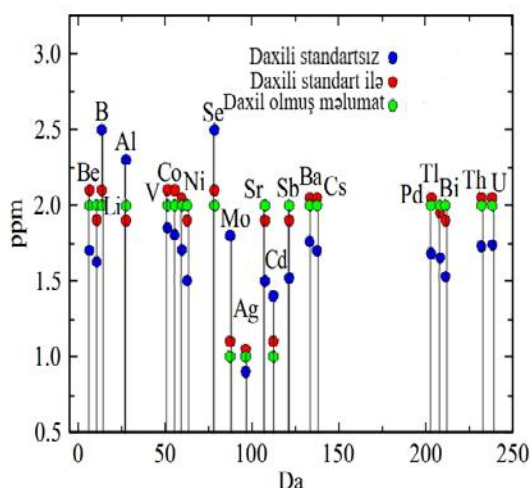


Şəkil 3. Üç pasiyentin sidik tərkibinin analizinin oksigen əlavəsindən əvvəl (a) və sonra (b) olan göstəricilər.

Daxili standart (DS) seçiminin əsas qaydaları aşağıdakılardır:

- Analiz edilən nümunədə DS-nin mövcud olması;
- DS izotopunun atom kütləsinin analitin kütləsi ilə uyğunsuzluğu;

- DS-nin ionlaşma potensialının (İP) analitin İP-a yaxın olması;
- Analiz edilən maddədə DS izotopunun olmaması.



Şəkil 4. Daxili standart (DS) olaraq rodium (Rh) istifadə etməklə və istifadə etmədən qanda ölçülən elementlərin konsentrasiyası.

Bu, bioloji mayelərin analizi zamanı daxili standartın (DS) seçiminin çətinliyini vurğulayır. DS-nin əlavə edilməsi nümunənin çirklənməsinə və spektral, əsasən qeyri-spektral matris effektlərin yaranmasına səbəb ola bilər. Bəzi müəlliflər plazma qazından və ya analiz edilən məhlulun matrisindən yaranan çoxatomlu ionların (məsələn, Ar^{2+} , ArO^+ , N_2^+) DS kimi istifadə edilməsini tövsiyə edirlər. DS-dən tam imtina instrumental sürüşməyə yol açdığından, ən azı bir DS-nin istifadəsi tövsiyə olunur. Müxtəlif atom kütlələrinə malik analitlər üçün bir DS seçmək çətin olduğundan, daha dəqiq nəticələr üçün cihazın parametrlərini dəyişmək, məsələn, generatorun gücünü artırmaq və arqon qazının sürətini azaltmaq da məsləhət görülür [25]. Aparılan təcrübələr göstərib ki, cihazı köklədikdən sonra müxtəlif atom kütlələrinə malik analitlər üçün bir daxili standart (DS) seçmək mümkündür. Təbii rodium (Rh) elementi, izobar interferensiyadan azad olduğundan, DS kimi seçilir. Təbii rodium yalnız sabit ^{103}Rh izotopundan ibarətdir, bu da onu izotopik olaraq saf element halına gətirir.

Şəkil 4-də daxili standart (DS) olaraq rodium (Rh) istifadə etməklə və istifadə etmədən qanda ölçülən ele-

mentlərin nəticələri göstərilir. Nəticələrdən görünür ki, Mn, Ag, Cd, Sb, Pb kimi elementlər üçün DS olmadan düzgün qiymətləndirmə əldə olunmayıb, bu da spektral matris effektinin təsiri ilə izah olunur. Düzgünlüyü yoxlamaq üçün DS olaraq 100 mM konsentrasiyada natrium (Na) elementi əlavə edilmişdir.

Təcrübə nəticələri göstərdi ki, natrium (Na) əlavəsi analizin nəticələrinə heç bir dəyişiklik etməmişdir. Əksinə, nümunəyə rodium (Rh) əlavə edildikdə əldə edilən nəticələr kalibrəmə məhlulunun həqiqi tərkibinə daha yaxın olmuşdur. Bu, natriumun plazmanın temperaturunu dəyişdirməsi ilə izah edilə bilər. Natrium atomları aşağı ionlaşma potensialına malik olduğundan, yüksək temperaturlu plazmaya daxil olduqda tez ionlaşır, bu da elektronların konsentrasiyasını artırır. Nəticədə, plazma elektronlarla zənginləşir və daha yüksək ionlaşma potensialına malik elementlər ionlarla rekombinasiya olunaraq neytrallaşır, bu da plazmanın temperaturunu və müsbət ionların sayını azaldır.

3. Nəticələr

- Bioloji mayelərin analizində spektral matris interferensiyaları helium qazı əlavə etməklə aradan qaldırıla bilər, bu da mikrodalğalı və birbaşa seyrəltmə üsulu ilə əldə olunan nəticələrin bir-birinə yaxınlaşmasına səbəb olur.

- Hemodializ zamanı mis və sink kimi elementlərin yuyulması immun sisteminin zəifləməsinə səbəb ola bilər; əldə olunan nəticələr xəstələrin bədənində itirilmiş elementləri bərpa etməyə kömək edir.

- Sidik, turşu ilə minerallaşma etmədən, sadəcə deionlaşdırılmış su ilə 10 dəfə durulaşdıraraq analiz edilə bilər.

- Arqon plazmasına 1–3% oksigen əlavə etməklə qeyri-spektral matris effektini minimuma endirmək mümkündür.

- Qan, üzvi maddələrin biotibbi tədqiqində əsas biomaterialdir; buna görə də, analiz edilən məhlulları hazırlayarkən dəqiq nəticələr üçün daxili standart (DS), məsələn, rodium istifadə etmək vacibdir.

[1] A.A. Kozhin, B.M. Vladimirov. *Ekologiya cheloveka*, 20 (9), 56, 2013. (in Russian)
DOI: 10.17816/humeco17318.

[2] B. Bocca, A. Alimonti, O. Senofonte, A. Pino, N. Violante, F. Petrucci, G. Sancesario, G. Forte, J. *Neurological Sci.*, 248 (1–2), 23, 2006.
DOI: 10.1016/j.jns.2006.05.007

[3] T.K. Nurubeyli, K.Z. Nuriev, Z.K. Nurubeyli. *Tech. Phys.*, 64 (6), 909, 2019.
DOI: 10.1134/S1063784219060148

[4] J.S. Park, J.Y. Ryu, H.-K. Jeon, Y.J. Cho, Y.A. Park, J.-J. Choi, J.-W. Lee, B.-G. Kim, D.-S. Bae. *J. Gynecol. Oncol.*, 23 (3), 190, 2012.
DOI: 10.3802/jgo.2012.23.3.190.

[5] M. Kantola, R. Purkunen, P. Kröger, A. Tooming, J. Juravskaja, M. Pasanen, K. Seppänen, S.

Saarikoski, T. Vartiainen. *Environmental Res.*, 96 (1), 51, 2004.
DOI: 10.1016/j.envres.2004.03.003

[6] R. Brodzka, M. Trzcinka-Ochocka, B. Janasik. *Intern. J. Occupational Medicine and Environmental Health*, 26 (2), 302, 2013.
DOI: 10.2478/s13382-013-0106-2

[7] D. Dudek-Adamska, T. Lech, T. Konopka, P. Koscielniak. *Biolog. Trace Element Research*, 199, 2138, 2021.
DOI: 10.1007/s12011-020-02347-w

[8] T.K. Nurubeyli. *Tech. Phys.*, 65 (12), 1963, 2020.
DOI: 10.1134/S1063784220120166

[9] T.K. Nurubeyli, Kh.N. Ahmadova. *Intern. J. Modern Phys. B*, 35 (05), 2150094, 2021.
DOI: 10.1142/S0217984921500949

- [10] T.K. Nurubeyli, Z.K. Nurubeyli, K.Z. Nuriyev. *Tech. Phys.*, 62 (2), 305, 2017. DOI: 10.1134/S1063784217020220
- [11] I. G.Venkatesh, K.S. Subramanian, J.R. Woittiez. *Element Analysis of Biological Samples* (CRC Press, USA, 1997. DOI: 10.1201/9781003068358
- [12] C.S. Kira, A.M. Sakuma, N. Cruz Gouveia. *J. Appl. Pharm. Sci.*, 4 (5) 39, 2014. DOI: 10.7324/JAPS.2014.40507
- [13] K.L. Pei, D.W. Kinniburgh, L. Butlin, P. Faris, D. Lee, D.A. Marshall, M.C. Oliver, R. Parker, J.N. Powell, P. Railton, J. Smith. *Clin. Biochem.*, 45 (10–11), 806, 2012. DOI: 10.1016/j.clinbiochem.2012.03.025
- [14] I. Blas Bravo, R.S. Castro, N.L. Riquelme, C.T. D'iaz, D.A. Goyenaga. *J. Clinic. Biochem.*, 21 (1), 14, 2007. DOI: 10.1016/j.jtemb.2007.09.017
- [15] J. Rambouskova, A. Krskova, M. Slavikova, M. Cejchanova, K. Wranova, B. Prochazka, M. Cerna. *Arch. Gerontol. Geriat.*, 56 (2), 389, 2013. DOI: 10.1016/j.archger.2012.11.002
- [16] S. D'Ilio, F. Forastiere, A. Draicchio, C. Majorani, F. Petrucci, N. Violante, O. Senofonte. *Ann. Ist. Super Sanita*, 49 (1), 24, 2013.
- [17] N.B. Ivanenko, A.A. Ivanenko, N.D. Solovyev, A.E. Zeimal, D.V. Navolotskii, E.J. Drobyshev. *Talanta*, 116, 764, 2013. DOI: 10.1016/j.talanta.2013.07.079
- [18] G. Li, J.D. Brockman, Sh.-W. Lin, C.C. Abnet, L.A. Schell, J.D. Robertson. *Am. J. Anal. Chem.*, 3 (9), 646, 2012. DOI: 10.4236/ajac.2012.39084
- [19] B. Bocca, R. Madeddu, Y. Asara, P. Tolu, J.A. Marchal, G. Forte. *J. Trace Elem. Med. Biol.*, 25 (1), 19, 2011. DOI: 10.1016/j.jtemb.2010.12.004
- [20] M. Krachler, K.J. Irgolic. *J. Trace Elem. Med. Biol.*, 13 (3), 157, 1999. DOI: 10.1016/S0946-672X(99)80006-6
- [21] E.H. Evans, J.J. Giglio. *J. Anal. At. Spectrom.*, 8 (2), 1, 1993.
- [22] T.W. May, R.H. Wiedmeyer. *Atom. Spectrosc.*, 19 (5), 150, 1998.
- [23] D.C. Gregoire, R.E. Sturgeon. *Spectrochim. Acta. Part B*, 48 (11), 1347, 1993.
- [24] I.F. Seregina, S.Yu. Lanskaya, O.I. Okina, M.A. Bol'shov, S.M. Lyapunov, O.L. Chugunova, A.S. Foktova. *J. Analyt. Chem.*, 65, 964, 2010. DOI: 10.1134/S1061934810090133
- [25] W.J. McShane, R.S. Pappas, V. Wilson-McElprang, D. Paschal. *Spectrochim. Acta Part B*, 63 (6), 638, 2008. DOI: 10.1016/j.sab.2008.03.016
- [26] D. Profrock. *Appl. Spectr.* 66 (8), 843, 2012. DOI: 10.1366/12-06681
- [27] Ch. Agatemor, D. Beauchemin. *Anal. Chim. Acta.*, 706 (1), 66, 2011. DOI: 10.1016/j.aca.2011.08.027
- [28] B. Gulson, K. Mizon, A. Taylor, M. Korsch, J. Stauber, J.M. Davis, H. Louie, M. Wu, L. Antin. *J. Trace Elem. Med. Biol.*, 22 (3), 206, 2008. DOI: 10.1016/j.jtemb.2008.04.001
- [29] H.-Ch W. Stavros, R.K. Bonde, P.A. Fair. *Mar. Pollut. Bull.*, 56 (6), 1215, 2008. DOI: 10.1016/j.marpolbul.2008.03.035

N.Sh. Jafar

Influence of matrix effects on analysis of biological fluids by inductive coupled plasma mass spectrometry method.

In the study, the influence of matrix effects on the detection limit of components during the analysis of biological fluids was investigated, and a comparison of sample preparation with direct dilution and mineralization methods was made. The results show that the decrease in the resolution of the device due to the influence of organic solvents is related to the reduction of the diameters of a number of parts of the analyzer, including the sampler and skimmer holes. To reduce the influence of the organic components of the analyzed solutions, two methods, microwave and simple decomposition, have been proposed. Here the advantages of simple dilution are highlighted. At the same time, it was noted that the acid mineralization method of biological fluids, especially during blood analysis, is used as an optimal method to eliminate various organic matrix and reduce biohazard. The article explains the possibility of using internal standards to eliminate matrix effects and obtain more accurate results. The obtained results provided important information for the analyst-experimenters to evaluate and increase the accuracy level, and at the same time for the doctors to restore the important elements lost in the patient's body during dialysis.

MAQNETRON TOZLANDIRILMASI METODU İLƏ ÇÖKDÜRÜLMÜŞ ZnO:Al TƏBƏQƏLƏRİNİN ELEKTRİK VƏ OPTİK XASSƏLƏRİNƏ TERMİK İŞLƏNMƏ TEMPERATURUNUN VƏ RÜTUBƏTİN TƏSİRİ

Ç.E. SƏBZƏLİYEV¹, N.N. MURSAKULOV^{1,2}, N.N. ABDULZADƏ¹

1. Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu
AZ-1073, Azərbaycan, Bakı, H. Cavid pr.131.

2. Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Radiasiya Problemləri İnstitutu
AZ-1141, Azərbaycan, Bakı, B.Vahabzadə 9.

E-mail: ch.sabzaliyeva@mail.ru tel.: +994 538 04 96

Nazik təbəqəli günəş elementləri üçün omik kontakt kimi istifadə olunan Al-la aşqarlanmış ZnO (ZnO:Al) təbəqələri şüşə altlıqlar üzərində otaq temperaturunda maqnetron tozlandırılması metodu ilə alınmışdır. Rütubətin və havada termik işlənmə temperaturunun ZnO:Al təbəqələrinin elektrik və optik xassələrinə təsiri öyrənilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, temperaturu 250°C-dən 300°C-yə qədər artırıqda təbəqələrin xüsusi müqaviməti iki tərtib artır.

Açar sözlər: günəş elementləri, ZnO:Al, maqnetron tozlandırılması, nazik təbəqələr.

PACS: 42.70.Km; 68.35.Dv; 68.60.Dv; 73.61.Ga; 78.66.Hf; 81.15.Cd

Giriş

ZnO birləşmələrinin daha geniş qadağan zona ($E_g \geq 3.4$ eV), böyük eksiton rabitə enerjisində (60meV) malik olması, maya dəyərinin ucuz başa gəlməsi və ən əsası zəhərli olmaması onların digərlərinə nisbətən üstünlüyünü artırır. Bu materialın səthinin təsturlu formada hazırlanması üçün işığın optik yolunun artmasına, əksolunma əmsalının azalmasına və beləliklə də günəş elementinin effektivliyinin artmasına səbəb olur [2, 5, 7]. ZnO-un müqavimətini azaltmaq məqsədi ilə onları Al-la aşqarlamak daha məqsədə uyğundur. Al-la aşqarlanma zamanı qadağan zonanın eninin və yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının artması fətohəssaslıq spektrinin genişlənməsinə bu da günəş modullarının konversiya əmsalının artmasına gətirir. Yaxşı məlumdur ki, görünən və yaxın ultrabənövşəyi oblastda buraxma əmsalının eləcə də keçiriciliyin böyük olması ön kontaktlar üçün qoyulmuş əsas tələblərdəndir. Cu(In,Ga)Se₂ əsaslı günəş elementləri üçün ön kontakt kimi maqnetron tozlandırılması üsulu ilə alınmış Al-la aşqarlanmış və aşqarlanmamış ZnO nazik təbəqələrindən istifadə olunur [1, 3, 6]. ZnO nazik təbəqələri lazer çökdürməsi, kimyəvi buxar çökdürmə, molekulyar şüa epitaksiya üsulları ilə də alınır. Lakin yüksək çökdürmə sürəti, aşağı çökdürmə temperaturu, kiçik maya dəyərli təbəqələrin alınma bilməsinə görə bu təbəqələrin maqnetron tozlandırılması ilə alınması daha məqsədə uyğundur. Təbəqələrin keçiriciliyini çökdürmə şərtlərini dəyişməklə, həmçinin valentliyi Zn-dən daha böyük olan Al, In, Ga atomları ilə aşqarladıqda artırmaq mümkündür. Tərkib hissələrin sabitliyi günəş elementləri və modullarının etibarlılığını təyin edən əsas parametrlərdəndir. Bu məqalədə ZnO:Al nazik təbəqələrinin elektrik və optik xassələrinə termik işlənmə temperaturu və müddətinin həmçinin rütubətin təsiri öyrənilmişdir [4].

Təcrübənin texniki üsulları

Qalınlığı (0.1 - 1.2) mkm olan Al - la aşqarlanmış ZnO örtükləri (ZnO:Al) maqnetron tozlandırılması metodu ilə şüşə altlıqlar üzərinə çökdürülmüşdür. Diametri 114 mm və qalınlığı 10 mm olan xüsusi iki komponentli hədəf elə yerləşdirilmişdir ki, Zn və Al-un miqdarını (Zn və Al-un təmizliyi 99.99%) dəyişmək mümkün olsun. İstifadə olunan sistem üçün ZnO:Al təbəqələrinin çökdürülməsi optimal şəraitdə - tərkibində 80% Ar və 20% O₂ qaz qarışığı olan atmosferdə və (1.0-1.3) Pa çökdürmə təzyiqində yerinə yetirilmişdir. Altlıq və hədəf arasında məsafə 45 mm, göyərilmə sürəti 30 nm/dəq götürülmüş və sabit cərəyanın gücü 200 Vt-də sabit saxlanılmışdır. Anod üzərindəki altlığın temperaturu əvvəlcədən otaq temperaturuna qədər qızdırılmış və sonra temperatur çökdürmə prosesi zamanı ion bombardmanı səbəbindən 150°C-yə qədər artmışdır. Nümunələrin optik buraxma və əksətdirmə qabiliyyəti (190-3300)nm spektral diapazonda Cary 500 Scan ikiqat şüa spektrometri vasitəsilə ölçülmüşdür. Elektrik müqaviməti Van der Pau metodundan istifadə edilərək Holl effekti ölçmələrindən müəyyən edilmişdir.

Təcrübə nəticələri və onların müzakirəsi

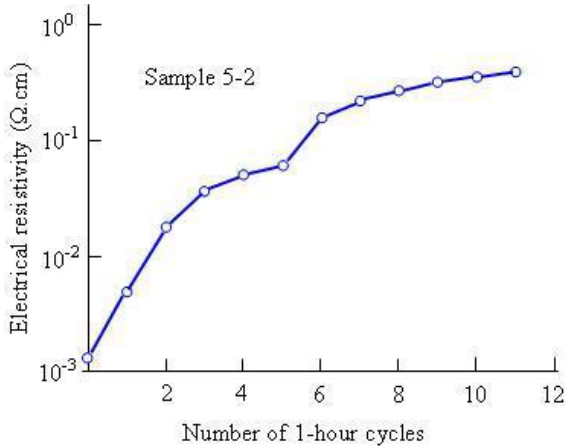
Hazırlanmış təbəqələrin xüsusi müqaviməti otaq temperaturunda geniş intervalda (0,0013-19)Om·sm dəyişmişdir (cədvəl 1 otaq temperaturu sütunu). Müəyyən olunmuşdur ki, xüsusi müqavimət altlığın yekun temperaturu, çökdürmə müddəti və qalınlığın dəyişməsi ilə dəyişir. ZnO:Al təbəqələri emal effektivliyinin ətraflı araşdırılması üçün dörd hissəyə ayrılmaqla hazırlanmışdır (cədvəl 1 otaq temperaturu sütunu, təbəqə 5). 1-ci hissə, 5-1 nümunəsi – havada 300°C temperaturda termik işlənməmişdir. Termik işlənmə 50°C-dən başlayaraq hər bir dövr üçün 1 saat müddətində 50°C - li nominal addımlarla yerinə ye-

tərilmişdir (nümunə 5-1-ə aid nəticələr cədvəldə göstərilmişdir, sıra 5, otaq temperaturu sütunu istisna olmaqla). 2-ci hissə, 5-2 nümunəsi - 100°C-də qaynar su buxarında 1 saat müddətində qızdırılmışdır. 3-cü hissə, 5-3 nümunəsi - doymuş su buxarı atmosferində otaq temperaturunda saxlanılmış və xüsusi müqaviməti bir gün müddətində ölçülmüşdür. Nümunəsinin son işlənməmiş hissəsi 5-0 kimi qeyd olunaraq istinad kimi istifadə edilmişdir. Seçilmiş müxtəlif qalınlıqlı ZnO:Al və 1-5 təbəqələrinin xüsusi müqavimətinin termik işlənmə temperaturundan asılılığı cədvəl 1-də göstərilmişdir. Cədvəldə havada 1 saat müddətində termik işlənmədən əvvəl və sonra (otaq temperaturu sütunu) Holl effekti ölçmələrindən təyin edilmiş ZnO:Al təbəqələrinin xüsusi elektrik müqavimətinin qiymətləri verilmişdir. İlk olaraq müəyyən edilmişdir ki, havada 50°C-də 1 saat termik işləndikdən sonra ZnO:Al təbəqələrinin xüsusi elektrik müqaviməti azalır və sonra termik işlənmə temperaturunun artması ilə tədricən artır. Müqavimətin belə dəyişməsi 1, 2, 3 və 5 nümunələri üçün də müşahidə olunur. Bu, çökdürülmüş təbəqələrin diffuziya və adgeziyası eləcə də nümunələrin uzun müddət havada

termik işlənməsi və yüksək temperaturda oksidləşməsi ilə izah edilir. 50°C-də termik işlənmə prosesindən sonra təbəqələrin quruluşu daha mükəmməl olur, eləcə də havada uzun müddət və yuxarı temperaturda termik işlənmə bu nümunələrin oksidləşməsi ilə nəticələnir. Nümunə 5-2 ardıcıl olaraq 100°C-də su buxarının rütubəti 100 % olan atmosferdə 1 saat qızdırıldıqda onun müqaviməti nəzərə çarpacaq dərəcədə artır (şəkil 1). Əgər belə nəm şəraitdə emalın ilk 5 dövründən sonra müqavimətin iki tərtib artması aşkar edilirsə, 6 - 8 dövr emaldan sonra müqavimətin qiyməti stabilləşir və (2,5 - 3,0) 10⁻¹ Om· sm-ə yaxın qiymət alır. Otaq temperaturunda bir günlük 100 % rütubətin təsirinə məruz qalma müddətinin artması ilə 5-3 nümunəsinin elektrik müqavimətinin davamlı artmasını müşahidə edirik (şəkil 2). Şəkil 1 və 2-dən aydın olur ki, nümunələr daha yuxarı temperaturda termik işləndikdə və rütubətə daha uzun müddətdə məruz qoyulduqda ZnO:Al təbəqələrinin xüsusi müqaviməti artır. Oksigen adətən, elektrik və optik xassələrin pozulmasına (məs. mütəhərriklik və daşıyıcıların konsentrasiyası) səbəb olan oksigen vakansiyalarının yaranmasının qarşısının alınması üçün əlavə edilir [10].

Cədvəl 1.
ZnO:Al təbəqələrinin xüsusi müqavimətinin termik işlənmə temperaturundan asılılığı

Seçilmiş ZnO:Al təbəqələri	ρ , Om sm						
	Otaq temperaturu	50 ⁰ C	100 ⁰ C	150 ⁰ C	200 ⁰ C	250 ⁰ C	300 ⁰ C
1	4.6 10 ⁻²	2.7 10 ⁻²	3.6 10 ⁻²	1.5 10 ⁻¹	8.7 10 ⁻¹	8.1 10 ⁰	-
2	4.3 10 ⁻²	1.9 10 ⁻²	2.8 10 ⁻²	1.4 10 ⁻¹	2.5 10 ⁻¹	4.3 10 ⁰	-
3	1.9 10 ¹	1.4 10 ¹	2.2 10 ¹	1.5 10 ²	3.1 10 ³	-	-
5	1.3 10 ⁻³	1.1 19 ⁻²	1.4 10 ⁻³	3.7 10 ⁻³	1.0 10 ⁻²	1.5 10 ⁻¹	7.7 10 ⁻¹



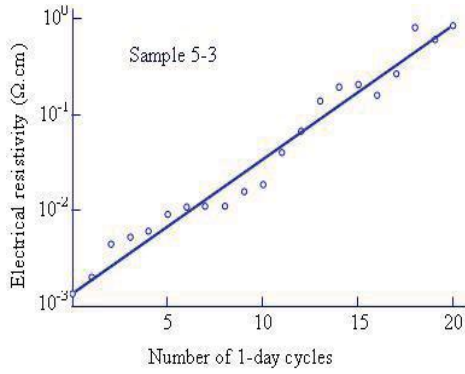
Şəkil 1. 100°C-də qaynar suyun buxarında hər dəfə 1 saatlıq temperatur işlənməsinə məruz qalan ZnO:Al təbəqəsindən ibarət 5-2 nümunəsinin xüsusi müqavimətinin temperatur işlənmələrinin sayından asılılığı

Bununla belə, oksigen həmçinin ZnO:Al təbəqələrinin göyərilməsi və termik işlənməsi zamanı Al oksidin formalaşmasına səbəb olur. Polikrystal təbəqələrdə oksigen atomlarının belə əlavə daxil olması qranula sərhədlərində meydana gələ bilər və bu da elektrik bariyerlərinin formalaşmasına səbəb olur [8,9]. Nümunələrin tərkib analizlərinin nəticələri

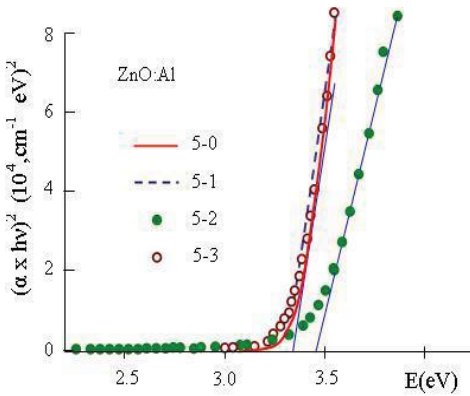
cədvəl 2-də göstərilmişdir. Cədvəldə təqdim olunan nümunələrin tərkib-element analizinin nəticələri göstərir ki, işlənmə temperaturunun və müddətinin, o cümlədən atmosferdə su buxarının konsentrasiyasının artması əsasən 5-2 nümunəsinin tərkibində Zn və Al elementlərinin miqdarının dəyişməsi ilə müşayiət olunur. Səthin sahəsinin təbəqədəki qranulların həcminə nisbətində görə onların sərhədlərinin quruluşu və kimyəvi tərkibi polikrystal təbəqələrin fiziki xassələri üçün xüsusi əhəmiyyətə malik ola bilər. Deməli, ZnO:Al nümunələrinin keçiriciliyinin azalmasını, əsasən səth qranullarının elektron quruluşunun həcmdəki qranulların elektron quruluşu ilə müqayisədə dəyişməsi ilə əsaslandırmaq olar [11,12].

Cədvəl 2.
ZnO:Al təbəqələrinin tərkibi (%-lə)

Nümunələr (uyğun son emaldan sonra)	Konsentrasiya, % - lə		
	Zn	O	Al
5-0	44.83	49.20	5.97
5-1	44.72	48.72	6.56
5-2	46.38	48.89	4.73
5-3	44.36	48.76	6.87



Səkil 2. Qaynar suyun buxarında 1 günlük təsirə məruz qalan ZnO:Al təbəqəsindən ibarət 5-3 nümunəsinin otaq temperaturunda müqavimətinin su buxarında təsir dövrlərinin miqdarından (cəmi 20 dövr) asılılığı.



Səkil 3. ZnO:Al təbəqələrinin udulma spektri. (Burada 5-0 temperatur işlənməsinə məruz qalmayan; 5-1 havada 300°C temperatur işlənməsinə məruz qalmış; 5-2 və 5-3 100°C-də 11 saat ərzində və otaq temperaturunda 20 gün ərzində temperatur işlənməsinə məruz qalmış nümunələrdir).

Səkil 3-də $(\alpha \cdot hv)^2$ və hv koordinatlarında ZnO:Al təbəqələrinin udulma spektri verilmişdir. Bu nümunələrin qadağan zonasının eninin qiyməti grafiğin xətti hissəsinin hv oxuna ekstrapolyasiyası ilə hesablanmışdır [13,14]. Qadağan zonasının eninin qiyməti 5-0, 5-1, 5-3 nümunələri üçün 3.3 eV və 5-2 nümunəsi üçün isə 3.4 eV olduğu müəyyən edilmişdir. 5-2 nümunəsinin qadağan zonasının eninin geniş olması üç səbəblə - sərbəst yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının artması, təmizliyin artması və ya qranula ölçülərinin azalması ilə əlaqədar ola bilər [15,16]. Əhəmiyyətli dərəcədə müqavimət artımı müşahidə edildiyindən birinci hal bizim üçün uyğun deyil. Bundan əlavə, Al (alüminium)-un miqdarının azalması nümunədə Al hissəsinin elektrik aktiv olmadığını göstərir. Biz udma kəndərində işığı buraxmanın kəskin aşağı düşməsinə müşahidə edirik və bu da təbəqədə yaxşı kristallığın göstəricisidir. Al_2O_3 -ün zörün formalaşmasına görə nümunə 5 - 2 daha kiçik qranula və geniş qadağan zonaya malik ola bilər. Əvvəlki hər iki effekt müqavimətin artmasının səbəbi ola bilər[4,17].

Nəticə

ZnO:Al nazik təbəqələri 100°C-də və otaq temperaturunda rütubətli havaya məruz qaldıqda elektrik keçiriciliyinin azalması müşahidə olunur. Termik işlənmə temperaturunu 250°C-dən 300°C-yə qədər artırıqda təbəqələrin elektrik müqaviməti iki tərtib artır. Maqnetron tozlandırılması metodu ilə şüşə altlıqlar üzərinə çökdürülmüş ZnO:Al nazik təbəqələrinin elektrik keçiriciliyinin azalmasını, əsasən səth qranullarının elektron quruluşunun həcmdəki qranulların elektron quruluşu ilə müqayisədə dəyişməsi ilə əlaqədardır.

- [1] J. Hedstrom, H. Ohlsen, M. Bodegart, Kylner, L. Stolt, D. Hariskos, M. Ruckh, H.W. Sckock. Proc 23rd PSE IEEE Photovolt. Spes. Conf. (IEEE, New York, 1993, p. 364.
- [2] N.N. Abdulzadə, S.T. Ağaliyeva, K.Ə. Əsgərova, D.A. Əhmədova, Ç.E. Səbzəliyeva, A.K. Zamanova, N.N. Mursakulov. Maqnit sistemləri sürüşdürülmüş iki maqnetrondan tozlandırılma üsulu ilə nazik təbəqəli günəş elementləri üçün $CuIn_{1-x}Ga_xSe_2$ təbəqələrinin alınması və tədqiqi, AJP FİZİKA, section:Az,2018, v. XXIV, p.13-17.
- [3] F.H. Karg. Sol. Energy Mater. Sol. Cells 66, 2001, 645.
- [4] E.P. Zaretskaya, I.A. Victorov, O.V. Goncharova, T.R. Leonova, M. Gartner, N.N. Mursakulov, N.N. Abdulzadə, Ch.E. Sabzaliyeva. Deposition of Al-doped ZnO films by DC maqnetron sputtering: effects of damp exposure and annealing on their properties. AJP. 2012, v. XVII, № 4, p. 26-27.
- [5] E.P. Zaretskaya, V.F. Gremenok, A.P. Odrinsky, N.N. Abdulzadə, N.N. Mursakulov, Ch.E. Sabzaliyeva. Structure and electrical activity of structure defects of $Cu(In_xGa_{1-x})(S_{1-y}Se_y)_2$ thin films. Azerbaijan Journal of Physics. 2012, v. XVIII, p. 20-22.
- [6] N.N. Abdulzadə, V.M. Andreev, D.A. Əhmədova, N.N. Mursakulov, Ç.E. Səbzəliyeva, M. Yakuşev. CIGSS əsaslı konsentratörün günəş çeviriciləri. AJP. 2018, v.XXIV, № 3, s. 165-166.
- [7] Niyazi N. Mursakulov, Nigar N. Abdulzadə, Sakin H. Jabarov, Chinara E. Sabzaliyeva. Investigation of $CuIn_{1-x}Ga_xSe_2$ thin films for solar cells obtained by the magnetron sputtering method from two magnetrons shifted to each other. New Materials, Compounds and Applications. 2022, vol.6, № 2, p 1-3.
- [8] B.Oh et al. Jpn. J. Appl. Phys. 44, 4776, 2005.
- [9] R. Menner, R. Schaffler, B. Sprecher and B. Dimmerler. Proc. of the 2-nd Intern. Conf. on Photovoltaic Solar Energy Conversion, Vienna, Austria, 1998, p. 660.
- [10] M.K. Jayaraj, A. Antony and M. Ramachandran. Bull. Mater. Sci. 25, 227 (2002).
- [11] Igalson, M. Wimbor and J. Wennerberg. Thin Solid Films 403-404, 320, 2002.

- [12] O.V. Goncharova, F.V. Karpushko and G.V. Sinitsyn, Technical Physics 28, 1142, 1982.
- [13] P. Voitovich, O.V. Goncharova and V.S. Kalinov. J. Appl. Spectrosc. 72, 301 (2005).
- [14] W.E. Dewaney, W.S. Chen, J.M. Stewart, R.A. Mickelsen. IEEE Transactions on Electron Devices. 1990, v. 37, № 2, p 428-430.
- [15] K. Kim et al.. Jpn. Appl. Phys. 44, 4776, 2005.
- [16] T. Minami, H. Nanto and S. Takata. Jpn. J. Appl. Phys. 24, L605, 1985.
- [17] L-S. Hsu et al., J. Optoelectr. Adv. Mater. 7, 3039, 2005.
- [18] Niyazi N. Mursakulov, Nigar N. Abdulzade, Sakin H. Jabarov, Chinara E. Sabzalieva. Investigation of $CuIn_{1-x}Ga_xSe_2$ thin films for solar cells obtained by the magnetron sputtering method from two magnetrons shifted to each other. New Materials, Compounds and Applications. 2022, vol.6, № 2, p 1-3.
- [19] B. Oh et al.. Jpn. J. Appl. Phys. 44, 4776, 2005.
- [20] R. Menner, R. Schaffler, B. Sprecher and B. Dimmerler. Proc. of the 2-nd Intern. Conf. on Photovoltaic Solar Energy Conversion, Vienna, Austria, 1998, p. 660.
- [21] M.K. Jayaraj, A. Antony and M. Ramachandran. Bull. Mater. Sci. 25, 227 (2002).
- [22] Igalson, M. Wimbor, and J. Wennerberg. Thin Solid Films 403-404, 320, 2002.
- [23] O.V. Goncharova, F.V. Karpushko and G. V. Sinitsyn. Technical Physics 28, 1142, 1982.
- [24] P. Voitovich, O.V. Goncharova and V.S. Kalinov. J. Appl. Spectrosc. 72, 301, (2005).
- [25] W.E. Dewaney, W.S. Chen, J.M. Stewart, R.A. Mickelsen. IEEE Transactions on Electron Devices. 1990, V. 37, № 2, p 428-430.
- [26] K. Kim et al. Jpn. Appl. Phys. 44, 4776, 2005.
- [27] T. Minami, H. Nanto, and S. Takata. Jpn. J. Appl. Phys. 24, L605, 1985.
- [28] L-S. Hsu et al., J. Optoelectr. Adv. Mater. 7, 3039, 2005.

Ch.E. Sabzalievə, N.N. Mursakulov, N.N. Abdulzadə

EFFECT OF THERMAL TREATMENT AND HUMIDITY ON ELECTRICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF ZnO:Al LAYERS DEPOSITED BY MAGNETRON SPUTTERING METHOD

Al-doped ZnO (ZnO:Al) films used as ohmic contacts for thin-film solar cells were obtained by magnetron sputtering at room temperature on glass substrates. The effect of humidity and thermal treatment in air on electrical and optical properties of ZnO:Al films was studied. It was determined that when the temperature is increased from 250°C to 300°C, the electrical resistance of the films increases by two orders of magnitude.

QAMMA ŞÜALANMIŞ YSPE/GaAs VƏ YSPE/GaAs<Te> KOMPOZİTLƏRİN QURULUŞU

N.N. Hacıyeva¹, G.B. Əhmədova², R.A. Məmmədov¹

¹ Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyinin Radiasiya Problemləri İnstitutu, Bakı, Azərbaycan

² Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutu
gunayehmedova12@gmail.com

Təqdim olunan işdə otaq temperaturunda 100, 200 və 300 kQr dozalarda qamma kvantlarla şüalanmış YSPE/GaAs və YSPE/GaAs<Te> kompozitlərinin quruluş dəyişikliklərinin optik tədqiqatlarının nəticələri verilmişdir. İlk polimerin və onların kompozit nazik təbəqələrinin qamma şüalanması 220 və 280 nm-də optik udulma zolaqlarının yaranmasına gətirib çıxarır ki, bu da C=O və C=C rabitələrin əmələ gəlməsi ilə əlaqədardır. Müəyyən edilmişdir ki, YSPE/GaAs<Te> kompozitlərinin nazik təbəqələri 100-300 kQr udulmuş doza diapazonunda radiasiyaya ən davamlıdır.

Açar sözlər: yüksək sıxlıqlı polietilen (YSPE), GaAs, GaAs <Te>, γ -şüalanma.

Adətən yeni doldurucular kompozit materialların praktiki tətbiqinin mümkünlüyünün genişləndirilməsinə gətirib çıxarır. Bu nöqteyi-nəzərdən polimer-yarımkeçirici doldurucu tip polimer kompozit materiallar böyük maraq kəsb edir. Polimer matrisaya yarımkeçirici doldurucunun daxil edilməsi onun quruluşunda və xassələrində modifikasiyaya səbəb olur. Bu aspektdə GaAs və GaAs<Te> yarımkeçirici birləşməli yüksək-sıxlıqlı polietilen (YSPE) əsaslı kompozitlər böyük maraq kəsb edir [1-4]. Bu onunla əlaqədardır ki, göstərilən yarımkeçiricilər özünəməxsus kristallik və zona quruluşuna malikdirlər və bu materialları polimerlər üçün modifikasiya edici doldurucu kimi əlavə etməklə müxtəlif elektrofiziki, dielektrik, termik, optik-lüminessens və mexaniki xüsusiyyətlərə malik yeni kompozitlər yarana bilər. Hazırda radiasiya texnologiyaları, polimerlərin və onun kompozit materiallarının fiziki və kimyəvi xüsusiyyətlərini yüksək texnologiyalı tətbiqlərdə yaxşılaşdırmaq üçün geniş şəkildə istifadə edilir. İonlaşdırıcı şüalanma makromolekulyar səviyyədə materialların strukturunda fiziki və kimyəvi dəyişikliklərə səbəb olur. Qamma şüalanmanın təsiri altında polimer-yarımkeçirici kompozit sistemlərinin struktur dəyişikləri və xüsusiyyətləri haqqında verilənlərin əldə edilməsi, çoxfunksiyalı kompozitlərin inkişafını və istehsalını təmin edəcəkdir. Bu, yeni polimer kompozit materiallarının elektron cihazlar və sistemlər üçün arzu olunan xüsusiyyətlərlə hazırlanmasına imkan verəcək və həmçinin yeni xüsusi tip elektrik izolyasiya sistemləri və yüksək gərginlikli texnologiyalar yaratmağa kömək edəcəkdir. Bu işdə YSPE-nin matrisa olaraq seçilməsi onun geniş şəkildə öyrənilməsi ilə əlaqədardır [5-6]. GaAs və GaAs<Te> yarımkeçiricilərinin doldurucu kimi seçilməsi isə onların xüsusi struktura malik olmaları ilə bağlıdır. Bundan başqa, qeyd etmək lazımdır ki, GaAs<Te> radiasiyaya qarşı GaAs-dan daha davamlıdır.

YSPE/GaAs və YSPE/GaAs<Te> kompozitlərinin struktur dəyişiklikləri və optik xassələri doldurucunun konsentrasiyasına bağlı olaraq tədqiq edilmişdir [3]. Lakin, bu kompozitlərdə qamma şüalanmanın təsiri ilə baş verən quruluş dəyişiklikləri öyrənilməmişdir. Buna görə də, bu tədqiqatda YSPE/GaAs və

YSPE/GaAs<Te> kompozitlərinin qamma kvantları ilə şüalanmış halda struktur dəyişiklikləri optik (UV-VIS) spektroskopiyaya metodu ilə aparılan təcrübə nəticələri əsasında təqdim olunur.

Polimer matrisa olaraq PE 2 NT11-285D yüksək sıxlıqlı polietilen (Rusiya, Kazan) seçilmişdir. Bu materialın ərimə nöqtəsi 130°C, sıxlığı isə 947 kg/m³-dur. Doldurucu olaraq GaAs və GaAs<Te> yarımkeçiricilərdən istifadə edilmişdir. YSPE, YSPE/GaAs və YSPE/GaAs<Te> nazik təbəqələri təxminən 100 mkm qalınlığında hazırlanmışdır və doza gücü $d\Phi/dt=1.06\text{Qr/san}$ olan MRX- γ -20 (⁶⁰Co) qamma mənbəli cihazda şüalandırılmışdır. Nümunələr otaq temperaturunda 100, 200 və 300 kGy dozaya qədər müxtəlif şüalanmalara məruz qalmışdır.

Bu nazik təbəqələrin optik buraxma və udma spektrləri Varian-Cary 50 Scan UV-VIS spektrofotometrində 200-800 nm dalğa uzunluğu diapazonunda alınmışdır. Şüalanmadan əvvəl və sonra spektrlərin dəyişməsi müqayisə edilmiş və zolaqların maksimumunda və nisbi intensivliyində baş verən dəyişiklikləri öyrənmək məqsədilə spektral analiz aparılmışdır. Bu tədqiqatda ilkin (şüalanmamış) və qamma şüalanmış YSPE polimerinin, YSPE/ 4 kütlə % GaAs və HDPE/ 4 kütlə % GaAs<Te> kompozitlərinin optik (UV-VIS) udma spektrləri nəzərə alınmışdır. GaAs və GaAs<Te> mikrohissəciklərinin kütlə miqdarının (4 kütlə %) seçilməsi, hər iki kompozitdə bu miqdarda kristallaşma dərəcəsinin eyni qiymətə malik olması ilə əlaqədardır [3]. Məlum olunmuşdur ki, şüalanmamış YSPE polimeri və onun kompozitlərinin tədqiq edilən dalğa uzunluğu diapazonunda ($\lambda=200-800$ nm) udma zolaqları yoxdur. Lakin, şüalanmış YSPE polimeri və onun YSPE/GaAs kompozit nazik təbəqələrinin spektrlərində ~220 nm-də udulma zolağı müşahidə olunmuşdur. Bu zolaq, molekulyar makromolekulda C=O qrupuna malik ketonların olması ilə əlaqədardır. Bu, şüalanma dozasının artması qadağan olunmuş zonanın eninin azalmasına və udma əmsalının qiymətinin artmasına səbəb olur [5-8].

Qeyd etmək lazımdır ki, udma zolağı qamma şüalanma dozasının artması ilə daha uzun dalğa uzunluğuna doğru sürüşür. Qamma şüalanma, C-C rabitəsinin

parçalanmasına və polimer zəncirlərinin dehidrogenləşməsinə səbəb olur və bu da $-C=C-$ rabitələrini xarakterizə edən $\lambda=280$ nm maksimumlu yeni udulma zolağının əmələ gəlməsinə gətirib çıxarır. Qamma şüalanma dozası artdıqca, birləşmiş $-C=C-$ rabitələrinin sayının artması və udma zolağının uzun dalğa istiqamətinə doğru sürüşməsinə səbəb olur ki, bu da FTİR tədqiqatlarının nəticələri ilə uzlaşır. Bu hal eyni zamanda, əlaqə rabitələrinin genişləndirilmiş sistemlərinin formalaşması, yəni karbon klasterlərinin əmələ gəlməsi ilə əla-

qələndirilir [9-13]. ~ 280 nm-dəki udma zolaqları, molekullarda və ya ikiqat, ya da üçqat rabitələri olan birləşmələrdə baş verən elektron $\pi \rightarrow \pi^*$ keçidlərinə aiddir. π -elektronunun həyəcanlanması daha az enerji tələb edir və buna görə də bu tip keçidlər daha uzun dalğa uzunluğunda baş verir.

Aparılan tədqiqatların müqayisəli analizi onu söyləməyə əsas verir ki, araşdırılan bu kompozitlərdə arada radiasiyaya ən davamlısı YSPE/GaAs<Te>dir.

- [1] M.I. Aliev, N.N. Gadzhieva, G.B. Ahmadova. Fourier-IR study of the high-density polyethylene composites with semiconductor fillers GaAs and GaAs<Te>. International Journal of Composite Materials. 2014, № 1, p. 1-3.
- [2] M.I. Aliev, N.N. Gadzhieva, G.B. Ahkmedova. A Fourier Transform Raman Spectroscopic Study of the Structures of Polyethylene Composite Films Containing GaAs and GaAs<Te>; Polymer Science, Series A, 2016, v. 58, № 3, p. 438-442.
- [3] N.N. Gadzhieva, G.B. Ahmadova. Effect of γ -irradiation on the structure of high density polyethylene composites with GaAs and GaAs<Te>; fillers PAST.2020, v.128, № 4, p. 28-30.
- [4] N.N. Gadzhieva, G.B. Ahmadova, S.Z. Melikova, F.G. Asadov. X-ray diffractometric study of HDPE/GaAs and HDPE/GaAs<Te>; composites. Physics and Chemistry of Solid State. 2023, v.24, № 1, p. 23-25.
- [5] D.E. Abulyazied, E.F.M.El. Zaidia. Nanoindentation and optical properties of high density polyethylene. ZnO nanoparticles composites. Journal of Ovonic Research. 2018, v.14, № 5, p. 359-370.
- [6] A.M. Abdul-Kader. The optical band gap and surface free energy of polyethylene modified by electron beam irradiations. Journal of nuclear materials. 2013, v.435, p. 231-235.
- [7] E.A. Kamoun, O.I. Sallam, E.E. Khozemy, M.Morsy, Y. Al-Faiyz, S.M. Matar, A.I. Ali, J.Y. Son, G.H. Ramzy. Effect of gamma irradiation on the electrical and optical properties of PEVA composite membrane embedded with conductive copper fluoroborate glass powder. The Royal Society of Chemistry. 2024, № 5, p.5658-5670.
- [8] I.I. Mustafayev, S.Z. Melikova, E.G. Hajiyeva, R.I. Gasimov, M.A. Bayramov, N.I. Babayeva. Spectral investigations of γ -irradiated polyethylene/CdS+ZnS composite films. Acta Physica Polonica A. 2023, v.144, № 1, p.35-37.
- [9] M.K. Ismayilova, I.I. Mustafayev, S.Z. Melikova, F.N. Nurmammadova, M.H. Aliyeva. The studies on dehydration reaction mechanism of irradiated solid acid-nanostructured sodium-bentonite clay. Physics and Chemistry of Solide State. 2024, v.25. № 2, p.362-367.
- [10] R.M. Sardarly, F.T. Salmanova, N.A. Alieva. Type of Optical Transitions at the Fundamental Absorption edge in TlGaSe₂ and TlInS₂ crystals subjected to gamma radiation // Optics and Spectroscopy. 2019, v. 127, № 3, p. 454-458.
- [11] R.K. Dhillion, P. Singh, S.K. Gupta, S. Singh, R.Kumar. Study of high energy (MeV) N⁶⁺ ion and gamma radiation induced modifications in low density polyethylene (LDPE) polymer. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2013, v.301, p. 12-16.
- [12] A.A. Moez, S.S. Aly, Y.H. Elshaer. Effect of gamma radiation on low density polyethylene (LDPE) films: optical, dielectric and FTIR studies. Spectrochimica Acta Part A - Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2012, v.93, p.203-207.
- [13] S.K. Raghuvanshi, B. Ahmad, A.K. Srivastava, J.B.M. Krishna, M.A. Wahab. Effect of gamma irradiation on the optical properties of UHMWPE (Ultra-high-molecular-weight-polyethylene) polymer. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2012, v.271, p. 44-47.

OPTİK PEYK SİSTEMLƏRİNİN GLOBAL İQLİM DƏYİŞİKLİYİNDƏ ROLU

E.Ö. MANSUROVA

Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu

AZ-1073, Bakı ş., H. Cavid pr., 131

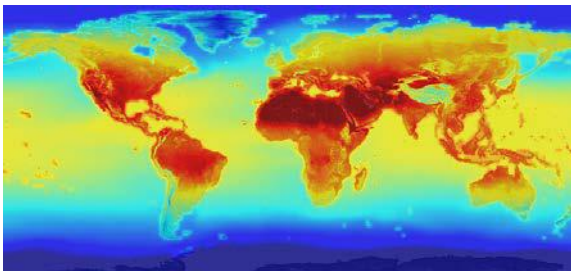
email: esmira.mansurova@yahoo.com

Müasir dünyanın mühüm məsələlərindən biri optik peyk sistemlərinin iqlim dəyişikliyinə rolu və həmçinin onların sayəsində Yer planetinin təbii fəlakətlərdən necə qorunmasıdır.

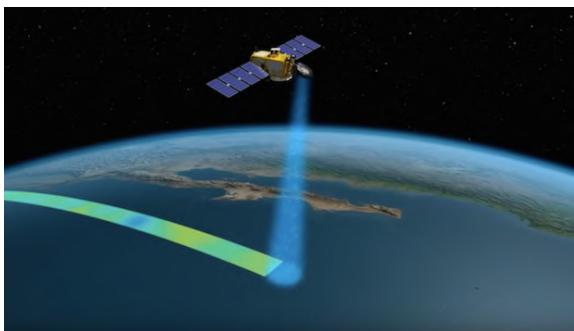
Açar sözlər: Optik peyk sistemləri, iqlim dəyişikliyi, məsafədən duyma metodu və coğrafi məlumat sistemləri

PACS: 42.70.Nq, 78.20.Ci, 72.20.Ht, 72.80

Məlumdur ki, bir çox peyk sistemləri iqlim dəyişikliyi göstəricilərini, məsələn, buzların əriməsi, dünya okeanında suyun səviyyəsinin qalxmasını, hətta atmosferin tərkibində olan CO₂ qazının artmasını və s. qeyd etmək xüsusiyyətlərinə malikdir. Bu peyklərin arasında Jason-3 ən müasirlərindən olmaqla yüksək dəqiqliklə Yerin su səthində ölçmələrin həyata keçirilməsinə imkan verir, beləliklə, qlobal istiləşmənin Dünya okeanına təsirinin anlaşılmasına kömək edir.



Şəkil 1. NASA-nın qlobal iqlim dəyişikliyi ilə bağlı proqnozu.



Şəkil 2. Jason-3 optik peyk sistemi.

Bildiyimiz kimi, XX əsrin ortalarına qədər hələ peyklər Yerətrafi orbitə çıxarılmamışdan öncə iqlim dəyişikliyinə dinamikasını izləmək demək olar ki, mümkün deyildi. Hazırda peyklər vasitəsilə əldə olunan məlumatlar və digər resursların hesabına astronomlar Yer planetində baş verən dəyişikləri qeydə almağı nail olmuşlar. Belə ki, bu kosmik aparat sayəsində ilk dəfə 1985-ci ildə Ozon dəliyi aşkara çıxarılmışdır. Ümumiyyətlə, bu kimi bütün məlumatların toplanması və emalı iqlim dəyişikliyinə qarşı mübarizənin aparılmasında yüksək əhəmiyyət kəsb etdiyini vurğulamaq

vacibdir. Süni peyklər zəlzələ, tufan, sunami, meşə yanğınları və digər təbii fəlakətlərin qarşısının alınmasında çox mühüm rol oynayır. Bu modern və yüksək texnoloji vasitələrin tətbiq olunmasıyla əldə olunan məlumatlar əsasında əksəriyyət iri miqyaslı təbiət hadisələrini proqnozlaşdırmaq, 15miqyası və intensivliyi haqqında əvvəlcədən xəbərdarlıq etmək mümkün olur. Məsələn üçün güclü küləklə bağlı optik peyklə aparılan müşahidələr bu baxımdan dünya iqtisadiyyatı və bütövlükdə bəşəriyyət üçün olduqca faydalıdır.

Bəzi dünya alimləri bir çox insanları düşündürən hətta belə bir sual ortaya qoymuşdular: görəsən Yer orbitindən kənarda əkinçilik (tərəvəz və gülçülük) işləri həyata keçirmək mümkündürmü? Başqa qrup alimlərin apardıqları elmi tədqiqatların nəticələrinə istinadən qeyd olunur ki, Ayda pambıq əkmək olar və hətta bunun üçün Yerdəkindən daha az su sərfiyyatının olacağı ehtimalını irəli sürmüşdülər. Bütün bu biliklər gələcəkdə kənd təsərrüfatının inkişafında mühüm rol oynaya bilər.

Yuxarıda qeyd olunan faktlarla yanaşı kosmik mühitin inkişafı ətraf mühitə neqativ təsirsiz olmadığı da aşkar olmuşdur. Belə ki, hər dəfə raketin fəzaya çıxması nəticəsində ətraf mühitə alüminium oksid yayılır ki, bu da atmosferin stratosfer təbəqəsində yığılır və nəticədə Ozon qatının kəçilməsinə və nazikləşməsinə səbəb olur. Bu da son nəticədə Günəş-Yer sistemində özünün mənfi təsirini göstərir. Sonda Yer səthinin parametrlərinin dəyişməsinə səbəb olmaqla ətraf mühitə mənfi təsirini göstərmiş olur.

Beləliklə, hal-hazırda aparılan araşdırmaların bəzi nəticələrinə görə Yerətrafi orbitdə 20000-dən artıq kosmik tullantı aşkara çıxarılmışdır ki, bura raket detalları, vintlər, köhnəlmiş yaxud istifadə müddəti bitmiş matrislər və s. daxildir.



Şəkil 3. Kosmik fəzada çirklənmə.

Əgər bu tullantılar utilizasiya olunmazlarsa, onda onlar optik peyk sistemlərinə yaxınlaşmaqla və ya təmasda olmaqla bütövlükdə peyklərin mövcudluğuna mənfi təsir göstərə, informasiyanın ötürülməsinə mane ola bilərlər. Bu da öz növbəsində qlobal istiləşmə ilə mübarizədə əldə olunan peyk məlumatların keyfiyyətinə öz neqativ təsirini göstərmiş olar.

Yerin süni peyklərində yerləşdirilmiş avtomatik kosmik cihazlar vasitəsilə alınan geoloji və geofiziki məlumatların işlənilməsi və bu məlumatlardan Yerin inkişaf və quruluşunda əsas qanunauyğunluğu müəyyən etməkdə, eyni zamanda faydalı qazıntıların axtarışında, qlobal və regional geoloji strukturların öyrənilməsində, geoloji xəritələşdirmədə, müasir fiziki-geoloji proseslərin öyrənilməsində və digər məqsədlər üçün istifadə edilməsinin çox faydalı olduğu aşkar olunmuşdur.

Yerin kosmosdan öyrənilməsində həmçinin kosmik şəkillərin (fotoqrafik və televiziya) geoloji və geomorfoloji deşifrə edilməsindən də geniş istifadə olunur. 1960-cı illərdən başlayaraq bir sıra ölkələr qammaşüaları, rentgen şüaları, ultrabənövşəyi, görünən və infraqırmızı diapazonlarda kosmik hadisələri araşdırmaq üçün peyklər orbitə çıxarılmışdır. Peyklər, kosmik stansiyalar və kosmik gəmi missiyaları elm adamlarına Yerin özü haqqında məlumat toplamaq üçün yeni bir perspektivlər açdı. Praktiki tətbiqlərə əlavə olaraq kosmosdan Yerin müşahidəsi fundamental biliklərə əhəmiyyətli töhfələr verdi. Belə ki, SSRİ (keçmiş Sovet İttifaqı) və ABŞ təbiət elmləri tədqiqatlarına həsr olunmuş bir sıra robot peyklər buraxdılar. Bu təcrübələr birlikdə bakteriya, bitki və onurğasız heyvanlardan tutmuş baliqlara, quşlara, qurbağalara, tısbağalara və siçovul və meymun kimi məməlilərə qədər geniş spektrli insan olmayan orqanizmləri əhatə etmişdir.

Bu prosesdə adamlardan ibarət ekipaj üzvləri, həmçinin nevroloji sistemin işləməsi və qocalma prosesi kimi mövzularda tədqiqatlar üçün eksperimental subyektlər kimi xidmət etmişlər. Yerin kosmosdan müşahidəsi fundamental elmlərə mühüm töhfələr vermişdir. Yerin formasını, daxili quruluşunu, fırlanma hərəkətini, okeanların müxtəlif dövrü hərəkətlərini dəqiq müəyyən etməyə imkan verən müxtəlif geodeziya ölçmələrinin aparılması üçün peyklərdən istifadə edilməsi də peyk sistemlərinin tətbiqinin bir nümunəsidir.

Arxeologiya, seysmologiya və okeanoqrafiya kimi müxtəlif sahələr də orbitdən aparılan müşahidə və ölçmələrdən faydalanır. Alimlər qlobal iqlim dəyişikliyinə səbəblərini, proseslərini və təsirlərini, o cümlədən insan fəaliyyətinin təsirini anlamaq və modelləşdirmək üçün okeanoqrafiya və ekologiya kimi sahələrdə hərtərəfli səylərin bir hissəsi olaraq kosmosdan müşahidələrdən istifadə edirlər. Məqsəd planetin gələcəyini formalaşdıran əsas fiziki, kimyəvi və bioloji proseslər haqqında real vaxt intervalları üzrə hərtərəfli məlumat toplununu əldə etməkdir.

Bir çox kosmik proqramlar həm mülki, həm də xüsusi təyinatlı məqsədlər üçün istifadə olunur və buna görə də oxşar sistemlər hər iki sahə üçün hazırlanmışdır. Bu ikili təyinatlı sistemlərin idarəsi və onlardan səmərəli istifadə olunması hal-hazırda da mövcud siyasəti məsələdir.

Məsafədən duyma xəritəçəkmə, faydalı qazıntıların kəşfiyyatı, torpaqdan istifadənin planlaşdırılması, resursların idarə edilməsi və digər fəaliyyətlərdə dəyərli məlumatlar əldə etmək məqsədilə Yerin quru və su səthlərinin müxtəlif xüsusiyyətlərini müşahidə etmək üçün peyklərdən istifadəyə tətbiq edilən termindir. Məsafədən duyma multispektral sensorlarla orbitdən həyata keçirilir, yəni, müşahidələr elektromaqnit spektrinin görünən işığı və adətən digər dalğa uzunluqlarını əhatə edən bir neçə diskret diapazonunda aparılır. Multispektral görüntülərdən analitiklər məhsulun vəziyyəti və növü, çirklənmə nümunələri və su hövzələri kimi müxtəlif maraq sahələri haqqında məlumat əldə edə bilərlər. Birləşmiş Ştatlar 1972-ci ildə NASA-nın ilk məsafədən duyma peyki olan Landsat 1 peykini (əslində Yer Resursları Texnologiyası Peyki adlanır) orbitə çıxardı. Məsafədən duyma texnologiyası iqlim sisteminin dinamikasını və onun quru, okeanlar və ümumi atmosferin məkan-zaman vəziyyətlərindəki dəyişikliklərini başa düşməkdə böyük irəliləyişlər təmin edir. İqlim dəyişikliyinə modelləşdirilməsinə bu mükəmməl texnologiyanın tətbiqi iqlim tədqiqatlarında mühüm sahəni təşkil edir. Məsafədən duyma texnologiyaları indi qlobal, regional və lokal miqyasda, xüsusilə yerüstü müşahidə məlumatlarının az olduğu yerlərdə böyük sürətlə iqlim dəyişikliyinə monitorinq üçün geniş şəkildə tətbiq olunur.

Bu sistem peyk, təyyarə və ya dron əsaslı sensor texnologiyalarından istifadə edərək davamlı, yüksək həssaslığa malik məkan əhatəsi ilə Yerin iqlim sistemini müşahidə etmək üçün yeni üsul təklif edir. İqlim dəyişikliyinə biofiziki sistemlərə təsirlərinin qiymətləndirilməsi, zamanla bu sistemlərdəki dəyişiklikləri qiymətləndirmək üçün məsafədən duyma və coğrafi məlumat sistemləri texnologiyasından geniş istifadə olunduğu olduqca effektiv tədqiqat sahəsidir. Beləliklə, qeyd olunanlar gələcəkdə bu sahədə tədqiqatları təşfiq edəcək, bununla məsafədən duyma metodu və məlumatların təhlili üsullarının effektivliyini artıracaq və onların iqlim dəyişikliyinə təsirlərinin modelləşdirilməsi, monitorinqi və qiymətləndirilməsi ilə bağlı tədqiqatlarda tətbiqini artırır.

Məlumdur ki, Yerin kosmosdan tədqiqi onun asteroid təhlükəsindən qorunması, çoxsaylı ixtiralar etmək, xammalın əldə olunması, ümumi təhlükəsizlik, sülh və sağlamlığın təminatı baxımından olduqca əhəmiyyətlidir. Bundan əlavə qeyd etmək lazımdır ki, iqlim dəyişikliyinə izlənilməsində kosmosdan müşahidələrin aparılması çox önəmlidir. Hazırda dünya üzrə 160-dan çox kosmik aparatda iqlim dəyişikliyinə ölçülməsi üçün cihazlar var.

Nəticə

1. Təqdim edilmiş elmi icmal Yerin kosmosdan öyrənilməsinin əhəmiyyətini göstərir. Burada baş verən proseslərin böyük miqyasda məlumatlarının toplanmasına imkan verir. Digər tərəfdən baş verən proseslər zamanı məlumatların toplanması da bu vasitə ilə həyata keçirməyə imkan verir.
2. İqlim dəyişmələri çox illik məlumatların əldə olunmasını, onların analizini yüksək dəqiqliklə emal etməyi zəruri edir. Burada kosmik metodla əldə olunmuş peyk

informativləri ilə əhəmiyyətli metodlarla əldə olunmuş ilk məlumatlarla müqayisə olunması fürsəti olduqca mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Burada əldə olunan nəticələr müvafiq qərarverici orqanlara düzgün seçim etməyə şərait yaradır.

3. Məsafədən düymə metodu və coğrafi məlumat sistemləri mövcud müşahidə obyektləri haqda daha ətraflı

və dəqiq bilgiləri əldə olunmasına şərait imkan yaradır.

4. Qeyd olunanlar peyk sistemlərində təyinatından asılı olaraq müvafiq optik diapazonlardan istifadə etməklə həyata keçirilir. Bu optik sistemlər müşahidə üçün nəzərdə tutulan iqlim dəyişikliklərinin təbiətindən asılı olaraq müəyyən edilir.

-
- [1] Xander Wang” Remote Sensing for Climate Change” Remote Sens. 2023, 15(3), 747; <https://doi.org/10.3390/rs15030747>
- [2] Yan Y., Wang H., Li G., Xia J., Ge F., Zeng Q., Ren X., Tan L. Projection of Future Extreme Precipitation in China Based on the CMIP6 from a Machine Learning Perspective. Remote Sens. 2022, 14, 4033. [Google Scholar] [CrossRef]
- [3] G.T. Gnitou, G. Tan, Y. Hongming, İ.K. Nooni, Lim Kam Sian, K.T.C. Resolution-Sensitive Added Value Analysis of CORDEX-CORE RegCM4-7 Past Seasonal Precipitation Simulations over Africa Using Satellite-Based Observational Products. Remote Sens. 2022, 14, 2102. [Google Scholar] [CrossRef]
- [4] X. Zhou, G. Huang, Y. Li, Q. Lin, D. Yan, X. He. Dynamical Downscaling of Temperature Variations over the Canadian Prairie Provinces under Climate Change. Remote Sens. 2021, 13, 4350. [Google Scholar] [CrossRef]
- [5] M. John. Logsdon, Encyclopaedia Britannica” Space exploration”, Sep 28, 2024
- [6] Venki Uddameri Global Positioning Systems (GPS) and Remote Sensing GIS and Geocomputation for Water Resource Science and Engineering (pp.81-96), March 2016 DOI: [10.1002/9781118826171.ch7](https://doi.org/10.1002/9781118826171.ch7)
- [7] Mehdi Akhoondzadeh. Earthquake prediction using satellite data” Advances and ahead challenge COSPAR publication Advances in Space Research (ASR), Available online 25 June 2024, Version of Record 5, September 2024.
- [8] Shaohua Zhao, Min Liu, Minghui Tao, Wei Zhou, Xiaoyan Lu, Yujiu Xiong, Feng Li, Qiao Wang. “The role of satellite remote sensing in mitigating and adapting to global climate” Science of the total environment, Volume 904, 15 December 2023
- [9] Kshitij Purwar. “Role of Satellite Data in Monitoring Climate Change”, published on 25 Jul 2022
- [10] K. Wang, Y. Zhou, J. Han, C. Chen, T. Li. Long-Term Tibetan Alpine Vegetation Responses to Elevation-Dependent Changes in Temperature and Precipitation in an Altered Regional Climate: A Case Study for the Three-Rivers Headwaters Region, China. Remote Sens. 2023, 15, 496. [Google Scholar] [CrossRef]

E.O. Mansurova

REVIEW OF SATELLITE OPTICAL SYSTEM FOR CLIMATE CHANGE

One of the important issues of the modern world is the role of optical satellite systems in climate change and also how to protect the planet Earth from natural disasters thanks to them.

Э.О. Мансурова

ОБЗОР СПУТНИКОВОЙ ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПО ИЗМЕНЕНИЮ КЛИМАТА

Одним из важных вопросов современного мира является роль оптических спутниковых систем в изменении климата, а также как благодаря им защитить планету Земля от природных катастроф.

PAMBIQ ÇIYIDLƏRİNİN İMPULSLU ELEKTRİK QAZ BOŞALMASI İLƏ ƏKİNQABAĞI EMALININ EKOLOJİ CƏHƏTDƏN TƏMİZ, QƏNAƏTCİL VƏ SƏMƏRƏLİ ÜSULUNUN İŞLƏNİB HAZIRLANMASI

F.Ş. CƏFƏROVA, Z.A. TAĞIYEVA, S.A. HÜSEYNOVA, S.S. ƏHƏDOVA,
V.M. HACIYEVA

*Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu
AZ-1073, Bakı ş., H. Cavid pr., 131
firuza_djafarova@inbox.ru*

Laboratoriya şəraitində əkinqabağı proseslərdə pambıq çiyidinin bioloji aktivləşdirilməsi məqsədilə yüksək elektrik sahələri və qaz boşalmalarının təsirlərinə əsaslanan ekoloji təminatlı və enerji səmərəli tədqiqatlar aparılmışdır. Aparılan elmi-tədqiqat işlərinin nəticəsində məlum olmuşdur ki, yüksək elektrik sahələri və qaz boşalmalarının təsirlərlə emal olunan, Saatlı rayonun əkin sahəsində əkilən toxum nümunələri həm inkişaf səviyyəsi, həm də məhsuldarlığı ilə fərqlənir.

Açar sözlər: impuls qaz boşalması, elektrotexnologiya, pambıq çiyidi, üzvi və qeyri üzvi çirkləndiricilər, zərərsizləşdirilmə, mikroorqanizmlər, kənd təsərrüfatı, enerji səmərəli, ekoloji cəhətdən təminatlı.

Giriş

Aqrar-sənaye kompleksinin yüksək keyfiyyətli toxum materiallarına artan tələbatı, kənd təsərrüfatı istehsalına yeni texnologiya və praktiki yanaşmaların axtarışını tələb edir. Keyfiyyətə yeni texnologiyalara keçid həm də materialların bioloji xüsusiyyətlərinə və aqro-ekosistemlərin ekoloji tələblərinə maksimum uyğunlaşmanı təmin etməlidir. Aydın ki, fiziki amillərin təsiri yalnız bitkinin genotipindən deyil, həm də toxumun morfoloji xüsusiyyətlərindən, həmçinin toxumun keyfiyyətindən asılıdır.

Yeni, ekoloji cəhətdən təmiz, qənaətcil və effektiv bitki artımının stimulyatorlarının axtarışı bitkiçiliyin, o cümlədən pambıqçılığın ən mühüm problemlərindən biridir. Dünyada geniş istifadə olunan bitki böyüməsi stimulyatorlarının əksəriyyəti kimyəvi preparatlardır və nəticədə ətraf mühitə və insanlara zərər verir.

Son vaxtlar innovativ, ekoloji cəhətdən təmiz yaşıl texnologiyaların intensiv inkişafı və onların xalq təsərrüfatının müxtəlif sahələrində tətbiqi müşahidə olunmaqdadır [1]. Təqdim olunan ekoloji cəhətdən təminatlı və enerji səmərəli, elektrik qaz boşalmalarının təsirlərinə əsaslanan elektrotexnologiya kənd təsərrüfatında əkin qabağı pambıq bitki toxumlarının patogen mikroorqanizmlərdən zərərsizləşdirilməsi istiqamətində istifadə olunacaq və hal-hazırda əkinçilikdə zərərli kimyəvi reagentlərin istifadəsinin qarşısını alacaqdır.

Müəlliflər tərəfindən [2] 14-30 kV-luq gərginlikli və 800 ns müddətli impulsların su-hava mühitlərinə təsiri zamanı yeraltı suların impuls arakəsməli qaz boşalmaları vasitəsilə zərərsizləşdirilməsi məsələlərinə baxılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, emal olunan mühitdə mövcud ağır metal və kumin turşularının miqdarı, qaz boşalması zamanı formalaşan kimyəvi aktiv elementlər və birləşmələrin (atomar oksigen, ozon və s.) təsiri nəticəsində, maksimal dərəcədə azalması müşahidə olunur.

Yüksək elektrik impuls sahələrinin bitki hüceyrələrinin membranlarına təsirlərinin tədqiqi müəlliflər [3] tərəfindən aparılmışdır. Onlar membranların bir neçə modellərini təsvir etmişdirlər. Tədqiqatçı tərəfindən

kartof, banan və alma toxumalarına yüksək elektrik sahələrinin təsirləri nəticəsində bioloji hüceyrələrinin elektrik keçiriciliyini artırılması məsələsinə baxılmışdır.

Tacikistan Respublikasında pambıq toxumlarının səpinqabağı ultrabənövşəyi və aşağı temperaturlu plazma şüalanması üsulları ilə səpin keyfiyyətlərinin yaxşılaşdırılması istiqamətində işlər görülmüşdür. Optik şüalanma məhsuldarlığı artırmaq və ekoloji cəhətdən təmiz məhsullar əldə etmək üçün effektiv, eyni zamanda, nisbətən sadə və ucuz üsuldur, lakin hazırda pambıq toxumlarının səpindən əvvəl emalı üçün standart şüalanma qurğularından istifadə etmək mümkün deyil, çünki pambıq toxumlarının qabığı qalın və tüklüdür, bu da əkinqabağı emalı çətinləşdirir [4-7].

Digər alimlər eksperimental olaraq sübut etdilər ki, elektro-dezinfeksiyanın səmərəliliyi elektro-aktivləşdirilmiş su ilə nəmlənmiş pambıq toxumlarının elektro-termik təsir və ultrabənövşəyi şüalarla şüalanma ilə artır. Müəyyən edilmişdir ki, pambıq becərilməsi elektrotexnologiyasının ən böyük səmərəliliyinə toxumların elektroaktivləşdirilmiş su ilə iki mərhələli isladılması, sonra elektroaktivləşdirilmiş su ilə çiləmə ilə birlikdə vegetativ bitki orqanlarının mərhələli UVR-nin həyata keçirilməsi ilə əldə edilir [8-9].

Bununla əlaqədar olaraq, laboratoriya şəraitində əkinqabağı proseslərdə pambıq çiyidinin bioloji aktivləşdirilməsi məqsədilə yüksək elektrik sahələri və qaz boşalmalarının təsirlərinə əsaslanan ekoloji təminatlı və enerji səmərəli tədqiqatlar aparılmışdır. Qoyulan məqsədin reallaşması üçün yüksək gərginlikli elektrik qurğusu və onun ayrı-ayrı elementləri işlənmişdir, tədqiqat mühitlərində yüksək elektrik sahələrinin təsiri zamanı baş verən fiziki-kimyəvi proseslərin tədqiqi, onların bu mühitlərdə mövcud zərərli üzvi və qeyri üzvi çirkləndiricilərlə patogen mikroorqanizmlərə təsirlərinin öyrənilmişdir.

Bundan başqa yüksək elektrik sahələrinin təsiri nəticəsində pambıq çöpünü mineral gübrələrlə birlikdə tətbiqinin pambıq bitkisinin inkişaf mərhələləri üzrə təsiri, eyni zamanda torpaq münbitliyinin artırılmasına təsiri öyrənilmişdir.

Sadalanlarla yanaşı, pambıqçılıqda əsas vəzifələrdən biri də bütün məhsulu vaxtında və itkisiz yığmaqdır. Sonuncuya yalnız pambıq bitkilərinin yığıma keyfiyyətli hazırlanması və xam pambığın yığılması prosesində texnologiyadan geniş istifadə etməklə nail olmaq olar.

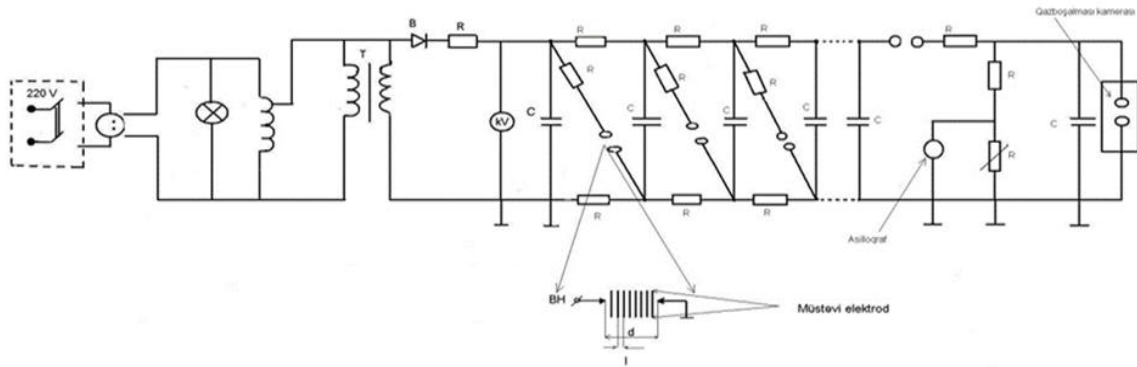
Məqsəd

Məqsədımız elektrik qaz boşalmaları vasitəsilə əkinqabağı proseslərdə pambıq çiyidinin elektron emalının aparılması və tədqiqat obyektlərinin məhsuldarlığına bilavasitə neqativ təsir göstərən müxtəlif patogen mikroorqanizmlərin zərərsizləşdirilməsinə nail olmaqdır.

Obyekt və tədqiqatın metodikası

Qeyd etmək lazımdır ki, ardıcıl iki il ərzində, Azərbaycan Respublikasının Saatlı rayonundan götürü-

lən pambıq çiyidinin nümunələri üzərində əkinqabağı, yüksək gərginlikli mikrosaniyəli impuls qazboşalmasıının təsirləri vastəsilə aktivləşdirilməsi prosesi üzrə laboratoriya şəraitində elmi-tədqiqat və təcrübə işləri yerinə yetirilmişdir. Nümunələr atmosfer təzyiqində və otaq temperaturunda 8-14 kV elektrik gərginliyində və 5-15 dəqiqə müddətlərində yüksək elektrik sahəsi impuls qazboşalmasıının təsirlərində emal olunurlar. Müqayisə üçün elektrik impulsu qazboşalmalarının təsirlərində işlənilməmiş nümunələrdən ayrıca saxlanılmışdır və emal olunmayan pambıq çiyidlərinin nümunələri də tədqiq edilmişdir. İmpuls qazboşalmasıının pambıq çiyidinin nümunələrinə təsiri şəkil 1-də göstərilən, aşağıdakı parametrlərə malik yüksək gərginlikli impuls gərginliyi generatorundan istifadə edilmişdir: çıxış impuls gərginliyinin amplitudası $U=3-15$ kV; gərginlik impulsunun təkrar tezliyi $f=20-300$ Hz; nəbz müddəti $\tau=5-10$ ns; gərginlik impulslarının ön (kəsmə) müddəti $\tau_{fr}(\tau_{av})=2,5-3$ ns.



Şəkil 1. İmpuls gərginlik generatorunun prinsipial sxemi.

ARETN-nın Fizika institutunun əməkdaşları tərəfindən Saatlı rayonunun əkin sahəsinin bir hektarında tədqiqat aparılan və emal olunmuş pambıq çiyidlərinin əkilməsi həyata keçirilmişdir. Pambıq çiyidlərinin cücərməsi əyani şəkildə müşahidə edilmiş və görülənlərin nəticəsi gün bə qün əkin yerində müşahidə edilmişdir. Müəyyən müddətdən sonra elektrik sahəsində impulsu qaz boşalması ilə işlənmiş pambıq kollarında, adi əkilmiş kollar ilə müqayisədə, qozaların yetişməsinin sürətlənməsini (10-15 günə) müşahidə etmək mümkün olmuşdur.

Çiyidlərin çürüməsinə səbəb olan patogen mikroorqanizmlərin elektrikle dezinfeksiya edilməsi və pambıq çiyidlərin impulsu boşalmanın elektrik sahəsində stimullaşdırılması üzrə əldə edilmiş eksperimental sahə nəticələri 1 və 2 cədvəllərdə göstərilmişdir.

Pambıq yetişdirmək üçün hazırlanmış ekoloji cəhətdən təmiz elektrik texnologiyası pestisidlərdən istifadəni aradan qaldırır, çiyidin cücərməsinin sürətləndirilməsini və sabitləşməsinə, yetişmənin sürətləndirilməsini (10-15 günə) və gövdələrin sürətlə açılmasını, keyfiyyət göstəricilərinin yaxşılaşdırılmasını, pambıq məhsuldarlığının artırılmasını təmin edir. Eyni zamanda, xam pambığın məhsuldarlığı xüsusilə ilk yığımda 50-70%-ə qədər yüksəlir, pambıq lifinin keyfiyyət göstəriciləri pambıq yetişdirilməsinin ənənəvi aqrutexnikasına nisbətən yaxşılaşır (şəkillər 2-4).



Şəkil 2. Əkin sahəsində adi pambıq çiyidlərinin kolları.



Şəkil 3. Əkin sahəsində impuls qaz boşalmasında emal olunmuş pambıq çiyidlərinin kolları.



Şəkil 4. Adi pambıq çiyidindən əldə olunan pambıq lifi (qısa olan) və impuls qaz boşalmasında emal olunmuş pambıq çiyidindən alınan pambıq lifi (uzun olan).

Pambıq çiyidinin əkin keyfiyyətlərinə impuls təkrar tezliyi 20-300 Hz olan impulsu elektrik sahəsinin (PEF) təsirinin nəticələri göstərmişdir ki, cücərmə enerjisi 15-18%, cücərmə isə nəzarət çiyidlərindən 19-20% yüksəkdir. Belə ki, pambıq çiyidinin səpinqabağı impulsu qaz boşalmasında emal edilməsi onların səpin keyfiyyətlərini yaxşılaşdırır, ontogenezin ən erkən mərhələlərində bitki böyüməsini aktivləşdirir, səpin və çıxma arasındakı vaxtı azalda bilər. Eyni zamanda, hazır xam pambıq məhsullarının keyfiyyətinin yaxşılaşması müşahidə olunur: tərkibində şəkər, nişasta, yağlar və digər maddələr [10-15]. Pambıq aqrosenozunda aparılan aqrotexniki tədbirlər nəticəsində mikroorqanizmlərin yaşayış şəraiti kəskin şəkildə dəyişir.

Mikroorqanizmlərin sayı ayrı-ayrı təbəqələrdə (0-20 sm; 20-40 sm) və 1q quru torpaqda müvafiq olaraq 2262-2153min ədəd artır. Mikroorqanizmlərin qrup tərkibi də keyfiyyətcə dəyişir. Belə ki, 1 q quru torpaqda bakteriyaların sayı 391 minə, spor əmələ gətirən bakteriyalar 34,5 minə, aksinomiset və mikroskopik göbələklərin sayı isə 362 və 5 minə qədər torpağın aşağı təbəqələrində azalır.

Pambıq aqrosenozunda torpaq mikroorqanizmlərinin qrup tərkibi təmizlənməmiş torpaqla müqayisədə xeyli dəyişir. Yuxarı 0-20 sm torpaq qatında 1q quru torpaqda bakteriyaların ümumi sayı 1672 minə, o cümlədən spor əmələ gətirən bakteriyalar 447 minə, aksinomisetlər və mikroskopik göbələklər müvafiq olaraq 575 minə və 15 minə yüksəlmişdir (cədvəl 1).

Cədvəl 1

Dənli-boz torpaqlarda mikroorqanizmlərin kəmiyyət göstəriciləri.

Senoz	1 q torpaqda mikroorqanizmlərin ümumi sayı (1000 q/torpaq)					
	Dərinlik, sm	Mikroorqanizmlərin ümumi sayı	Bakteriya-ların ümumi miqdarı	Basil	Actinomesetes	Göbələklər
Təbii enoz (rütubətli torpaq)	0-20	1454	811	56	635	8
	20-40	758	391	34,5	362	5
Aqrosenoz (pambıq sahəsi)	0-20	2262	1672	447	575	
	20-40	2153	1720	390	424	8

Selülozu parçalayan mikroorqanizmlər

Senoz	Selülozu parçalayan mikroorqanizmlərin faizi				
	Dərinlik, sm	Bakteriyal		Göbələklər	
		1000 1 qr. quru torpağa	%	%	1000 1 qr. quru torpağa
Təbii enozlar (rütubətli torpaq)	0-20	308,2	38	50	4,0
	20-40	117,3	30	38	2,28
Aqrosenoz (pambıq sahəsi)	0-20	518,3	31	53	7,90
	20-40	533,2	31	46	4,14

Aqrotexniki tədbirlər - torpağın becərilməsi, kübrələmə, pambığın suvarılması və s. mikroorqanizmlərin ümumi sayına və qrup tərkibinə müsbət təsir göstərmişdir. Torpaq mikroorqanizmləri bitki qalıqlarının çevrilməsində fəal iştirak edirlər. Bu prosesdə sellülozu parçalayan mikroorqanizmlərin böyük əhəmiyyəti vardır (cədvəl 2).

Bitki qalıqlarında olan mürəkkəb karbohidratlar (polisaxaridlər) monomerlərdən (monosaxaridlər) – fruktoza, qlükoza, ribozadan ibarətdir. Parçalanma prosesi nəticəsində polisaxaridlər disaxaridlərə parçalanır, sonra isə monosaxaridlərə çevrilir. Monosaxaridlər suda çox həll olur, bitki kökləri tərəfindən asanlıqla sorulur və ümumi metabolik prosesdə (maddələr mübadiləsində) iştirak edir. Buna görə də torpaqda mikrobioloji prosesləri aktivləşdirmək üçün lazımı gübrə və suvarma normalarını təmin edən düzgün əkinçilik texnologiyası vacibdir.

Əkinqabağı prosesdə pambıq çiyidlərinə impulsu elektrik sahəsinin təsirinin mexanizmi

Təqdim olunan eksperimental məlumatlardan elektrik impuls sahəsinin pambıq çiyidlərinə stimullaşdırıcı təsiri aydın görünür. Güman etmək olar ki, elektrik impuls sahəsinə məruz qalma anında pambıq çiyidlərinin daxilində elektrik yüklərinin yenidən bölüşdürülməsi baş verir ki, bu da öz növbəsində bitkinin sonrakı böyümə və inkişafına təsir edən fiziki-kimyəvi proseslərin gedişatını dəyişdirir. Stimullaşdırıcı təsirin yüksək nəticəsi emal zamanı əlavə enerjinin alınması hesabına çiyiddə bioloji proseslərin gedişatının artması ilə izah olunur.

Elektrik sahəsinə məruz qalan çiyidlərin ilkin inkişaf mərhələlərinin aktivləşdirilməsi şitillərin morfoloji xüsusiyyətlərinin dəyişməsinə səbəb olur. Bitkilərdə ilk internodlar uzanır və nəzarətlə müqayisədə daha güclü kök sistemi formalaşır. Çox vacibdir ki, kök böyüməsi bitkilərin daha sürətli köklənməsinə və yaz nəmindən və qida maddələrindən daha yaxşı istifadəyə kömək edir.

Elektrik stimulyasiyasının təsir dərəcəsi müalicə rejimindən asılıdır. Ən yaxşı nəticələr çiyidlərə elektrik impuls cərəyanından $U=11kV$, 15 dəqiqə istifadə et-

məklə qeydə alınıb. Fidanların morfofizioloji parametrlərində müşahidə olunan artım məhsuldarlığın artmasına şərait yaradır. Elektrik impuls sahəsindən istifadə edərək elektrik stimullaşdırılması, embrionun fizioloji vəziyyətini kimyəvi tərkibindəki dəyişikliyə qədər "istirahət" vəziyyətindən "oyanma" və aktiv böyümə vəziyyətinə köçürməyə imkan verir. Və yuxarıda qeyd edildiyi kimi, elektrik sahəsinə məruz qalma anında çiyidin içərisində elektrik yüklərinin yenidən bölüşdürülməsi baş verir ki, bu da öz növbəsində bitkilərin sonrakı böyüməsinə və inkişafına təsir edən fiziki-kimyəvi proseslərin gedişatını bir qədər dəyişdirir.

Elektrik impuls sahəsinin pambıq çiyidlərinə stimullaşdırıcı təsiri aqrobiosenzlarda zərərvericilərin minimuma endirilməsi və entomofaqların dövrünün maksimumlaşdırılması problemini həll etməyə kömək edir.

Bunun nəticəsi iqtisadi cəhətdən təhlükəli zərərvericilər və yoluxucu xəstəliklər də daxil olmaqla, zərərli amillər kompleksinə qarşı bitki müqavimətinin formalaşmasıdır. Təcrübələr zamanı müəyyən edilmişdir ki, pambıq çiyidlərinin impulsu boşalmanın elektrik sahəsində emal edilməsi fitofaqların sayını və zərərliliyini müvafiq olaraq 46,5-68,3% və 13,1-88,5% azaltmağa kömək edir. Bundan əlavə, bitkilərin müxtəlif zərərvericilərdən qorunmasında bu texnikanın effektivliyi birbaşa müalicə rejimindən asılıdır1.

Nəticələr

Eksperimental üsulla pambıq çiyidlərinin müxtəlif patogen mikroorqanizmlərdən zərərsizləşdirilməsi istiqamətində impulsu qaz boşalmasının təsiri öyrənilmiş və optimal iş rejimi ($U=11kV$, 15 dəqiqə) müəyyən edilmişdir.

Pambıq çiyidlərin eksperimental nümunələrinin müxtəlif bioloji strukturlarına güclü elektrik sahəsinin və impuls qaz boşalmasının təsiri öyrənilmişdir.

Müəyyən edilmişdir ki, səpinqabağı prosesdə pambıq çiyidlərinin impulsu qaz boşalması sahəsində işlənməsi pestisidlərdən istifadəni aradan qaldırır, çiyidin cücərməsinin sürətləndirilməsini və sabitləşməsinə, yetişmənin sürətləndirilməsini (10-15 günə) və pambıq qozalarının sürətlə açılmasını təmin edir. Eyni zamanda, xam pambığın məhsuldarlığı, xüsusilə ilk yığımnda, 50-

70% yüksəlir, pambıq lifinin keyfiyyət göstəriciləri pambıq yetişdirilməsinin ənənəvi aqrotexnikasına nisbətən yaxşılaşır.

Əldə edilmiş nəticələr əsasında pambıq yetişdirilməsi üçün ekoloji cəhətdən təmiz, qənaətcil və səmərəli elektrik texnologiyasının hazırlanması təklif olunur.

- [1] *М. Исмаилов.* Электротехнология в производстве хлопка-сырца. Автореферат диссертации по процессам и машинам агроинженерных систем доктора технических наук, Москва, 1997, Специальность 05.20.02.
- [2] *Т.Н. Стерхова, А.В. Савушкин, А.А. Сиротин, П.Д. Корнаухов.* Электрический способ обеззараживания семян сельскохозяйственных культур.
- [3] *О.Г. Долговых, В.В. Красильников, Р.Р. Газтдинов.* Влияние лазерной обработки на семена яровой пшеницы Ирень [Электронный ресурс] «Инженерный вестник Дона», 2012, №4, Режим доступа: <http://www.ivdon.ru/magazine/archive/n4p2y2012/1422> (доступ своб., Загл. с экрана., Яз. рус.
- [4] *Р.З. Юлдашев.* Повышение посевных качеств семян хлопчатника в республике таджикистан методами предпосевного ультрафиолетового и низкотемпературного плазменного облучения. Электротехнологии и электрооборудование в сельском хозяйстве, автореферат диссертации на соискание ученой степени к. т. н, Санкт-Петербург 2013.
- [5] *Р.З. Юлдашев.* УФ-обеззараживание семян хлопчатника перед посевом. Научное обеспечение развития АПК: проблемы и решения. Сбор, научн. трудов. СПбГАУ, 2011, СПб, с.375-377.
- [6] *Р.З. Юлдашев.* Использование низкотемпературных плазменных технологий в предпосевной обработке семян хлопчатника. Известия СПбГАУ, 2012, № 28, с. 391-394.
- [7] *А. Мухаммадиев, Р.Д. Матчанов, М.И. Исмаилов др.* Эко-технология выращивания хлопчатника. Аграрная наука. 1996.
- [8] Применение сильных электрических полей. <https://studfile.net/preview/8635563/#2> Файловый архив студентов.
- [9] *А.Г. Хныкина, Е.И. Рубцова, Г.П. Стародубцева, Ю.А. Безгина.* Влияние импульсного электрического поля на микрофлору семян сельскохозяйственных культур. Современные проблемы науки и образования. 2012, № 6.
- [10] *В.И.Хайновский, Г.П.Стародубцева, Е.И.Рубцова.* Применение импульсного электрического поля для предпосевной стимуляции семян. Механизация и электрификация сельского хозяйства, 2008, № 7, с. 9–11.
- [11] *В.И.Хайновский, Г.П.Стародубцева, Е.И. Рубцова.* Предпосевная стимуляция семян сои импульсным электрическим полем. Механизация и электрификация сельского хозяйства. 2007, № 10, с. 17–18.
- [12] *Г.П. Стародубцева, Е.И. Рубцова и др.* Разработка способа предпосевной обработки семян сельскохозяйственных культур импульсным электрическим полем (ИЭП) и экономическое обоснование его. Научный журнал КубГАУ, № 75(01), 2012.
- [13] *Е.И. Рубцова, Ю.А. Безгина, И.А. Боголюбова, М.А. Афанасьев.* Использование физических факторов в сельском хозяйстве Ставрополь,
- [14] *Е.И. Рубцова.* Электрофизические способы предпосевной обработки семян зерновых культур. 16 сентября 2019 г. Светич. Агро Медиа Холдинг. www.Svetic.N.info.
- [15] Параметры импульсного электрического поля и режимы обработки семян сои в технологическом процессе улучшения ее посевных качеств: дис. канд. техн. наук. Ставрополь, 2007. 207 с.

F.Sh. Jafarova, Z.A. Tagiyeva, S.A. Guseynova, S.S. Akhadova, V.M. Gadjiyeva

DEVELOPMENT OF ENVIRONMENTALLY CLEAN ECONOMICAL AND EFFECTIVE METHOD OF PRE-SOWING TREATMENT OF COTTON SEEDS USING THE EFFECT OF HIGH VOLTAGE IMPULSE DISCHARGE

The effect of pulsed gas discharge on experimental samples of cotton seeds in the direction of neutralizing seeds from various pathogenic microorganisms was studied experimentally and the optimal operating mode was determined. The effect of pulsed discharge on various biological structures of cotton seeds was investigated. It has been found that pre-sowing treatment of cotton seeds in a pulsed discharge eliminates the use of pesticides, accelerates seed germination, ripening and opening of bolls, improves the quality of cotton fiber, and increases cotton yields by 50-70%. Based on the results obtained, it is proposed to develop an environmentally clean economical, cost-effective and efficient electrical technology for growing cotton.

Ф.Ш. Джафарова, З.А. Тагиева, С.А. Гусейнова, С.С. Ахадова, В.М. Гаджиева

РАЗРАБОТКА ЭКОЛОГИЧЕСКИ ЧИСТОГО, ЭКОНОМИЧНОГО И ЭФФЕКТИВНОГО СПОСОБА ПРЕДПОСЕВНОЙ ОБРАБОТКИ СЕМЯН ХЛОПЧАТНИКА ИМПУЛЬСНЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ

Экспериментальным методом изучено влияние импульсного газового разряда на опытные образцы семян хлопка в направлении обезвреживания семян от различных патогенных микроорганизмов и определен оптимальный режим работы. Исследовано влияние импульсного разряда на различные биологические структуры семян хлопка. Выявлено, что предпосевная обработка семян хлопка в импульсном разряде исключает применение ядохимикатов, обеспечивает ускорение всхожести семян, созревания и раскрытия коробочек, улучшение качественных показателей хлопкового волокна, повышение урожайности хлопчатника до 50-70%. На основании полученных результатов предлагается разработать экологически чистую, экономичную и эффективную электротехнологию выращивания хлопчатника.

AŞAĞIÖLÇÜLÜ SİSTEMLƏRDƏ YÜKDAŞIYICILARIN SƏPİLMƏSİ VƏ İŞIĞIN UDULMASI

H.B. İBRAHİMOV, R.Z. İBAYEVA

*Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu
AZ1073, Bakı ş., H. Cavid pr., 131*

Bu işdə maqnit sahəsində yarımkeçirici ifratqəfəslərdə zonadaxili optik keçidi, kvant nöqtələrdən ibarət ifratqəfəslərdə fononlardan səpilməklə elektromaqnit şüalanmasının sərbəst yükdaşıyıcılar ilə udulması və silindrik kvant məftildə kvazi bir ölçülü elektron qazı üçün şüalanma sahəsinin məftilin uzunluğu boyunca polyarlaşdığı halda yükdaşıyıcılar akustik fononlardan səpildikdə sərbəst yükdaşıyıcıların udulması nəzəriyyəsi tədqiq edilmişdir. Eyni zamanda parabolik konfaynment potensialı kvant məftildə elektronlar ilə elektromaqnit şüalanmasının udulmasına və fononlardan səpilməsinə baxılmışdır. Bundan başqa uzununa maqnit sahəsinin təsiri altında kvant daralmasında işığın udulması və Raşba spin-orbital qarşılıqlı təsiri nəzərə alınmaqla iki ölçülü elektron qazının xətti polyarlaşmasının zonadaxili udulması araşdırılmışdır.

Açar sözlər: aşağıölçülü sistemlər, kvant məftil, konfaynment, sərbəst yükdaşıyıcılardan işığın udulması, kvant daralma.

DOI: 101134/1.2045365

Müasir elm və texnikanın nailiyyətləri arasında süni yaradılmış yarımkeçirici strukturlar xüsusi yer tutur. Kvant effektlərin yaranması ilə bu yarımkeçirici strukturlar unikal fiziki xüsusiyyətlərə malik olur. Onlardan daha intensiv şəkildə öyrəniləni ölçüyə görə kvantlanma effektidir. Bu effekt sistemin xarakterik ölçüləri zərrəciklərin de Broyl dalğası qiyməti ilə müqayisə oluna bildikdə, həmin zərrəciklərin hərəkətinə qoyulan məhdudiyətlər nəticəsində yaranır. Aşağıölçülü sistemlərin bir çox növləri mövcuddur: kvant çuxur, ifratqəfəslər, kvant məftil, kvant nöqtə, kvant halqa, kvant disk və s.

Müasir texnologiyanın nailiyyətləri, məsələn, kompüter nəzarəti vasitəsilə molekulyar şüa epitaksiya metodu istənilən konfaynmentli, o cümlədən parabolik potensial ilə ölçülü-məhdudlanan yarımkeçirici sistemlər almağa imkan verir. Parabolik potensiallı sistemlərdə ölçülü kvantlanma effekti eni kifayət qədər böyük kvant çuxurlarda (1000Å-dən böyük) yaranır və $T \sim 100$ K temperaturda enerji spektrinin kvantlanması sistemin xassələrinə nəzərə çarpacaq dərəcədə təsir edir. Potensialın kvadratik asılılığı sistemin bir çox xarakteristikasının analitik şəkildə ifadəsini almağa imkan verir, bu da baxılan fiziki halları analiz etmək üçün əlverişlidir.

Elektrik və maqnit sahələrinin yarımkeçirici strukturlarda optik şüalanmaya təsiri zamanı yeni effektlər müşahidə olunur, bu da daha çox mükəmməl cihazların yaranmasına gətirib çıxarır. Maqnit sahəsinin və nanostrukturların həndəsi formasının optik və kinetik xassələrə təsirinə öyrənilməsi nanoelektronikanın aktual istiqamətlərindən biridir. Müxtəlif aşağıölçülü strukturlarda elektron qazının spektral xassələrinin əsas tədqiqat metodlarından biri elektromaqnit şüalanmasının təsiri altında zonadaxili elektron keçidlərinin araşdırılmasıdır. Nanostrukturların spektral xüsusiyyətlərinin öyrənilməsində rezonans udulmanın tədqiqi, kinetik ölçmələrindən daha üstündür, çünki sistemin fiziki xüsusiyyətlərinə təsir göstərə bilən kontakt sistemləri ilə əlaqə yaratmaq tələb olunmur. Son onilliklərdə yarımkeçiricilərdə və nanostrukturarda spin hadisələri geniş şəkildə tədqiq olunur: spin-orbital qarşılıqlı tə-

sirinin xüsusiyyətləri, elektron və deşiklərin spin dinamika, elektron sistemdə fotonun bucaq momentinin ötürülməsi prosesləri geniş araşdırılır. Bu effektlər yük və spin sərbəstlik dərəcələrinin birgə öyrənilməsi ilə müəyyən olunmuşdur. Elmin bu bölməsi spintronika adlandırılır. Bundan başqa, aşağıölçülü strukturlarda həcmi materiallarla müqayisədə relaksasiya müddəti daha böyük olur.

Yüksək tezlikli elektromaqnit şüalanmasının zonadaxili udulmasının tədqiqinin əsas aspekti onunla əlaqədardır ki, diskret enerji spektri halında udulma əyrisi müəyyən nöqtələrdə rezonans pikinə malikdir və bu nöqtələrdə şüalanma tezliyi elektronların enerji səviyyələri arasındakı məsafəyə bərabərdir. Bu halda müəyyən olunan rezonans tezliyi, nanostrukturarda lateral konfaynment və elektron enerji spektrinin parametrləri haqda məlumat almağa imkan verir.

Maqnit sahəsində yarımkeçirici ifratqəfəslərdə zonadaxili optik keçidi tədqiq edilmişdir [1]. Maqnit sahəsi ifratqəfəsin səthinə perpendikulyar yönəldikdə Landau kvantlanması baş verir və enerji diskret səviyələrə ayrılır. Eyni zamanda z istiqamətində elektronlar və deşiklərin hərəkətinin nəticəsi olan minizonalar kəsiləməz olaraq qalırlar. Uzununa maqnit sahəsinin ($H=H_z$) təsiri altında z oxu boyunca d_{SL} periodlu, $U(z)$ potensial çuxurlu ifratqəfəslərdə elektronun enerji spektri və dalğa funksiyası yaxşı məlum olan aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$E_n(k_z) = (n + 1/2)\hbar\omega_c + \frac{\Delta}{2}(1 - \cos k_z d_{SL}) \quad (1)$$

$$\Psi_{nk_x k_z} = \frac{1}{L_y} \exp(ik_x x) \Phi_{nk_x}(y - y_0) \xi(k_z) \quad (2)$$

Burada $\Phi_{nk_x}(y - y_0)$ ossilyator funksiyası, L_x, L_y, L_z ifratqəfə nümunəsinin ölçüləridir, Δ minizonanın eni, ω_c - tsiklotron tezliyi və $\xi_k(z)$ - z istiqamətində Blox funksiyasını göstərir. (1) enerji spektri həm kvazi iki ölçülü sistemlərin səthinə maqnit sahəsi perpendikulyar

yönəldikdə yükdaşıyıcıların enerji spektri tam kvantlandıqından onların enerji spektrindən, həm də kvazi bir ölçülü sistemlərin enerji spektrindən fərqlənir.

Elektromağnit sahəsinin polyaizasiya vektoru ifrat qəfəsin müstəvisi boyunca yönəldikdə elektron – foton qarşılıqlı təsirin matrisa elementinin kvadratının

$$\left| \langle nk_x k_z | H_R | n'k'_x k'_z \rangle \right|^2 = \left(\frac{2\pi\hbar n_0}{\epsilon(\omega)\omega} \right) (e\Delta d_{SL} \sin(k_z d_{SL}) / 2\hbar)^2 \delta_{nm'} \delta_{k_x k'_x} \delta_{k_z k'_z} \quad (3)$$

ifadəsindən görünür ki, işığın birbaşa zona daxili udulması baş vermir. Zona daxili udulma elektron, fotondan başqa həm də üçüncü bir “cismın”, məsələn fononların iştirakı ilə baş verir.

Burada $\vec{\epsilon}$ şüalanma sahəsinin polyarizasiya vektoru, ϵ - dielektrik sabiti, ω və c işıq dalğasının tezliyi və sürətidir. H_R operatorunun matris elementlərini hesabladıqda yüksək tezlikli sahə bircins hesab olunur.

Kvant mexaniki keçid ehtimalı ilə əlaqədar olaraq yükdaşıyıcıların eyni zamanda yükdaşıyıcılar foton udularaq fononlardan səpilir, ya da fononlardan səpildikdən sonra foton udur. Biz elektronların polyar və

qeyri-polyar fononlardan səpilməsi halına baxırıq. Bu halda sərbəst yükdaşıyıcılarla işığın udulma əmsalı

$$\alpha = \frac{\epsilon^{1/2}}{n_0 c} \sum_i W_i f_i \quad (4)$$

kimi hesablanır. Burada n_0 – şüalanma sahəsində fotonların sayı, f_i sərbəst yükdaşıyıcıların paylanma funksiyası, W_i – yaxşı məlum olan aşağıdakı ifadə ilə müəyyən olunan keçid ehtimalıdır:

$$W_i = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{f_i} \left[\left| \langle f | M_+ | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega - \hbar\omega_q) + \left| \langle f | M_- | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega + \hbar\omega_q) \right] \quad (5)$$

burada E_i və E_f – uyğun olaraq başlanğıc və son halda elektronların enerjisinin göstərir, $\hbar\omega_q$ – fononun enerjisidir və $\langle f | M_{\pm} | i \rangle$ - elektron, fonon və fotonlar arasındakı qarşılıqlı təsir üçün başlanğıc vəziyyətdən son vəziyyətə keçidin matris elementləridir. i, α, f indeksləri elektronun başlanğıc, aralıq və son vəziyyətini göstərir. V_S – elektron-foton qarşılıqlı təsir operatorudur. Yükdaşıyıcılar həm polyar fononlardan səpildikdə, həm də qeyri-polyar fononlardan səpildikdə işığın sərbəst yükdaşıyıcılarla udulma əmsalının ifadəsinə $\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{4}{\Delta^2} \theta_{1\pm}^2}}$ vuruğu daxildir ($\theta_{1\pm}(k_z d) = (n' - n)\hbar\omega_c \pm \hbar\omega_0 + \hbar\Omega + \frac{\Delta}{2} \cos k_z d$). Bu isə hər iki səpilmə halında sərbəst yükdaşıyıcılarla işığın udulma əmsalının həm maqnit sahəsinin intensivliyindən, həm də düşən işığın tezliyindən asılı olaraq ossilyasiya etdiyini və rezonans şərtinin $N\omega_c = \Omega + \omega_0$ olduğunu göstərir. Hər dəfə

$1 - 4\theta_{1\pm}^2/\Delta^2 = 0$ şərti ödəndikdə, udma əmsalı dağılır. Bundan başqa, $1 - 4\theta_{1\pm}^2/\Delta^2$ qiymətinin həqiqi və müsbət olduğunu nəzərə alsaq, udma əmsalının mümkün qiymətləri üçün enerji intervalı tapılır.

Kvant nöqtələrdən ibarət ifratqəfələrdə fononlardan səpilməklə elektromağnit şüalanmasının sərbəst yükdaşıyıcılar ilə udulması tədqiq olunmuşdur [2]. Fərz olunur ki, kvant nöqtəli ifratqəfələrdə elektron qazı anizotrop parabolik potensialla məhdudlanıb. Güclü əlaqə yaxınlaşmasında kvant nöqtəli ifratqəfələrdə elektronun normallaşdırılmış məxsusi funksiyası $\Psi_{n,l,k_z}(r)$ və keçirici zonada enerjisinin məxsusi qiymətləri $E_{n,l}(k_z)$ uyğun olaraq bu şəkildə tapılır [3].

$$\Psi_{n,l,k_z}(r) = \frac{1}{\sqrt{L_z}} \Psi_n(x) \Psi_l(y) \xi_{k_z}(z), \quad (6)$$

$$E_{n,l}(k_z) = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_x + (l + \frac{1}{2})\hbar\omega_y + \frac{\Delta}{2}(1 - \cos k_z d) = \epsilon_{n,l} + \epsilon(k_z), \quad (7)$$

burada m^* - elektronun effektiv kütləsi, ω_x və ω_y - uyğun olaraq x və y istiqamətlərində konfaynmentin tezlikləridir. $n(=0,1,2,\dots)$ və $l(=0,1,2,\dots)$ ilə elektronun altzonaları səviyyəsinin indeksləri göstərilib, $k_z - z$ istiqamətində dalğa vektoru komponenti, $\Psi_n(x)$ və $\Psi_n(y)$ – sadə harmonik ossilyatorun məxsusi funksiyalarıdır. (6) ifadəsi ilə verilən dalğa funksiyasından istifadə edə-

rək elektron-foton qarşılıqlı təsirin matris elementini (3) ifadəsində $\delta_{k_x k'_x}$ simvolun $\delta_{ll'}$ simvolu ilə əvəz etməklə alınır, burada V – kristalın həcmidir, şüalanma sahəsi z - oxu istiqaməti boyunca polyarlaşıb.

Elektron-foton qarşılıqlı təsirin matris elementinin ifadəsi belədir:

$$\left| \langle k'_z n' l' | V_S | k_z n l \rangle \right| = C'_j J_{nm'}(x) J_{ll'}(y) I(q_z) \quad (8)$$

V_S – elektronun fononla qarşılıqlı təsir operatorudur. $C'_j C_j$ – elektronlar və fononlar arasındakı qarşılıqlı təsiri xarakterizə edən funksiyadır və ifadələri belədir [4]:

$$J_{nm'}(q_x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iq_x x} dx \Psi_n(x) \Psi_{n'}(x) \quad J_{ll'}(q_y) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iq_y y} dy \Psi_l(y) \Psi_{l'}(y)$$

$$I(q_z) = \int_0^d \xi_{k_z}(z) \xi_{k'_z}(z) e^{iq_z z} dz \quad C_j^2 = C_j^2 F_j(q)$$

C_j və $F_j(q)$ ononların növündən asılıdır. Polyar və qeyri-polyar optik fononlarla səpilmə zamanı udma əmsalı üçün aşağıdakı ifadələri alırıq:

$$\alpha_{pol} = \frac{4\pi e^4 \Delta d \omega_0 L_z}{c \Omega^3 \epsilon^{1/2} \hbar^3} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \sum_{n'l'} \sum_{nl} \sum_{\pm} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} dk_z f_{nk_z} \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{\sqrt{1 - \frac{4}{\Delta^2} \theta_{\pm}^2 - \sin k_z d}}{\sqrt{1 - \frac{4}{\Delta^2} \theta_{\pm}^2}} \times \\ \times \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{|I_{m'}(q_x)|^2 |I_{l'}(q_y)|^2}{(q_x^2 + q_y^2) + a_{\pm}^2} dq_x dq_y, \quad a_{\pm}^2 = \frac{1}{d^2} \left(k_z d - \arccos \left(\frac{2}{\Delta} \Theta_{\pm}(k_z d) \right) \right)^2 \quad (9)$$

$$\alpha_{n.pol} = \frac{D^2 e^2 \Delta d}{\pi c \rho \omega_0 \Omega^3 L_x L_y} \sum_{n'l'} \sum_{nl} \sum_{\pm} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} dk_z f_{nk_z} \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{\sqrt{1 - \frac{4}{\Delta^2} \Theta_{\pm}^2 - \sin k_z d}}{\sqrt{1 - \frac{4}{\Delta^2} \Theta_{\pm}^2}} \times \\ \times \frac{1}{n'-n} \cdot \frac{1}{l'-l}, \quad \Theta_{\pm}(k_z d) = (n' - n) \hbar \omega_x + (l' - l) \hbar \omega_y \pm \hbar \omega_0 + \hbar \Omega + \frac{\Delta}{2} \cos k_z d \quad (10)$$

$1 - 4\theta_i^2/\Delta^2$ qiymətinin həqiqi və müsbət olduğunu nəzərə alsaq, udma əmsalının mümkün qiymətləri üçün enerji intervalını tapa bilirik.

(9) və (10) ifadələrindən görünür ki, düşən fotonun müəyyən tezliklərində piklər müşahidə olunur. Elektron-fonon səpilməsi üçün udma əmsalının rezonans halı

$$N \hbar \omega_x + P \hbar \omega_y \pm \hbar \omega_0 = \hbar \Omega \quad (11)$$

(11) ifadəsinin ödənildiyi tezliklərdə yaranır, burada $N = n' - n = 1, 2, 3, \dots$ və $P = l' - l = 1, 2, 3, \dots$.

(11) ifadəsindən görünür ki, $n(l)$ indeksi ilə müəyyən olunan altzonalardan elektronlar səpilmə nəticəsində n' (l') indeksli altzonalardan birinə keçə bilər. Bu zaman $\hbar \omega_0$ enerjili LO-fononların udulması halında elektronlar $\hbar \Omega$ enerjili fotonları udur və ya buraxır.

(11) ifadəsi udulmanın spektral xəttinin formasının təyin olunması üçün əsas ifadədir. Bu, yarımkeçiricilərdə rezonans effektləri analiz etməyə imkan verir. Qeyd edək ki, (9) ifadəsindəki altzonalar üzrə cəmləmə

$$\Psi_{n'lK}(r) = \frac{\exp(iKz) \exp(il\vartheta)}{(\pi R^2 L)^{1/2}} \cdot \frac{J_{nl}(k_{nl}\rho)}{J_{l+1}(k_{nl}R)}, \quad l=0, 1, 2, 3, \dots, n=1, 2, 3, \dots \quad (12)$$

burada $r = (\rho, \vartheta, z)$ -dir, ϑ - məftilin azimutal bucağıdır, K - silindrik məftilin oxu boyunca seçilmiş z oxu boyunca olan elektronun dalğa vektorudur, $J_l(x)$ - birinci dərəcəli Bessel funksiyasıdır.

üç növə malikdir: (i) $n' \neq n, l' = l$, (ii) $n' = n, l' \neq l$ və (iii) $n' \neq n, l' \neq l$. Seçmə qaydasına əsasən elektronların polyar optik fononlarla səpilməsi zamanı üç keçid mümkündür: (1) yalnız x -istiqamətində ölçülü altzonalar arası keçid, (2) yalnız y -istiqamətində ölçülü altzonalar arası keçid, (3) həm x -istiqamətində, həm də y -istiqamətində ölçülü altzonalar arası keçid. (10) ifadəsindən görünür ki, elektronların qeyri-polyar optik fononlardan səpilməsi üçün yalnız bir keçid mümkündür: həm x -istiqamətində, həm də y -istiqamətində ölçülü altzonalar arası keçid.

Silindrik kvant məftildə kvazi bir ölçülü elektron qazı üçün şüalanma sahəsinin məftilin uzunluğu boyunca polyarlaşdığı halda yükdaşıyıcılar akustik fononlardan səpildikdə sərbəst yükdaşıyıcıların udulması nəzəriyyəsinə araşdırmışıq [5].

Elektronlar R radiuslu silindrik kvant məftilin L uzunluğu boyunca sərbəst hərəkət edir və məftilin en kəsiyi boyunca onların hərəkəti məhdudlanır. Belə halda effektiv kütlə yaxınlaşması daxilində kvant məftildə elektronun dalğa funksiyası aşağıdakı kimi olacaq:

Dalğa funksiyasından istifadə edərək elektron-foton qarşılıqlı təsir Hamiltonunun matris elementlərini aşağıdakı kimi yazı bilərik:

$$\langle n'l'K' | H_R | n'lK \rangle = -\frac{e\hbar}{m^*} \left(\frac{2\pi\hbar n_0}{V\Omega} \right)^{1/2} (\varepsilon K) \delta_{KK'} \delta_{ll'} G_{n'l'n'l'}(R) \quad (13)$$

Elektron-fonon qarşılıqlı təsirinin matrisa elementləri səpilmə mexanizmindən asılı olduğundan akustik fonon üçün

$$\langle f|V_s|\alpha\rangle = C_{nl}(q_z)I_{n'l',n''l''}(q_{nl})\delta_{K',K''+q_z} \quad (14)$$

Biz nanoməftildə eninə məhdudlanmış akustik fononlarla deformasiya olunmuş potensialın qarşılıqlı təsirinə baxırıq. Bu halda (13) ifadəsinə daxil olan $C_{nl}(q_z)$ -in ifadəsi aşağıdakı kimi verilir [6]:

$$\left|C_{nl,q_z}^{LA}\right|^2 = \frac{D^2\hbar\sqrt{k_{nl}^2R^2 + R^2q_z^2}}{2\pi RL\mu c_s J_{n+1}^2(k_{nl}R)} \quad (15)$$

burada c_s - səs tezliyi, μ - materialın sıxlığı, D isə zo-

laşın deformasiya potensialıdır. (4)-(5) və (12)-(14) ifadələrindən istifadə edərək silindirik kvant məftildə sərbəst yükdaşıyıcıların akustik fononlardan səpilməsi ilə işığın udulma əmsalının məftilin radiusunun artdıqca azaldığı müəyyən edilmişdir.

Parabolik konfaynment potensialı kvant məftildə elektronlar ilə elektromaqnit şüalanmasının udulmasına və fononlardan səpilməsinə eyni vaxtda baxılmışdır [7].

Fərz olunur ki, kvant məftildə elektron qazı x və z istiqamətində uyğun olaraq ω_x və ω_z tezlikli anizotrop parabolik potensialı ilə məhdudlanıb. Asimmetrik parabolik potensialı kvant məftillərdə keçirici zonada elektronun məxsusi funksiyası $\Psi_{n,m,p_y}(r)$ və məxsusi enerjisi $E_{n,m}(p_y)$ aşağıdakı məlum düsturlarla verilir:

$$\Psi_{n,m,p_y}(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\Psi_n(x)\Psi_m(z)\exp(ip_y y) \quad (16)$$

$$E_{n,m}(p_y) = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_x + (m + \frac{1}{2})\hbar\omega_z + \frac{p_y^2}{2m} \quad (17)$$

Burada $n (= 0,1,2,\dots)$ və $m (= 0,1,2,\dots)$ ilə elektron altzonaları səviyyələrinin indeksləri ifadə olunub, p_y -y istiqamətində elektronun impuls komponentidir (y oxu istiqaməti məftilin ox una uyğundur), $\Psi_n(x)$ və $\Psi_m(z)$ - sadə harmonik ossilyatorun məxsusi funksiyalarıdır. Sistemin bütün başlanğıc "i" hallarına görə cəmləmə aparılır. $W_i - mnP_y$ vəziyyətindən $m'n'P_y$ vəziyyətinə keçid ehtimalı (5) ifadəsi ilə müəyyən olunur.

Dalğa funksiyasının (18) ifadəsindən istifadə etməklə elektron-foton qarşılıqlı təsirinin matris elementi aşağıdakı kimi yazıla bilər:

$$\langle n'l'K'|H_R|nlK\rangle = -\frac{e}{m^*}\left(\frac{2\pi\hbar n_0}{V\Omega}\right)^{1/2}(\varepsilon P_y)\delta_{p_y,p_y'}\delta_{mm'}\delta_{ll'} \quad (18)$$

Şüalanma sahəsi y -istiqaməti boyunca polyarlaşmışdır.

$f_0(E_{nmP_y})$ paylanma funksiyası baxılan halda belə normallaşma şərtinə tabe olur:

$$\frac{L_y}{2\pi\hbar}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\int f_0(E_{nmP_y})dP_y = N \quad (19)$$

Burada N – vahid həcmdə elektronların sayıdır, L_y - y oxu boyunca məftilin uzunluğudur.

Elektron-fonon qarşılıqlı təsirinin matris elementləri aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$\langle n''m''P_y''|V_s|nmP_y\rangle = D_q\sqrt{N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}}\langle n''m''P_y''|e^{\pm iqr}|nmP_y\rangle \quad (20)$$

Deformasiya (DO-fononlar) və polyar optik (PO-fononlar) fononlar üçün elektron-fonon əlaqə sabiti aşağıdakı kimi verilir [8]:

$$|D_q|^2 = \frac{2\pi\hbar^2\alpha_l\omega_0}{m^*}\begin{cases} \sqrt{2m^*\hbar\omega_0/q^2 - PO} \\ 4\hbar^2/\sqrt{2m^*\hbar\omega_0} - DO \end{cases} \quad (21)$$

Burada α_L - ölçüsüz əlaqə sabitidir.

$\exp(\pm aP_x x/\hbar)\Phi(x) = \Phi(x \pm a)$ sürüşmə operatorundan istifadə edərək elektron-fonon qarşılıqlı təsirinin matris elementləri hesablanmışdır.

Udulma əmsal α üçün ifadələr (20) elektron-foton qarşılıqlı təsir matris elementlərindən və (19) elektron-fonon qarşılıqlı matris elementlərindən, istifadə etməklə qiymətləndirilir. Asimmetrik parabolik potensialı

kvant məftillərdə zonadaxili optik udulma əmsalının piklərinin yerinin məhdudlaşdırıcı potensialın xarakterik tezliyindən asılılığı $N\omega_x + P\omega_y \pm \omega_0 = \Omega$ müəyyən edilmişdir.

Uzununa maqnit sahəsinin təsiri altında kvant daralmasında işığın udulması tədqiq edilmişdir [9]. Müasir nanotexnologiya kvant məftillərdə onların qalınlığı-

nın fluktasiyası ilə əlaqəli olan təsadüfi sahənin mövcud olmasını istisna etmir. Qalınlığın qeyri-bircinsliyi mikrodaralmanın yaranmasına gətirib çıxarır. Nanostrukturların forma və ölçülərinin dəyişməsi spektral xassələrə əhəmiyyətli dərəcədə öz təsirini göstərir.

Mikrodaralmanın həndəsi formasının xüsusiyyətləri "kvant məftil-mikrodaralma" keçidində elektron spektrinin kardinal modifikasiyasında öz əksini tapır.

Kvant məftilin oxu boyunca tətbiq olunmuş H maqnit sahəsi, məlum olduğu kimi, lateral həndəsi konfaynmenti gücləndirir.

Uzununa maqnit sahəsində mikrodaralmanda düz zonalararası işığın udulması tədqiq olunmuşdur. Mikrodaralma konfaynmentinin potensialı modeli kimi "yumşaq divar" potensialı götürülür:

$$V(x,y,z) = m^* (\omega_0^2 x^2 + \omega_0^2 y^2 - \omega_z^2 z^2) / 2 \quad (22)$$

burada z - mikrodaralma oxu istiqamətindəki koordinatdır; ω_z tezliyi mikrodaralmanın effektiv uzunluğu ilə müəyyən olunur $\omega_z = \sqrt{\hbar/(m^* L_z^2)}$; ω_0 -ikiölçülü harmonik ossilyatorun xarakterik tezliyidir. Mikrodaralmanın oxu boyunca istiqamətlənən A bircins maqnit sahəsinin vektor potensialı simmetrik kalibrovkada seçilib $\vec{A} = (-yB/2, xB/2, 0)$.

Birelektronlu hal üçün H_H Hamiltonu aşağıdakı aşağıdakı məlum ifadə kimi yazmaq olar

$$H_H = H_{\rho,\varphi} + H_z \quad (23)$$

harada ki

$$H_{\rho,\varphi} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{i\hbar\omega_H}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{m^*}{8} \Omega^2 \rho^2 \right),$$

$$H_z = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m^*}{2} \omega_z^2 z^2$$

$$\omega_z = \sqrt{\hbar/(m^* L_z^2)}$$

$\Omega = \sqrt{4\omega_0^2 + \omega_c^2}$ - hibrid tezliyidir. ω_z tezliyi mikrodaralmanın effektiv uzunluğu ilə müəyyən olunur:

Hamiltonianın uyğun məxsusi funksiyası və məxsusi qiymətləri aşağıdakı məlum ifadə vasitəsilə verilir:

$$E_{n,m,\lambda} = \frac{\hbar\omega_B m}{2} + \frac{\hbar\Omega}{2} (2n + |m| + 1) + \hbar\omega_z \lambda, \quad (24)$$

$$\Psi_{n,m,\lambda}(\rho, \varphi, z) = \Psi_{n,m}(\rho, \varphi) \Psi_{\lambda}(z),$$

Burada $\Psi_{n,m}(\rho, \varphi)$ və $\Psi_{\lambda}(z)$ - uyğun olaraq $H_{\rho,\varphi}$ və H_z operatorlarının məxsusi funksiyalarıdır: burada $n = 0, 1, 2, \dots, m$ - Landau səviyyələrinə uyğun olan kvant ədədləridir; $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ - maqnit kvant ədədidir.

Mikrodaralmanda düz zonalar arasındakı işığın udulmasına baxırıq. Bu udulmanın əmsalını hesablamaq üçün A.L. Efros və A.L. Efrosun məlum düsturundan istifadə edilmişdir [10]:

$$\alpha = A \sum_{\nu, \nu'} \left| \int \psi_{\nu}^e \psi_{\nu'}^h dr \right|^2 \times \delta(\Delta - E_{\nu}^e - E_{\nu'}^h) \quad (25)$$

burada $\Delta = \hbar\Omega - E_g$ - E_g - massiv yarımkeçiricilərin qadağan olunmuş zonasının eni, A - Blox funksiyasından götürülmüş matris elementinin kvadratına proporsional kəmiyyətdir; ν və ν' - elektron və ağır deşiklərə uyğun olan kvant ədədləridir. Burada δ vasitəsilə funksiya müvafiq keçidlər üçün enerjinin saxlanması qanununu ödəyir.

Düz zonalar arasındakı işığın udulması əmsalını hesablayarkən Xille-Xardi düsturundan və Veber inteqralından istifadə olunub.

Mikrodaralmanda işığın udulma əmsalının xarici maqnit sahəsinin intensivliyindən və mikrodaralma uzunluğundan asılılığı müəyyən olunmuşdur. "Mikrodaralma \rightarrow kvant məftil" keçidinə baxılmışdır.

Raşba spin-orbital qarşılıqlı təsiri nəzərə alınmaqla iki ölçülü elektron qazının xətti polyarlaşmasının zonalaxili udulması tədqiq olunmuşdur [11]. Məlumdur

ki, yarımkeçirici strukturlarda heteroqəçidlərdəki kimi nümunənin parametrləri sərhəddə sıçrayışla dəyişirsə, belə asimetriya struktur asimetriyası adlanır və SIA (Structure Inversion Asymmetry) kimi yazılır. Bu baxımdan spin - orbital (SO) qarşılıqlı təsirində Raşba (E.İ.Raşba, 1960) Hamiltonu əlavə pay kimi iştirak edir və Oz oxu boyunca yönəlmiş $\tilde{N}V(r)$ aşağıdakı kimi yazılır:

$$\hat{H}_R = \alpha(\hat{\sigma}_x \hat{p}_y - \hat{\sigma}_y \hat{p}_x)$$

Zeeman parçalanması və Raşba spin-orbital qarşılıqlı təsiri nəzərə alınmaqla sabit bircins perpendikulyar maqnit sahəsində (H_{HOz}) ikiölçülü sistemdə elektronun kvant-mexaniki hərəkətinin təsvir edən Hamilton operatoru aşağıdakı kimi yazılır:

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + \frac{a}{\hbar} (\sigma_x P_y - \sigma_y P_x) + \frac{1}{2} g \mu_B B \sigma_z \quad (26)$$

P – impuls operatoru, σ – Pauli matrisi, μ_B - Bor maqnetonu, a - Raşba spin-orbital qarşılıqlı təsiri sabiti, g – Lande faktoru, \hbar – Plank sabitidir. Maqnit sahəsinin vektor potensialı üçün Landau (kalibri) $A=(0, H \cdot x, 0)$ götürülür. Məlumdur ki, bu halda, elektronun spektri cüt şəklində birləşmiş diskret səviyyələri təsvir edir:

$$E_n^\pm = \hbar \omega_c n \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\hbar \omega_c + 2g\mu_B H)^2 + \frac{8\alpha^2}{l_H^2} n} \quad (27)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots E_0^+ = (\hbar \omega_c / 2 + g\mu_B B),$$

Fotonların polarizasiyası istiqamətini oX oxu boyunca götürsək, elektron-foton qarşılıqlı təsiri operatoru aşağıdakı kimi yazıla bilər:

$$H_R = -\frac{e}{m^* c} \left(P - \frac{eA}{c} \right) A_0 + \frac{ea}{c\hbar} \sigma_y A_0 \quad (28)$$

burada A_0 – fotonların həcmi konsentrasiyası ilə əlaqəli olan elektromaqnit dalğası amplitududur. Elektron-fonon qarşılıqlı təsirinə matris elementi aşağıdakı şəkildə yazılır:

$$\left| \langle k'_y n' l' | V_s | k_y n l \rangle \right|^2 = C_j^2 \delta_{k'_y, k_y \pm q_y} F_{mn}^\pm(q_x q_y) \Lambda_{ll'}(q_z) \quad (29)$$

V_s – elektronun fononla qarşılıqlı təsirinə enerji operatoru, C_j – elektron və fonon arasındakı qarşılıqlı təsiri xarakterizə edən funksiyadır,

$$F_{mn}^\pm(q_n) = \left| \langle \Psi_n(x, y) | e^{i(q_x x + q_y y)} | \Psi_m(x, y) \rangle \right|^2 \quad (30)$$

burada $A_{ll'}(q_z)$ məlum ifadəsi belədir:

$$A_{ll'}(q_z) = \left| \frac{2}{d} \int_0^d dz \exp(iq_z z) \sin\left(\frac{l'\pi z}{d}\right) \sin\left(\frac{l\pi z}{d}\right) \right|^2$$

$$\int_0^\infty A_{ll'}(q_z) dq_z = \frac{2\pi}{d} \left(1 + \frac{1}{2} \delta_{ll'} \right)$$

Elektron foton qarşılıqlı təsirinə matris elementinin və elektron-fonon qarşılıqlı təsirinə matris elementinin ifadələrindən istifadə edərək kvant çuxurlarda Raşba spin orbital qarşılıqlı təsir nəzərə almaqla sərbəst yükdaşıyıcılarla işığın udulma əmsalı hesablanmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, kvant çuxurlarda Raşba spin orbital qarşılıqlı təsiri nəzərə alındıqda səpilmə sürəti artdığından sərbəst yükdaşıyıcılarla işığın udulma əmsalı artır.

- | | |
|---|---|
| [1] <i>G.B. Ibragimov, R.Z. Ibaeva.</i> Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2024, V.18, № 1, p. 116-120. | [7] <i>G.B. Ibragimov, R.Z. Ibaeva, A.S. Alekperov, B.G. Ibragimov.</i> Advanced Physical Research, 2024, V.5, № 1, p. 56-62. |
| [2] <i>G.B. Ibragimov, R.Z. Ibaeva.</i> Radioelectronics. Nanosystems. Information Technologies. 2024, V. 16, № 2, p. 249-254. | [8] <i>Ф.Г. Басс, И.Б. Левинсон.</i> Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики, 1965, 49, с. 924. |
| [3] <i>Sang Chil Lee.</i> Journal of the Korean Physical Society, 2008, V. 52, № 4, p. 1081-1085. | [9] <i>R.Z. İbaeva, G.B. İbragimov.</i> Сборник материалов III международной научной конференции. 26-27 september 2024, p. 82-84. |
| [4] <i>H.B. İbrahimov.</i> Nanoölçülü sistemlərdə elektron prosesləri / -Bakı, 2012. -s.255 | [10] <i>A.L. Efros, A.L. Efros.</i> Semiconductors. 1982. 16, p.772-775. |
| [5] <i>G.B. İbragimov, R.Z. İbaeva.</i> Journal of Non-Oxide Glasses, 2020, V. 12, № 4, p. 31-34. | [11] <i>G.B. İbragimov, R.Z. İbaeva.</i> Инженерный вестник Дона. 2020, 3, p. 2007-2015. |
| [6] <i>X. Hong-Jing, Ch.Y. Chen, K. M. Ben.</i> Physical Review B, 2000. 61, 7, p.4827-4834. | |

CVD ZnSe POLİKİSTALLARININ ELEKTROFİZİKİ XASSƏLƏRİNİN
İMPEDANS SPEKTROSKOPİYASIC.İ. HÜSEYNOV¹, H.A. ASLANOV¹, G.Ə. QARAŞOVA¹, İ.İ. ABBASOV²¹Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti²Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti

CVD ZnSe polikristal nümunələrinin rentgen struktur analizləri aparılmış, səth morfologiyası və mikrostrukturunu tədqiq edilmiş, empedans spektroskopiyası üsulu ilə elektrik keçiriciliyinin və dielektrik keçiriciliyinin real və xəyali hissələrinin tezlik və temperaturdan asılılıqları tədqiq edilmişdir. Nümunənin bir fazadan ibarət olması, dominant istiqamətin mövcudluğu və onun səth mərkəzli kub sinqoniyada kristallaşdığı müəyyən edilir və elementar qəfəs parametri müəyyən edilir. Müəyyən edilmişdir ki, aktivləşmə enerjisi tezlik və temperaturdan asılı olaraq dəyişir, elektrik keçiriciliyi zona-zona və tullanma mexanizmləri ilə həyata keçirilir, qütbləşmə dispersiyası isə relaksasiya xarakteri daşıyır.

Açar sözlər: elektrik keçiriciliyi, hoppanma mexanizmi, dielektrik keçiricilik, relaksasiya dispersiyası, dipol polarizasiya.

Müasir elektron texnologiyalarında işləmə prinsipi geniş zonalı yarımkeçirici materiallara xas olan bir sıra fərdi xüsusiyyətlərinə əsaslanan cihazlar mühüm yer tutur. Bu tip kristallar minimum elektrik keçiriciliyi və aşağı dielektrik itkiləri ilə xarakterizə olunmaqla yanaşı, yüksək mexaniki dayanıqlılıq, xüsusiyyətlərin uzunmüddətli stabillik, yüksək radiasiya müqaviməti və əsas fiziki xassələrinin ətraf mühit parametrlərindəki dəyişikliklərdən minimal asılılıq nümayiş etdirir.

A^{II}B^{VI} tipli, geniş zolaqlı yarımkeçiricilər, xüsusən sink selenid, kristalları optoelektronika və lazer texnologiyasının müxtəlif sahələrində istifadə olunan perspektivli materialdır. Bu kristallar 0,6 – 20 mkm spektral diapazonda şəffaf olduqlarından, xüsusi təyinatlı optik sistemlərdə və CO₂ lazer optikasının görünən və infraqırmızı spektral diapazonunda işləyən optik elementlərin istehsalı üçün geniş istifadə olunur. Qadağan olunmuş zonasının eni kifayət qədər böyük olduğuna görə yüksək təmiz polikristal ZnSe yüksək müqavimətə malikdir, spektrin görünən bölgəsində şəffafdır və infraqırmızı şüaları yaxşı ötürür.

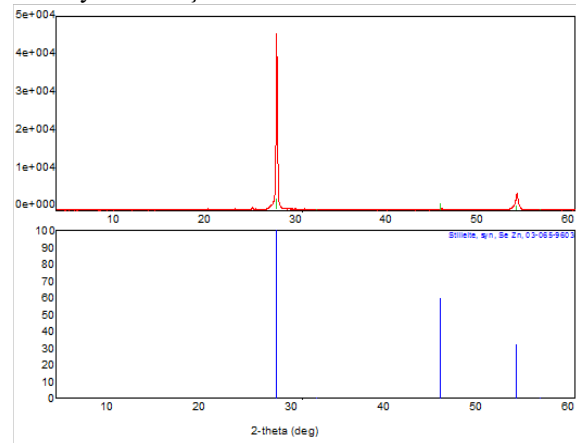
Sink selenidinin görünən diapazonunda şəffaflıq polikristal ZnSe –dən hazırlanmış optik cihazların tənzimlənməsi imkanlarını kifayət qədər genişləndirir. Polikristal sink selenid gecəgörmə cihazlarında, irəliyə baxmaq üçün termal görüntüləmə sistemlərində fəal şəkildə istifadə olunur. Mexanik gücü əhəmiyyətli dərəcədə fərqlənir. Sink selenidinin iri ölçülü, bircinsli və yüksək şəffaf nümunələrinin hazırlanması ilə bağlı bir çox problemlər sink buxarı və hidrogen selenidindən istifadə etməklə qaz fazasından kimyəvi buxar çökdürülməsi (sink-hidrid üsulu, CVD) üsulu ilə həll edilmişdir [1].

Tərkibində az miqdarda quruluş defektləri və aşqarlar olan ZnSe kristalları ilkin reagentlər kimi sink və qaz halında olan hidrogen selenid qarışığından istifadə etməklə qaz fazasından kimyəvi buxar çökdürülməsi (Kimyəvi Buxar Çöküntüsü, CVD üsulu) ilə əldə edilə bilər. Bu, yüksək istismar xüsusiyyətlərinə malik ZnSe nümunələrinin alınması üçün CVD metodunu ən perspektivli edir [2]. CVD üsulu çökmə zonasına daşıyıcı

qazla seyreltilmiş reagentlərin davamlı təchizatı ilə axın sistemində həyata keçirilir.

Optik materialların müxtəlif cihazlarda aktiv element kimi istifadə edilməsinə imkan verən ən mühüm xüsusiyyətlərindən biri elektrikkeçiriciliyinin, dielektrik nüfuzluğunun tezlik və temperatur asılılığıdır. Bu işdə CVD ZnSe-nin bəzi fiziki xassələri, o cümlədən rentgen difraksiya analizi və optik mikroskopiya və elektrikkeçiriciliyi və dielektrik nüfuzluğunun spektral və temperatur asılılıqları impedans metodu ilə tədqiq olunmuşdur. Təcrübədə istifadə edilən 3 mm qalınlığında polikristal ZnSe nümunəsi kimyəvi buxar çökdürülməsi yolu ilə əldə edilmişdir [3].

CVD ZnSe nümunəsinin difraktoqramı Miniflex 600 rentgen difraktometrində (XRD) çəkilmişdir. Nümunənin səthinin morfologiyasını və mikrotərkibini öyrənmək üçün JEOL JSM6610-LV skanedici elektron mikroskopdan istifadə olunmuşdur. Miqdari rentgen mikroanalizi vasitəsilə tədqiq olunan nümunələrdə fazanın tərkibi və səthdə kimyəvi elementlərin paylanması təyin edilmişdir.



Şəkil 1. CVD ZnSe kristallarında rentgen şüalarının difraksiyası.

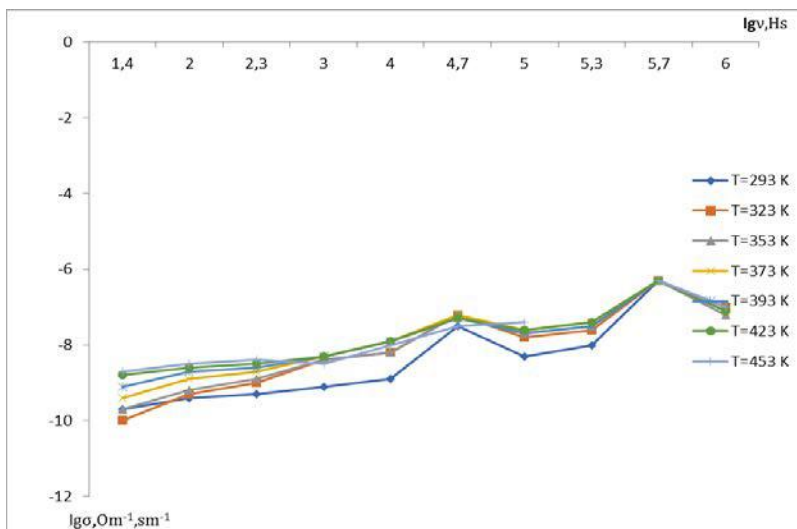
Rentgen şüalarının difraksiya tədqiqatları tədqiq olunan CVD ZnSe nümunəsi polikristal olduğunu göstərir (şəkil 1). Şüalarının əks olunma intensivliklərinin təhlili kristalda dominant istiqamətin mövcudluğunu və

nümunənin bir fazadan ibarət olduğunu göstərir. CVD ZnSe kristalları fəza qurupu $F43m(T_d^2)$ olan, $a_0 = 5.667\text{Å}$ qəfəs parametri səthə mərkəzləşmiş kübik sinqoniyada kristallaşır.

Miqdara rentgen mikroanalizi fazanın tərkibini və tədqiqat nümunəsinin səthində kimyəvi elementlərin paylanmasını müəyyən etdi. Alınan nəticələrin təhlili səthi homogen olduğunu, lakin stexiometriyanın seleniumun artıqlığı tərəf sürüşdüyünü göstərir.

Son illər fundamental və tətbiqi tədqiqatlar zamanı proses və xassələrin öyrənilməsi metodu kimi impedans spektroskopiyasına (IS) tələbat fəvqəladə dərəcədə artmışdır. Bu metodu elektrokimya və fizikanın

müxtəlif oblastlarında yüksək informasiyaya malik işçi alət kimi tətbiq edirlər. CVD ZnSe kristallarının dəyişən elektrik sahəsində elektrofiziki xassələrini tədqiq etmək üçün immetans E7-20 ($25 \div 10^6\text{Hz}$) rəqəmli cihazından istifadə edilmişdir. Bu cihaz vasitəsilə tədqiq olunan nümunənin tutumu (C), aktiv müqaviməti (R), kompleks müqavimətin modulu (Z), keyfiyyəti (Q), itki bucağının tündensi ($tg\delta$) və kompleks müqavimətinin faza sürüşməsi (φ) ölçülə bilər. Tədqiq olunan nümunənin müqavimətindən asılı olaraq nümunə avtomatik olaraq dövrəyə paralel və ardıcıl qoşula bilər.



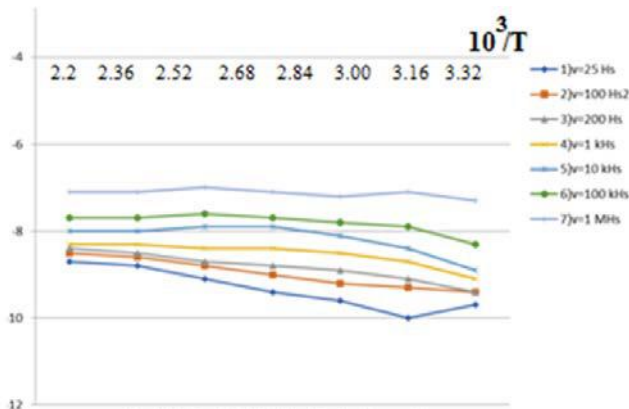
Şəkil 2. CVD ZnSe kristallarının elektrikkeçiriciliyinin tezlik asılılığı

Elektrofiziki xassələri ölçmələr üçün CVD ZnSe nümunələri müstəvi kondensatörlər şəklində hazırlanmışdır. Kondensatorun lövhələri kimi gümüş pastadan istifadə olunmuşdu. Dəyişən elektrik sahəsinin tezliyi $25 \div 10^6\text{ Hz}$ diapazonunda dəyişir. Nümunəyə 1 V gərginlik tətbiq olunmuşdur.

Tədqiq olunan CVD ZnSe nümunələrin xüsusi elektrik keçiriciliyi, C tutumunun və dielektrik itki bucağının tangensinin $tg\delta$ müxtəlif tezlik və temperaturlarda, ölçülmüş qiymətlərindən $\sigma = \omega C tg\delta$ münasibətinə əsasən hesablanmışdır, burada $\omega = 2\pi f$ dövrü tezlikdir. Şəkil 2-də CVD ZnSe monokristal üçün müxtəlif temperaturlarda elektrik keçiriciliyinin tezlikdən

asılılıq qrafiki təsvir edilmişdir. Başlanğıcda tezliyin artması ilə elektrik keçiriciliyi sabit qalır, sonra isə elektrik keçiriciliyi tezlik artdıqca $\sigma \sim f^s$ qanunu üzrə yavaş-yavaş artır. Aşağı temperaturlarda, $2 \cdot 10^4 \div 10^6\text{ Hz}$ tezlik intervalında $s=0,01 \div 0,28$ oblastındakı qiymətləri alır. 375K temperaturda isə qeyd olunan tezliklərdə $s=0,01 \div 0,14$ intervalında dəyişir. s kəmiyyəti tezlik və temperaturdan asılı olaraq dəyişir.

Məlumdur ki, kristal və amorf yarımkəçiricilərdə elektrik keçiriciliyinin tezlikdən asılı olaraq dəyişməsi $\sigma(\omega) \sim \omega^S$, $0,01 \leq S \leq 1,0$ qanunu üzrə baş verməsi, keçiricilikdə sıçrayışlı mexanizmin müəyyən töhvəsinin olduğunu söyləməyə imkan verir.



Şəkil 3. CVD ZnSe kristallarının elektrikkeçiriciliyinin temperatur asılılığı.

Şəkil 3-də CVD ZnSe ilə keçiriciliyin $\sigma(T)$ temperaturdan asılılıqları təsvir edilmişdir. Qrafiklərdən görüldüyü kimi, CVD ZnSe polikristallarında elektrik keçiriciliyinin temperaturdan asılılığı aktivləşmə xarakteri daşıyır [5]. Bu asılılıqların meylinə görə aktivləşmə enerjiləri (ΔE) təyin edilmişdir. Onların qiyməti aşağı temperatur bölgəsində 0,05 – 0,10 eV və yüksək temperatur bölgəsində 0,15 – 0,25 eV aralığında dəyişir. Tədqiqatlar göstərir ki, aktivləşmə enerjisinin dəyəri tezlik funksiyasıdır. Aktivləşdirmə enerjisinin tezlikdən asılılığı sıçrayışlı mexanizmindən istifadə etməklə izah edilə bilər [6]. Bu, o deməkdir ki, CVD ZnSe polikristallarında elektrik keçiriciliyi zona-sıçrayışlı mexanizmləri ilə xarakterizə olunur.

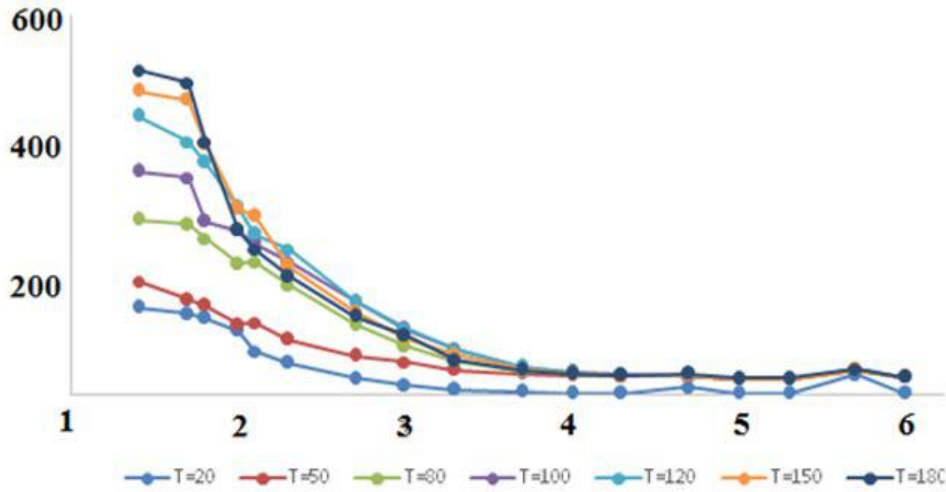
Dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin qiyməti nümunənin d qalınlığı, səthinin S sahəsini bilərək, kondensatorun C tutumunun ölçülmüş qiymətlərindən hesablanmışdır:

$$\varepsilon' = \frac{C \cdot d}{\varepsilon_0 \cdot S}$$

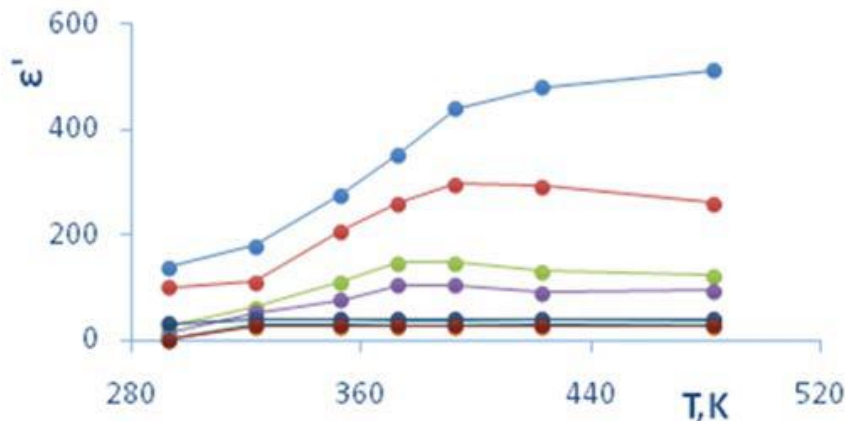
Şəkil 4-də CVD ZnSe kristalları üçün müxtəlif temperaturlarda dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin tezlikdən asılılıq qrafiki verilmişdir. Müxtəlif

temperaturlarda polikristal CVD ZnSe-nin keçiriciliyinin $\varepsilon'(f)$ həqiqi hissəsinin tezlikdən asılılığının tədqiqi göstərir ki, $\varepsilon'(f)$ spektrində güclü tezlik dispersiyası mövcuddur. Şəkildən görüldüyü kimi, infra-aşağı tezliklər oblastında ($f < 100 \text{ Hz}$), CVD ZnSenin dielektrik keçiriciliyi sabit qalır. Dipol molekullarının relaksasiya müddəti elektrik sahəsinin yarımdövründən az olduqda, dipollar sahənin istiqamətinə tam şəkildə yönəldilir, buna görə də, keçiricilik sabit qalır. Bütün tədqiq olunan temperatur intervalında $10^2 \div 10^4 \text{ Hz}$ tezlik oblastında tezliyin artımı ilə lbtkrnhbr nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin qiyməti monoton şəkildə azalır. $\varepsilon'(f)$ asılılığında ən kəskin eniş nisbətən aşağı tezliklərdə ($10^2 \div 10^4 \text{ Hz}$) müşahidə edilmişdir. $10^4 \div 10^6 \text{ Hz}$ tezlik intervalında ε' -nin qiyməti tezlikdən zəif asılıdır.

Temperatur artdıqca ε' tezlik dispersiyası artdı və $T=180 \text{ }^\circ\text{C}$ temperatur üçün ε' çox güclü tezlik asılılığı müşahidə edildi. CVD ZnSe polikristallarında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin spektral asılılığı bu kristallarda polyarlaşma dispersiyasının relaksasiya xarakterli olduğunu göstərir. Qeyd etmək lazımdır ki, relaksasiya dispersiyası polyarlaşmanın dipol və miqra-siya mexanizmləri üçün xarakterikdir.



Şəkil 4.. CVD ZnSe kristallarının dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin tezlik asılılığı.



Şəkil 5. CVD ZnSe kristalın dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin temperatur asılılığı.

CVD ZnSe polikristallarında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin temperatur asılılıqları oxşardır. Şəkil 5-də müxtəlif tezliklərdə CVD ZnSe kristalının dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsinin $\varepsilon''(T)$ temperatur asılılığı təsvir edilmişdir. Qrafiklərdən görüldüyü kimi, müəyyən temperaturlara qədər ε' və ε'' praktiki olaraq sabit qalır və temperaturun sonrakı artımında ilə hər iki dielektrik nüfuzluğu kəskin şəkildə

artır. Tezliyin artımı ilə ε' – nin kəskin artmasına uyğun gələn temperatur daha yüksək temperatur oblasına tərəf sürüşür. Dielektrik nüfuzluğunun temperatur asılılığının xarakteri dipol polarizasiyasına uyğundur. Tədqiq olunan CVD ZnSe -lərdə, əsasən, ε' və ε'' temperatur asılılıqları aktivləşmə xarakterlidir. Bu, tədqiq olunan nümunələrin elektrik keçiriciliyinin temperaturdan asılılığı ilə bağlıdır.

-
- [1] *D.C. Harris*. Development of Hot-Pressed and Chemical-Vapor-Deposited Zinc Sulfide and Zinc Selenide in the United States for Optical Windows; Tustison, R.W., Ed.; SPIE: Bellingham, WA, USA, 2007; p. 654502.
- [2] *E.M. Gavrushchuk*. Polycrystalline Zinc Selenide for IR Optical Applications. *Inorg. Mater.* 2003, 39, 883–899.
- [3] *I. Abbasov, M. Musayev, J. Huseynov, et al.* Temperature behavior of X-Ray luminescence spectra of ZnSe. *International Journal of Modern Physics B*, 2022, Vol. 36, № 02, p.2250018.
- [4] *N.N. Hashimova, I.I. Abbasov, M.A. Musayev, et al.* Study of the photoluminescence spectra observed from different points on the surface of a polycrystalline CVD ZnSe. *Funct. Mater.* 2022/9, Vol. 29, 3, p. 331-337.
- [5] *I. Abbasov, M. Musayev, J. Huseynov, M.Kostyrko, G. Eyyubov, D. Askerov.* Temperature behaviour of the photoluminescence spectra of polycrystalline ZnSe films with different surface treatment//*Ukrainian Journal of Physical Optics* 21 (3), 159-170.

C.I. Huseynov, H.A. Aslanov, G.A. Garashova, I.I. Abbasov

ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF CVD ZnSe POLYCRYSTALS IMPEDANCE SPECTROSCOPY

X-ray structural analyzes of CVD ZnSe polycrystalline samples were conducted, surface morphology and microstructure were studied, frequency and temperature dependences of real and imaginary parts of electrical conductivity and dielectric permeability were studied by impedance spectroscopy method. It is determined that the sample consists of one phase, the existence of a dominant direction, and that it crystallizes in a surface-centered cubic syngonia, and the elementary lattice parameter is determined. It was found that the activation energy changes depending on the frequency and temperature, the electrical conductivity is realized by zone-by-zone and jump mechanisms, and the polarization dispersion is relaxational.

$K_{1-x}Na_xNO_3$ ($x=0.035, 0.045$) KRİSTALLARINDA POLİMORF ÇEVRİLMƏLƏR**A.F. KAZIMOVA¹, V.İ. NƏSİROV²**¹*Elm və Təhsil Nazirliyi H.M.Abdullayev adına Fizika İnstitutu,
Az-1073, Bakı, H.Cavid prospekti 131*²*Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti**E-mail: aygun-kazimova-1981@mail.ru*

Təqdim olunan işdə KNO_3 və $NaNO_3$ -ün suda məhlulundan $K_{0.955}Na_{0.045}NO_3$, $K_{0.965}Na_{0.035}NO_3$ kristalları yetişdirilmiş, rentgenoqrafik və DSK üsulları ilə tədqiq olunmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, KNO_3 -də K^+ ionlarını Na^+ ionları ilə qismən izomorf əvəz olunması alınan nümunələrdə polimorf çevrilmələrin xarakterik xüsusiyyətlərinə nəzərə cərpacaq təsir göstərmir.

Açar sözlər. Polimorf çevrilmələr, izomorf əvəzləmə, fazaçevrilməsi temperaturu, modifikasiya, kristal qəfəsi, laueqram, difraktoqram.

PACS: 61.50.Ks

Giriş

Polimorf çevrilmələrin mexanizmini müəyyən etmək üçün çevrilmələr zamanı yeni kristal böyüməsinin morfolojiyasını, qarşılıqlı çevirmə modifikasiyalar arasında kristalloqrafik istiqamət əlaqələrini, habelə prosesin kinetikasını tədqiq etmək lazımdır. Morfoloji tədqiqatların aparılması üçün optik şəffaf kristallardan tədqiqat obyektini kimi istifadə etmək əlverişlidir [1]. Belə ki, bu tip kristallarda polimorf çevirmə zamanı yeni faza kristalının istənilən mərhələdə böyüməsinin visual olaraq müşahidə etmək və onun fotosunu əldə etmək olar. Qeyri-optik şəffaf kristallarda bu tədqiqatlar əsasən rentgenoqrafik üsullarla aparılır [2]. Bu baxımdan qələvi metalların nitrat birləşmələri əlverişli olduğundan, həmin kristallarında quruluş çevrilmələrinin tədqiqinə çoxsaylı tədqiqat işləri həsr olunmuş və alınan nəticələrin xülasəsi [3]-də öz əksini tapmışdır.

Qələvi metalların nitrat birləşmələri içərisində KNO_3 kristalı polimorf çevrilmələr və bir sıra fiziki hadisələr baxımından daha zəngin olub, böyük elmi-praktiki əhəmiyyətə malikdir. Məhz bu kristalda ilk dəfə polimorf çevrilmələr zamanı ritmik böyümə [4], qarşılıqlı çevrilən modifikasiyalar arasında kristalloqrafik istiqamət əlaqələrinin saxlanılması, $\alpha \leftrightarrow \beta$ çevrilmələr zamanı böyümə sürətinin ossilyasiyası müşahidə edilmiş və prosesin aktivləşmə enerjisi hesablanmışdır [5]. KNO_3 kristalında K^+ ionlarının digər qələvi metal atomları ilə qismən əvəz olunmasının həmin hadisələrə və polimorf çevrilmənin xarakterinə təsirinin öyrənilməsi böyük elmi-praktiki əhəmiyyət kəsb edir. Məhz buna görə də, KNO_3 -də K^+ ionlarının Rb^+ və Cs^+ ionları, habelə $RbNO_3$ -də Rb^+ ionlarının Cs^+ ionları ilə qismən izomorf əvəz olunması nəticəsində alınan kristallarda təcrübimizdən bir sıra tədqiqat işləri aparılmışdır [6-8]. Təqdim olunan bu iş həmin işlərin davamı olub, KNO_3 -də K^+ ionlarının Na^+ ionları ilə qismən əvəz olunmasından alınan $K_{0.955}Na_{0.045}NO_3$ və $K_{0.965}Na_{0.035}NO_3$ kristallarında polimorf çevrilmənin xarakterinə təsirinin öyrənilməsinə həsr olunmuşdur.

Məlumdur ki, KNO_3 otaq temperaturunda Pnma simmetriyalı araqonit quruluşuna malikdir (II-faza) [9].

Kristal qızdırılarkən $\sim 130^\circ C$ temperaturda R3c simmetriyalı kalsitə yaxın quruluşa çevrilir (III-faza). Nümunə soyudularkən çox böyük sürətlə III \rightarrow II çevrilməsi baş verir. Beləliklə, göründüyü kimi II \leftrightarrow III çevrilməsi enantiotrop xarakterlidir. Lakin III-modifikasiya soyudularkən bir çox hallarda iki monotrop çevrilmə müşahidə olunur [10]. $T \approx 124^\circ C$ -də III-faza R3m simmetriyalı yeni quruluşa çevrilə bilər (I-faza). Yalnız $T \approx 110^\circ C$ temperaturda I \rightarrow II çevrilməsi baş verir. [11]-ə görə $NaNO_3$ $T=298K$ temperaturunda qəfəs parametrləri: $a=5.069\text{Å}$, $c=16.82\text{Å}$, fəza qrupu R3c olan romboedrik qəfəsə malikdir. $T=563K$ temperaturda bu kristalın qəfəs parametrləri: $a=5.089\text{Å}$, $c=8.668\text{Å}$ və fəza qrupu R3m olan digər romboedrik qəfəsə çevrilir.

$(KNO_3)_{1-x}(NaNO_3)_x$ ($x=0.025;0.035;0.1$) bərk məhlullarında bəzi fiziki parametrlərdə təyin olunmuşdur. Belə ki, həmin birləşmələrdə dielektrik nüfuzluğunun temperatur asılılığı öyrənilmiş və müəyyən edilmişdir ki, KNO_3 -ün seqnetoelektrik III-fazası nümunə qızdırıldıqda müşahidə oluna bilər [12]. Bununla yanaşı $K_{1-x}Na_xNO_3$ və $Na_{1-x}K_xNO_3$ -kristallarında da dielektrik ölçülmələri aparılmışdır [13, 14].

TƏCRÜBİ HİSSƏ

Təcrübələrin ilk mərhələsində monokristalları məhluldan izotermik kristallaşma üsulu ilə $K_{1-x}Na_xNO_3$ yetişdirilmişdir. Bu məqsədlə tələb olunan nisbədə "ЧДА" markalı KNO_3 , "XЧ" markalı $NaNO_3$ götürülmüş, distillə olunmuş suda məhlulunda izotermik kristallaşma üsulu ilə müstəvi lövhə ($1 \times 2 \times 10$ mm ölçülü) və iynəvari şəkildə monokristallar alınmışdır. Rentgen tədqiqatları göstərilmişdir ki, iynənin boyu [001] kristalloqrafik istiqamətindədir. Onu da qeyd edək ki, alınan nümunələr müxtəlif forma və ölçülərdə ola bilər.

Laue çəkilişi zamanı PKB rentgen kamerasından istifadə olunmuşdur. Təqdim olunan işdə təcrübələr iki mərhələdə aparılmışdır. Birinci mərhələdə alınan nümunənin otaq temperaturunda laueqramını çəkilməmişdir (Şəkil1). Şəkildən göründüyü kimi məhluldan alınan nümunələr monokristaldırlar.



a) $K_{0.955}Na_{0.045}NO_3$



b) $K_{0.965}Na_{0.035}NO_3$

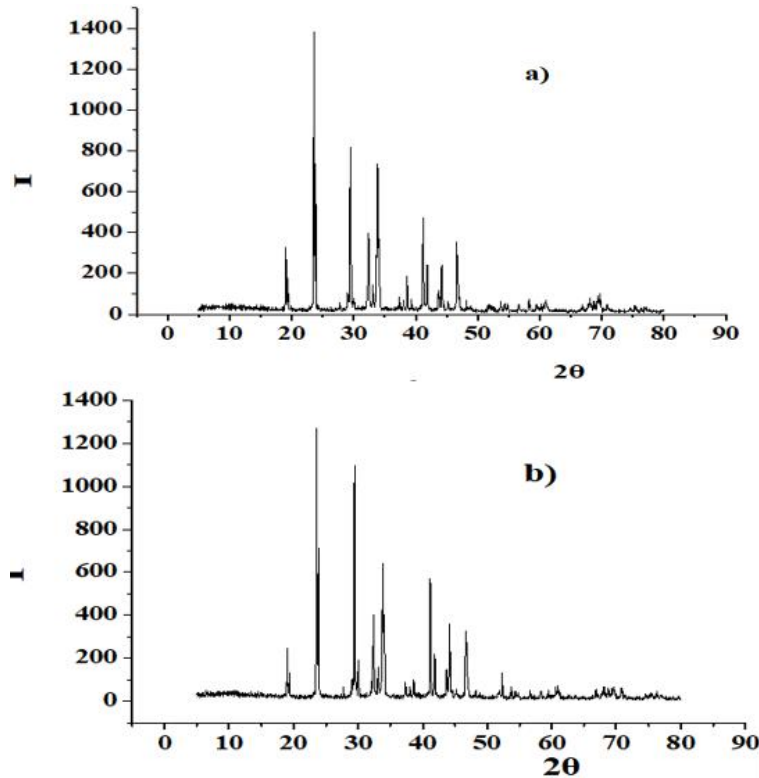
Şəkil 1. $K_{0.955}Na_{0.045}NO_3$ və $K_{0.965}Na_{0.035}NO_3$ kristallarının otaq temperaturunda çəkilmiş laueqramları.

İşdə rentgenoqrafik təcrübələr Bruker firmasının ADVANCE D8 difraktometrində aparılmışdır. Alınan monokristallar ovuntu şəkilinə salınaraq otaq temperaturunda CuK_{α} ($\lambda=1.54051\text{\AA}$) şüalanmada, $10^{\circ}<2\theta<90^{\circ}$ bucaq intervalında 40kV, 40mA rejimdə çəkilişlər aparılmışdır. Difraktoqramda müşahidə olunan difraksiya əks olunmaları parametrləri: $a=6.4243\text{\AA}$, $b=5.4122\text{\AA}$, $c=9.1561\text{\AA}$, fəza qrupu Pmcn olan rombik qəfəsdə indekslənmişdir (şəkil 2). Difraksiya əks olunmalarının indekslənməsi və işlənməsi zamanı TOPAS və EVA proqramlarından istifadə olunmuşdur.

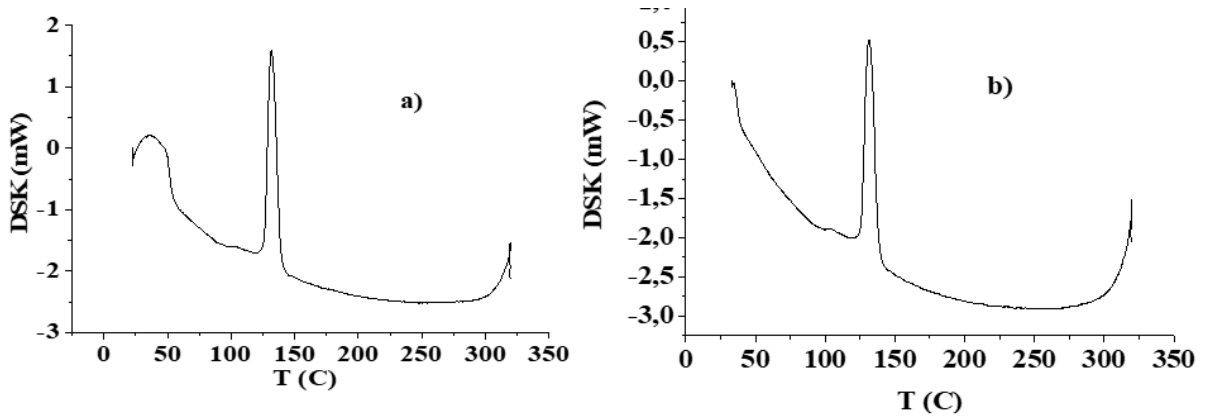
Diferensial Skanedicli Kalorimetriya (DSK) üsulu ilə nümunənin termik xüsusiyyətləri öyrənilmiş, təcrübələr $20-320^{\circ}C$ temperatur intervalında STA 3000 Sinxron Termal Analiz (Synchronous Thermal Analyzer) qurğusunda $5^{\circ}C/dəq$ qızdırılma sürətilə yerinə yetirilmişdir. Təcrübələr alüminium (Al) küveytlər-

dən istifadə olunaraq azot mühitində yerinə yetirilmişdir.

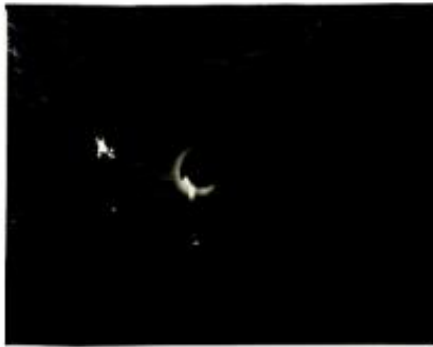
Təcrübələrin növbəti mərhələsində DSK ölçüləri aparılmışdır. Təcrübələr zamanı hər iki kristalın derivatoqramında yalnız bir endoeffekt müşahidə olunmuşdur. Həmin endoeffektlərin mərkəzi $K_{0.955}Na_{0.045}NO_3$ -də $130.5^{\circ}C$ -temperaturda müşahidə edilir (şəkil 3). Bu endoeffektin entalpiyası üçün $21.63C/q$ alınmışdır. $K_{0.965}Na_{0.035}NO_3$ -də $129.5^{\circ}C$, endoeffektin entalpiyası $19.34 C/q$ olmuşdur. Nəzərdən keçirdiyimiz DTA əyrisində müşahidə olunan endotermik effekt kristal quruluşunun dəyişməsilə izah oluna bilər. Doğrudanda məhluldan alınmış kristalın laueqramını otaq temperaturunda aldıqdan sonra, kristalın qaniometrik başlıqda vəziyyətini dəyişmədən temperaturunu $135^{\circ}C$ -ə qaldıraraq bərdə çəkiliş aparmaqla əmin olundu ki, tədqiq olunan nümunələrdə quruluş çevrilməsi baş verir və bu monokristal→monokristal tiplidir (şəkil 4).



Şəkil 2. $K_{0.955}Na_{0.045}NO_3$ (a) və $K_{0.965}Na_{0.035}NO_3$ (b) kristallarından otaq temperaturunda çəkilmiş difraktoqram.



Şəkil 3. Qızdırılma zamanı $K_{0.955}Na_{0.045}NO_3$ (a) və $K_{0.965}Na_{0.035}NO_3$ (b) kristallarından alınan derivatoqramlar.



a) $K_{0.955}Na_{0.045}NO_3$



b) $K_{0.965}Na_{0.035}NO_3$

Şəkil 4. $K_{0.955}Na_{0.045}NO_3$ və $K_{0.965}Na_{0.035}NO_3$ kristallarının $T=135^\circ C$ temperaturda laueqramları.

Beləliklə, təcrübi nəticələrin təhlili göstərir ki, KNO_3 kristalında K^+ ionlarının Na^+ ionları ilə qismən əvəz olunması alınan kristalda quruluş çevrilmələrinin

sayına, eləcədə çevrilmə temperaturuna nəzərə cərpacaq təsir göstərmir.

- [1] A.M. Кутайгородский, Ю.В. Мнюх, Ю.Г. Асадов. Докл.АН СССР, 1963, т.48, № 5, стр.1065-1068.
- [2] G.M.Agamirzaeva., G.G.Guseynov etc. Advanced Physical Reash. vol.5, 1, 2023, p.19-25.
- [3] В.И. Насиров. Полиморфизм в оптически прозрачных кристалла. Баку, 1997, стр.166.
- [4] Ю.Г. Асадов, В.И. Насиров. Докл. АН СССР. 1970, т.191, № 6, стр.128.
- [5] Ю.Г. Асадов, В.И. Насиров. Кристаллография,1972, т.17, вып.5, с.991-994.
- [6] A.F. Həziyeva., Fəlsəfə doktoru dissertasiyası, Bakı, 2012.
- [7] V.İ. Nəsirov, R.B. Bayratov, A.F. Həziyeva. Fizikanın aktual problemləri Beynəlxalq konfransı. Bakı, BDU, 2013, səh.145-147.
- [8] В.И. Насиров, А.Ф. Хазиева, Ю.Г. Асадов, А.С. Амиров. Докл.АН Азерб., 2011, № 2,стр.33-38.
- [9] P.E. Tahvonen. X-ray investigation of molecular rotation in potassium nitrate crystals. Ann. Acad. Sic. Fennicae,1947, № 44 ,p.20.
- [10] P.N. Brigman. ProcAnn.Acad. 51, 579, 1918.
- [11] N. Trappeniens. Le principe des etatscorrespondants et les diagrammes d'etat du tetrachlorure et du tetrabromure de carbone. Bruxelles: 1952. p.92.
- [12] H. Jendoubi, D. Hellali, H. Zamali et al. The phase diagram of KNO_3 - $RbNO_3$ Journal Therm. Analy. Cal., 2013. V.111, № 1, pp.877-883.
- [13] А.Ю. Милинский, Ю.О. Иванюк, С.В. Барышников. Физика и Электроника, 2012. т.14, № 4, с.141-147.
- [14] Y. Asao, J. Jukusi, A. Rinjiro et al. The electrical resistivities of $NaNO_3$ and KNO_3 crystals. J. Phys. Soc. Japan, 1962. v.17, № 3, p. 442-446.

KLEYN-FOK-QORDON TƏNLİYİNİN HÜLTEN VƏ YUKAVA SINIF POTENSİALLARIN XƏTTİ KOMBİNASİYASI ÜÇÜN ANALİTİK HƏLLİ

M.V. QOCAYEVA

*Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu,
Azərbaycan Respublikası Bakı şəhəri, H.Cavid pr.,131, AZ-1073
mefkureqocayeva@yahoo.com*

Bu işdə Hülten potensialı və Yukava sinfi potensialı üçün modifikasiya olunmuş Kleyn-Fok-Qordon tənliyinin bağlı hallar üçün həlli tapılmışdır. İstənilən orbital kvant ədədi üçün enerjinin məxsusi qiymətləri və müvafiq radial dalğa funksiyalarının analitik ifadələri alınmışdır. Alınan xüsusi funksiyalar hiperhəndəsi funksiyalar ilə ifadə edilir. Biz potensialın mərkəz-dənqəçmə hissəsinin çətinliklərini aradan qaldırmaq üçün unikal yaxınlaşma sxemini tətbiq edilmişdir. Potensial parametrlərdən asılı olaraq enerji səviyyələrinin və məxsusi funksiyaların ifadələri göstərilmişdir.

Açar sözlər: Kleyn-Fok-Qordon tənliyi, Hülten potensialı, Yukava potensialı, Nikiforov-Uvarov metodu.

1. Giriş

Kvant mexanikası uzun müddət inkişaf edərək fizikanın ayrıca bir sahəsinə çevrilmişdir. Fiziki potensiallar üçün dəqiq həll oluna bilən məsələləri həll etmək olduqca vacibdir [1–2].

Relyativistik və qeyri-relyativistik kvant mexanikası çərçivəsində nüvə və elementar zərrəciklər fizikası, həmçinin atom və molekul fizikası sahəsindəki tədqiqatlarda potensial modellər həmişə mühüm hətta təməl rol oynayır. Potensial modellərdə mikroobyektlərin fiziki xassələri müxtəlif dalğa tənliklərindən istifadə etməklə təsvir və şərh olunur, məsələn, Şredinger, Kleyn-Fok-Qordon, sonlu fərq tənlikləri və Dirak tənliyi kimi [1-2]. Bu zaman dəqiq və ya fenomenoloji olaraq təqdim edilmiş qarşılıqlı təsir potensiallarından istifadə edilir. Bu tip potensiallar çoxdur. Həm relyativistik həm də qeyri-relyativistik oblastlarda geniş istifadə olunan ən məşhur potensiallar Morse, Eskart, Manning-Rosen, Hülten, Vud-Sakson, Makarova, Yukava və s. potensiallarıdır [3-10].

Potensial modelin əhəmiyyəti, ilk növbədə, onun nəzərdən keçirilən fiziki sistemin müəyyən xassələrini nə dərəcədə yaxşı təsvir etməsi ilə müəyyən edilir. Modelin başqa bir cəhəti onun dəqiq həll oluna bilməsidir.

Şredinger, Kleyn-Fok-Qordon və Dirak tənliklərinin həlli kvant mexanikasında mühüm əhəmiyyət kəsb edir, çünki nəticədə əldə olunan dalğa funksiyası kvant

sistemlərinin tam təsviri üçün vacib məlumatlar verir. Az sayda potensial var ki, hər hansı radial və orbital kvant ədədləri üçün KFQ tənliyi dəqiq həll oluna bilər [11-20]. Məlumdur ki, kvant sistemləri müxtəlif metodlarla araşdırılır, o cümlədən supersimmetriya, faktori-zasiya metodu, laplas çevrilməsindən istifadə etməklə yaxınlaşma, trayektoriya üzrə inteqral və Nikiforov-Uvarov (NU) metodu. Sadalanan üsullar işlənilib hazırlanmış və kvant dalğa tənliyinin həllinə yönəlmişdir [11-20].

Hülten, Mors, Manning-Rosen, Vud-Sakson, Eskart, Rosen-Mors da daxil olmaqla bir çox eksponensial tip potensiallar $l \neq 0$ halı üçün yaxınlaşma tətbiq edilərək tədqiq edilmiş, əlaqəli hallar üçün bəzi analitik həllər əldə edilmişdir [11-20].

Bu işdə Kleyn-Fok-Qordon tənliyi Hülten potensialı və Yukava sinfi potensialının xətti kombinasiyası üçün orbital kvant ədədinin ixtiyari sıfırdan fərqli ($l \neq 0$) qiymətləri üçün Nikiforov-Uvarov metodunun köməyi ilə analitik həll edilmişdir.

2. Kleyn-Fok-Qordon tənliyinin əlaqəli hallarda Hülten və Yukava tip potensialların cəmi üçün analitik həlli

$S(r)$ skalyar və $V(r)$ vektorial potensialları üçün sferik koordinat sistemində KFQ tənliyi ($\hbar = c = 1$) atom ədədləri üçün belə təyin olunur:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \frac{\chi_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (2)$$

burada $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sferik harmonik funksiyadır.

(2) funksiyasını (1) tənliyində əvəzləməklə, radial KFQ tənliyini növbəti formada yazmaq olar:

$$\chi''(r) + \left[E^2 - M^2 - 2(MS(r) + EV(r)) + (V^2(r) - S^2(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \chi(r) = 0. \quad (3)$$

burada M – skalyar hissəciyin sükunət kütləsidir, E – hissəciyin relyativistik enerjisidir. (1) tənliyindəki $\psi(r, \theta, \varphi)$ dalğa funksiyası sferik koordinat sistemində aşağıdakı formada təqdim olunur:

Bizim bu işdə əsas məqsədımız Nikiforov-Uvarov metodundan istifadə edərək əlaqəli hallarda Hülten və Yukava tip potensialların xətti kombinasiyası üçün (1) tənliyinin analitik həllərini tapmaqdan ibarətdir.

Hülten potensialından atom və molekulyar fizika, kondensə olunmuş maddə və elementar hissəciklər fizikası, nüvə fizikası kimi müxtəlif tədqiqat sahələrində istifadə olunur. Bu potensial altındakı bir hissəcik üçün kvant effektləri əhəmiyyətli hal ala bilər, xüsusilə güclü əlaqə ilə.

Hülten potensialı aşağıdakı kimi təyin olunur: [6,7]:

$$V(r) = -\frac{Ze^2\delta e^{-\delta r}}{1 - e^{-\delta r}}. \quad (4)$$

Burada δ - ekranlaşma parametri, Z - isə atomun Mendeleyev cədvəlindəki sıra nömrəsidir.

Hülten potensialı fizikada əhəmiyyətli qısa məsafəli potensiallardan biridir. Bu potensialdan nüvə fizikasında, elementar zərrəciklər fizikasında, atom fizikasında və bərk cisimlər fizikasında istifadə edilmişdir. Bu potensialın ümumi dalğa funksiyaları atom fizikası və bərk cisimlər fizikasının məsələlərində istifadə olunur. Bu potensial altındakı bir hissəcik üçün kvant effektləri əhəmiyyətli hal ala bilər, xüsusilə güclü əlaqə ilə. Hülten potensialı Eskart potensialının xüsusi halıdır [4]. Qeyd etmək lazımdır ki, Hülten potensialı üçün KFQ radial tənliyini yalnız bucaq momentinin $l = 0$ halında analitik yolla həll etmək olar. Hülten potensialı

r radial kordinatın kiçik qiymətləri üçün özünü Kulon potensialı kimi, böyük qiymətləri üçün isə eksponensial olaraq azalır, ona görə də onun bağlı hal üçün təsiri Kulon potensialından azdır.

İkinci potensialımız Yukava tərəfindən təklif edilən [10], nuklonların güclü qarşılıqlı təsirinə çox yaxşı təsvir edən effektiv qeyri-relyativistik Yukava potensialıdır. Yukava potensialı eksponensial amil səbəbi ilə $1/r$ -dən daha tez azalır.

Yukava sinif potensialı aşağıdakı kimi təqdim edilə bilər:

$$V(r) = -\frac{V_0 e^{-\delta r}}{r} - \frac{V_0' e^{-2\delta r}}{r^2} \quad (5)$$

burada V_0, V_0' - potensialın dərinliyini müəyyən edir.

Hülten və Yukava sinif potensialları ümumiləşdirmək üçün Yukava potensialının aşağıdakı formada unikal yaxınlaşmasını təbiiq edirik [22-24]:

$$\frac{1}{r} \approx \frac{2\delta e^{-\delta r}}{(1 - e^{-2\delta r})}, \quad (6)$$

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{4\delta^2 e^{-2\delta r}}{(1 - e^{-2\delta r})^2}. \quad (7)$$

Beləliklə Hülten və Yukava sinif potensialının cəmi aşağıdakı kimi təqdim oluna bilər:

$$V(r) = -\frac{2Ze^2\delta e^{-2\delta r}}{1 - e^{-2\delta r}} - \frac{2\delta V_0 e^{-2\delta r}}{1 - e^{-2\delta r}} - \frac{4\delta^2 V_0' e^{-4\delta r}}{(1 - e^{-2\delta r})^2} = -\frac{(A+B)e^{-2\delta r}}{1 - e^{-2\delta r}} - \frac{Ce^{-4\delta r}}{(1 - e^{-2\delta r})^2}, \quad (8)$$

burada

$$A = 2Ze^2\delta, B = 2\delta V_0, C = 4\delta^2 V_0'. \quad (9)$$

Bu iki potensialın xətti kombinasiyası potensial sahədəki hissəcik üçün deformasiya olunmuş nüvə çütü və spin-orbital qarşılıqlı əlaqəsini öyrənmək üçün istifadə oluna bilər.

Bu potensialın digər əhəmiyyətli xüsusiyyəti onun hadronik sistem daxilindəki dalğaları təsvir edərkən istifadə olunmasıdır. Bundan başqa bu potensial digər fiziki hadisələr üçün də əlverişli model rolunu oynaya bilər. Potensialın xətti kombinasiyası üçün KFQ

tənliyinin tədqiqindən dalğa funksiyaları və əlaqəli, diskret, eləcə də psevdoskalyar mezon sistemləri üçün enerjinin fiziki xassələri haqda daha dərin və dəqiq qiymətləndirmə əldə etmək mümkündür. Bu istiqamətdə araşdırmalara əsaslanaraq biz bu məqalədə Hülten və Yukava sinif potensialların xətti kombinasiyası üçün radial KFQ tənliyinin həllini təqdim edirik.

(8) potensialını (3) tənliyində əvəzləməklə radial KFQ tənliyi üçün alırıq:

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \left[E^2 - M^2 - \frac{4\delta^2 l(l+1)e^{-2\delta r}}{(1 - e^{-2\delta r})^2} + 2(M+E) \frac{(A+B)e^{-2\delta r}}{1 - e^{-2\delta r}} + 2(M+E) \frac{Ce^{-4\delta r}}{(1 - e^{-2\delta r})^2} \right] \chi(r) = 0 \quad (10)$$

(10) tənliyindən aydın olur ki, $r \rightarrow 0$ yaxınlaşdıqda mərkəzəqaçma potensialının özünəməxsusluğu var. Bu tənlik $l = 0$ olduqda dəqiq həll olunur.

Hülten potensialının mərkəzəqaçma hissəsi və Yukava sinif potensialının cəmi üçün $l \neq 0$ olduqda analitik həll almaq üçün (7) ifadəsini (10)-də yerinə yazırıq. Nəticədə alırıq:

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \left[E^2 - M^2 - \frac{4\delta^2 l(l+1)e^{-2\delta r}}{(1 - e^{-2\delta r})^2} + 2(M+E) \frac{(A+B)e^{-2\delta r}}{1 - e^{-2\delta r}} + 2(M+E) \frac{Ce^{-4\delta r}}{(1 - e^{-2\delta r})^2} \right] \chi(r) = 0 \quad (11)$$

(11) tənliyini Nikiforov-Uvarov metodundan istifadə edərək həll etmək üçün onu aşağıdakı kimi hiperhəndəsi tip tənliyə gətirmək lazımdır [21]:

$$\chi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \chi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} \chi(s) = 0. \quad (12)$$

(11) tənliyini (12) şəklində hiperhəndəsi tip tənliyə gətirmək üçün $s = e^{-2\delta r}$ formasında yeni dəyişən daxil etməliyik

$$\frac{d}{dr} = \frac{ds}{dr} \frac{d}{ds} = -2\delta e^{-2\delta r} \frac{d}{ds} = -2\delta s \frac{d}{ds},$$

$$\frac{d^2}{dr^2} = \left(\frac{ds}{dr} \frac{d}{ds} \right) \left(\frac{ds}{dr} \frac{d}{ds} \right) = -2\delta s \frac{d}{ds} (-2\delta s \frac{d}{ds}) = 4\delta^2 s \left(\frac{d}{ds} + s \frac{d^2}{ds^2} \right) = 4\delta^2 s \frac{d}{ds} + 4\delta^2 s^2 \frac{d^2}{ds^2}. \quad (13)$$

(13) -dəki yeni dəyişənləri (11) tənliyində nəzərə alsaq, onda alarıq:

$$\frac{d^2 \chi(s)}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{d\chi(s)}{ds} + \frac{1}{4\delta^2 s^2} \left[E^2 - M^2 - \frac{4\delta^2 l(l+1)s}{(1-s)^2} + 2(M+E) \frac{(A+B)s}{1-s} + \frac{2(M+E)Cs^2}{(1-s)^2} \right] \chi(s) = 0 \quad (14)$$

(14) diferensial tənliyini daha yığcam şəkə salmaq üçün aşağıdakı kimi əvəzləmələr daxil etməliyik:

$$-\varepsilon^2 = \frac{E^2 - M^2}{4\delta^2}, \quad \alpha^2 = \frac{(M+E)(A+B)}{2\delta^2}, \quad \beta^2 = \frac{(M+E)C}{2\delta^2}. \quad (15)$$

(15) də verilmiş ifadələri (14) də nəzərə alaraq alırıq:

$$\chi''(s) + \frac{1-s}{(1-s)s} \chi'(s) + \frac{1}{(1-s)^2 s^2} \left[-\varepsilon^2 (1-s)^2 - l(l+1)s + \alpha^2 s(1-s) + \beta^2 s^2 \right] \chi(s) = 0 \quad (16)$$

Biz indi (16) tənliyini həll etmək üçün Nikiforov-Uvarov metodunu uğurla tətbiq edə bilərik.

(16) tənliyi ilə (12) tənliyini müqayisə etməklə $\tilde{\tau}(s)$, $\sigma(s)$ və $\tilde{\sigma}(s)$ üçün alırıq:

$$\sigma(s) = (1-s)s, \quad \tilde{\tau}(s) = 1-s, \quad \tilde{\sigma}(s) = -\varepsilon^2 (1-s)^2 - l(l+1)s + \alpha^2 s(1-s) + \beta^2 s^2. \quad (17)$$

$\pi(s) = \frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2} \right)^2 - \tilde{\sigma}(s) + k\sigma(s)}$ - formulasından və (17) ifadəsindən istifadə edərək $\pi(s)$ funksiyası üçün alırıq:

$$\begin{aligned} \pi(s) &= \frac{\sigma(s) - \tilde{\tau}(s)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2} \right)^2 - \tilde{\sigma}(s) + k\sigma(s)} = \\ &= -\frac{s}{2} \pm \sqrt{\frac{s^2}{4} + \varepsilon^2 (1-s)^2 + l(l+1)s - \alpha^2 s(1-s) - \beta^2 s + ks - ks^2} = \\ &= -\frac{s}{2} \pm \sqrt{\frac{s^2}{4} + \varepsilon^2 s^2 - 2\varepsilon^2 s + \varepsilon^2 + \alpha^2 s^2 - \alpha^2 s - \beta^2 s^2 + ks - ks^2 + l(l+1)s} = \\ &= -\frac{s}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{4} + \varepsilon^2 + \alpha^2 - \beta^2 - k \right) s^2 - (2\varepsilon^2 + \alpha^2 - l(l+1) - k) s + \varepsilon^2} = \\ &= -\frac{s}{2} \pm \sqrt{(a-k)s^2 - (b-k)s + c}, \end{aligned} \quad (18)$$

burada

$$a = \frac{1}{4} + \varepsilon^2 + \alpha^2 - \beta^2, \quad b = 2\varepsilon^2 + \alpha^2 - l(l+1), \quad c = \varepsilon^2 \quad (19)$$

k parametrini (18) ifadəsindən aşağıdakı kimi tapmaq olar. (18) tənliyində kökaltı ifadənin diskriminantını sıfıra bərabər edərək tapırıq:

$$(a-k)s^2 - (b-k)s + c = 0, \quad (20)$$

$$D = (b-k)^2 - 4(a-k)c = k^2 + (4c-2b)k + (b^2-4ac),$$

$$k^2 + (4c-2b)k + (b^2-4ac) = 0, \quad (21)$$

$$k_{1,2} = (b-2c) \pm 2\sqrt{c^2 + c(a-b)}.$$

(21) ifadəsini в (18)- da yazmaqla $\pi(s)$ funksiyası üçün alırıq:

$$\pi(s) = -\frac{s}{2} \pm \begin{cases} (\sqrt{c} - \sqrt{c+a-b})s - \sqrt{c}, & \text{для } k = (b-2c) + 2\sqrt{c^2 + c(a-b)} \\ (\sqrt{c} + \sqrt{c+a-b})s - \sqrt{c}, & \text{для } k = (b-2c) - 2\sqrt{c^2 + c(a-b)} \end{cases} \quad (22)$$

(21) ifadəsindən görüldüyü kimi $\pi(s)$ çoxhədlisinin dörd mümkün qiyməti var, ancaq biz $\pi(s)$ funksiyasının elə qiymətlərini seçirik ki, $\tau(s)$ funksiyasının törəməsi mənfi olsun. Digər qiymətlərin fiziki mənası yoxdur.

Beləliklə, $\pi(s)$ və $\tau(s)$ funksiyaları müvafiq olaraq aşağıdakı kimi olur:

$$\pi(s) = \sqrt{c} - s \left[\frac{1}{2} + \sqrt{c} + \sqrt{c+a-b} \right], \quad (23)$$

$$\pi'(s) = -\frac{1}{2} - \left[\sqrt{c} + \sqrt{c+a-b} \right], \quad (24)$$

$$k = (b-2c) - 2\sqrt{c^2 + c(a-b)}, \quad (25)$$

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) = (1-s) + 2\pi(s) = 1 - \left[2 + 2\sqrt{c} + \sqrt{c+a-b} \right]s + 2\sqrt{c},$$

$$\tau'(s) = -\left[2 + 2(\sqrt{c} + \sqrt{c+a-b}) \right]. \quad (26)$$

Enerjinin məxsusi qiymətləri adətən aşağıdakı ifadələrdən tapılır:

$$\lambda = k + \pi'(s), \quad (27)$$

və

$$\lambda_n = -n\tau'(s) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s). \quad (28)$$

Əgər (25) və (26) ifadələrini (28)-da yerinə yazsaq, λ üçün alırıq:

$$\lambda = (b-2c) - 2\sqrt{c^2 + c(a-b)} - \frac{1}{2} - (\sqrt{c} + \sqrt{c+a-b}), \quad (29)$$

Digər tərəfdən λ_n bu şəkildə təyin olunur:

$$\lambda_n = -n\tau'(s) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s) = n(2 + 2\sqrt{c} + \sqrt{c+a-b}) + n(n-1) \quad (30)$$

(29) və (30) ifadələrinin sol tərəfləri bərabərdir, buna görə də onların sağ tərəflərini bərabərləşdirərək aşağıdakı ifadəni alırıq:

$$(b-2c) - 2\sqrt{c^2 + c(a-b)} - \frac{1}{2} - (\sqrt{c} + \sqrt{c+a-b}) = n(n-1) + 2n(1 + \sqrt{c} + \sqrt{c+a-b}). \quad (31)$$

Enerjinin məxsusi qiymətlərini tapmaq üçün (31) tənliyini \sqrt{c} -yə görə həll edərək, aşağıdakı kimi analitik ifadə alırıq:

$$\sqrt{c} = \frac{b - 2c - \frac{1}{2} - n(n+1) - (2n+1)\sqrt{c+a-b}}{1 + 2n + 2\sqrt{c+a-b}}, \quad (32)$$

burada

$$\begin{aligned} b - 2c &= \alpha^2 - l(l+1) \\ \sqrt{c+a-b} &= \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2} \end{aligned} \quad (33)$$

(33) ifadəsini (32)-də nəzərə alsaq, alarıq:

$$\sqrt{c} = \frac{\alpha^2 - l(l+1) - \frac{1}{2} - n(n+1) - (2n+1)\sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2}}{1 + 2n + 2\sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2}}. \quad (34)$$

(15) ifadəsini (34)-də nəzərə alsaq, enerji spektri üçün aşağıdakı kimi analitik ifadə alarıq:

$$\begin{aligned} E^2 - M^2 &= -4 \cdot \left[\frac{\alpha^2 - l(l+1) - \frac{1}{2} - n(n+1) - (2n+1)\sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2}}{1 + 2n + 2\sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2}} \cdot \delta \right]^2 = \\ &= - \left[\frac{\alpha^2 - l(l+1) - \frac{1}{2} - n(n+1) - (2n+1)\sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2}}{\frac{1}{2} + n + \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2}} \cdot \delta \right]^2 \end{aligned} \quad (35)$$

Hülten üstəgəl Yukava sinif potensial sahədə hərəkət edən zərrəciyin radial funksiyasını tapmaq üçün $\chi(s)$ radial funksiyasını aşağıdakı kimi faktorizasiyaya ayırıq:

$$\chi(s) = \phi(s)y(s). \quad (36)$$

NU metodundan istifadə etməklə $\phi(s)$ funksiyası aşağıdakı şərtədən tapılır:

$$\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)}. \quad (37)$$

İndi (37) tənliyini həll edərək $\phi(s)$ funksiyası üçün tapırıq:

$$\begin{aligned} \ln \phi(s) &= \ln \left[s^\varepsilon (1-s)^{\left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2}\right)} \right] \\ \phi(s) &= s^\varepsilon \cdot (1-s)^{\left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2}\right)} \end{aligned} \quad (38)$$

$y_n(s)$ funksiyası aşağıdakı Rodriqes formulundan tapılır:

$$y_n(s) = \frac{C_n}{\rho(s)} \cdot \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s)\rho(s)]. \quad (39)$$

Burada C_n – normallaşma sabitidir, $\rho(s)$ -çəki funksiyasıdır və aşağıdakı kimi Pearson tənliyinin həllindən tapılır:

$$\frac{d}{ds}(\sigma(s) \cdot \rho(s)) = \tau(s) \cdot \rho(s). \quad (40)$$

(40) tənliyini $\rho(s)$ -ə görə həll edərək alırıq:

$$\rho(s) = s^{2\varepsilon} (1-s)^{2\sqrt{\frac{1}{4}+l(l+1)-\beta^2}}. \quad (41)$$

(39)-də $\rho(s)$ çəki funksiyasını əvəzləməklə $y_n(s)$ funksiyası üçün tapırıq:

$$y_n(s) = \frac{C_n}{s^{2\varepsilon} (1-s)^{2\sqrt{\frac{1}{4}+l(l+1)-\beta^2}}} \frac{d^n}{ds^n} \left[s^{n+2\varepsilon} (1-s)^{n+2\sqrt{\frac{1}{4}+l(l+1)-\beta^2}} \right] \quad (42)$$

Bunu nəzərə alaraq,

$$\frac{d^n}{ds^n} \left[s^{n+2\varepsilon} (1-s)^{n+2\sqrt{\frac{1}{4}+l(l+1)-\beta^2}} \right] = s^{2\varepsilon} (1-s)^{2\sqrt{\frac{1}{4}+l(l+1)-\beta^2}} P_n^{(2\varepsilon, 2\sqrt{\frac{1}{4}+l(l+1)-\beta^2})} (1-2s), \quad (43)$$

$y_n(s)$ funksiyaları üçün alırıq:

$$y_n(s) = C_n P_n^{(2\varepsilon, 2\sqrt{\frac{1}{4}+l(l+1)-\beta^2})} (1-2s) \quad (44)$$

İndi (38) və (44) ifadələrini b (36)-də əvəzləməklə, $\chi(s)$ radial dalğa funksiyası üçün alırıq:

$$\chi_n(s) = C_n s^\varepsilon (1-s)^K P_n^{(2\varepsilon, 2K-1)} (1-2s) \quad (45)$$

Burada $K = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2}$.

Yakobi polinomlarının xassələrindən və hiperhəndəsi funksiyanın köməyi ilə $\chi(s)$ radial dalğa funksiyasını ifadə edirik [25]. Bunu aşağıdakı kimi edirik:

$$P_n^{(p,q)}(2s) = \frac{(-1)^n}{n! 2^n (1-s)^p (1+s)^q} \frac{d^n}{ds^n} \left[(1-s)^{p+n} (1+s)^{q+n} \right], \quad (46)$$

və

$$P_n^{(p,q)}(1-2s) = \frac{\Gamma(n+p+1)}{n! \Gamma(p+1)} {}_2F_1(-n, p+q+n+1, p+1; s). \quad (47)$$

$$P_n^{(p,q)}(s) = \frac{\Gamma(n+p+1)}{n! \Gamma(p+1)} {}_2F_1(-n, p+q+n+1, p+1; \frac{1}{2}(1-s))$$

Bu halda $p = 2\varepsilon, q = 2K - 1$,

Onda $\chi(s)$ funksiyası üçün kompakt ifadə bu formada olur:

$$\chi_n(s) = C_n s^\varepsilon (1-s)^K \frac{\Gamma(n+2\varepsilon+1)}{n! \Gamma(2\varepsilon+1)} {}_2F_1(-n, 2\varepsilon+2K+n, 1+2\varepsilon; s) \quad (48)$$

Burada C_n - normallaşma şərtindən tapılan normallaşma sabitidir:

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\chi(r)|^2 dr = 2\delta \int_0^1 \frac{1}{s} |\chi(s)|^2 ds = 1 \quad (49)$$

İnteqral formullarından istifadə edərək alırıq:

$$\int_0^1 (1-s)^{2(\delta+1)} s^{2\lambda-1} \left\{ {}_2F_1(-n, 2(\delta+\lambda+1)+n, 2\lambda+1; s) \right\}^2 ds = \frac{(n+\delta+1)n!\Gamma(n+2\delta+2)\Gamma(2\lambda)\Gamma(2\lambda+1)}{(n+\delta+\lambda+1)\Gamma(n+2\lambda+1)\Gamma(2(\delta+\lambda+1)+n)} \quad (50)$$

Bu hal üçün:

$$\lambda = \varepsilon, \delta = K - 1$$

onda

$$\int_0^1 s^{2\varepsilon-1} (1-s)^{2K} \left[{}_2F_1(-n, 2\varepsilon+2K+n, 1+2\varepsilon; s) \right]^2 ds = \frac{(n+K)n!\Gamma(n+2K)\Gamma(2\varepsilon)\Gamma(2\varepsilon+1)}{(n+\varepsilon+K)\Gamma(n+2\varepsilon+1)\Gamma(2\varepsilon+2K+n)} \quad (51)$$

$$C_n^2 \left(\frac{\Gamma(n+2\varepsilon+1)}{n!\Gamma(2\varepsilon+1)} \right)^2 \frac{1}{2\delta} \frac{(n+K)n!\Gamma(n+2K)\Gamma(2\varepsilon)\Gamma(2\varepsilon+1)}{(n+\varepsilon+K)\Gamma(n+2\varepsilon+1)\Gamma(2\varepsilon+2K+n)} = 1 \quad (52)$$

$$C_n = \sqrt{\frac{2\delta n!(n+K+\varepsilon)\Gamma(2\varepsilon+2K+n)\Gamma(2\varepsilon+1)}{(n+K)\Gamma(n+2K)\Gamma(2\varepsilon)\Gamma(n+2\varepsilon+1)}} \quad (53)$$

- | | |
|--|--|
| <p>[1] V.G. Bagrov and D.M. Gitman. Exact solutions of relativistic wave equations, Dordrecht; Boston: Kluwer Academic, Publishers, 1990.</p> <p>[2] W. Greiner. Relativistics Quantum Mechanics, 3ed. edition Berlin, Springer, 2000.</p> <p>[3] P.M. Morse. Phys. Rev. 34:1, 1929, 57.</p> <p>[4] C. Eckart. Phys. Rev. 35, 1930, 1303.</p> <p>[5] M.F. Manning, N. Rosen. Phys. Rev. 44:11, 1933, 951.</p> <p>[6] L. Hulthén. Ark. Mat. Astron. Fys. 28A, 5, 1942.</p> <p>[7] L. Hulthén. Ark. Mat. Astron. Fys. 29B, 1, 1942.</p> <p>[8] D.S. Saxon and R.D. Woods. Phys. Rev. 95, 1954, 577.</p> <p>[9] A.A. Makarov, Ya.A. Smorodinsky, Kh.Valiev, P. Winternitz and Nuovo Cimento. A.52, 1967, 1061.</p> <p>[10] H. Yukawa. Proc. Phys. Math. Soc. Jap.17, 48, 1935.</p> <p>[11] В.Г. Багров, А.Г. Мешков, В.Н. Шаповалов, А.В. Шаповалов. Известия вузов, Физика, № 11, 1973, с.66-72.</p> <p>[12] В.Г. Багров, А.Г. Мешков, В.Н. Шаповалов, А.В. Шаповалов. Известия вузов, Физика, №12, 1973, с.45-52.</p> <p>[13] В.Г. Багров, А.Г. Мешков, В.Н. Шаповалов, А.В. Шаповалов. Известия вузов, Физика, № 6, 1974, с.74-78.</p> <p>[14] В.Г. Багров, А.Г. Мешков, В.Н. Шаповалов, А.В. Шаповалов. Известия вузов, Физика, № 3, 1975, с.152-154.</p> | <p>[15] A.I. Ahmadov, S.M. Aslanova, M.Sh. Orujova, S.V. Badalov and S.H. Dong. Phys. Lett. A 383, 3010, 2019.</p> <p>[16] A.I. Ahmadov, S.M. Aslanova, M.Sh. Orujova, S.V. Badalov. Advances in High Energy Phys. Vol. 2021, Article ID, 8830063, 2021.</p> <p>[17] Sh.M. Nagiyev, A.I. Ahmadov. Int. J. Mod. Phys. A34, № 17, 1950089, (2019).</p> <p>[18] A.I. Ahmadov, Naeem Maria, M.V. Qocayeva and V.A. Tarverdiyeva. Int. J. Mod. Phys. A33, № 03, 1850021 (2018).</p> <p>[19] A.İ. Ahmadov, M. Demirci, S.M. Aslanova, M.F. Mustamin. Physics Letters A, 384, 126372, 2020.</p> <p>[20] T.G. Aliyeva and G.G. Quliyeva. Russian Physics Journal, Vol. 63, № 12, 2141, 2021.</p> <p>[21] A.F. Nikiforov and V.B. Uvarov. Special Functions of Mathematical Physics., Birkhäuser, Boston, Springer, 1988.</p> <p>[22] W.C. Qiang, S.H. Dong. Phys. Lett. A 363, 169, 2007.</p> <p>[23] G.F. Wei, S.H. Dong. Phys. Lett. A 373, 49, 2008.</p> <p>[24] W.C. Qiang, S.H. Dong. Phys. Scr. 79, 045004, 2009.</p> <p>[25] M. Abramowitz, I.A. Stegun. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, Mathematical Tables (Dover, New York, 1964).</p> |
|--|--|

M.V. QOCAYEVA

M.V. Gojayeva

**ANALYTICAL SOLUTION OF THE KLEIN-FOCK-GORDON EQUATION FOR THE LINEAR
COMBINATION OF THE HULTÉN AND THE CLASS OF YUKAWA POTENTIALS**

In this study, the bound state's solution of the modified Klein-Fock-Gordon equation is found for the new supposed combined Hultén potential and the Yukawa class potentials. The analytical expressions of the energy eigenvalue and the corresponding radial wave functions are obtained for any orbital quantum number. The obtained eigenfunctions are expressed in terms of hypergeometric functions. We applied the developed approximation scheme to overcome the potential's centrifugal part difficulties. It is shown that energy levels and eigenfunctions are sensitive depending on potential parameters.

ELEKTRON MATERIALŞÜNASLIĞINDA YENİ TENDENSİYALAR

VÜQAR ƏMİR OĞLU ƏLİYEV

Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutu

Texnikanın inkişafı müxtəlif təyinatlı funksional cihazların yaradılması üçün xüsusi xassələrə malik materialların yaradılmasını aktuallaşdırır. Bir qayda olaraq mövcud kimyəvi birləşmələrin, o cümlədən kristalları mövcud, məlum xassələrinin müəyyən üsullarla modifikasiyasına üstünlük verilir. Belə kristalların polikristallarının alınması və monokristallarının yetişdirilməsi texnologiyası işlənmiş olduğundan bunların əsas fiziki xassələrinin modifikasiyasına, idarə olunmasına yönəlməli işlərə üstünlük verilir.

İzomorf əvəzləmələrlə bərk məhlulların alınması

Bu gün respublikamızda bərk cisimlər fizikası və yarımqeçiricilər fizikasında geniş tədqiq olunan materialardan biri laylı və zəncirvari, tallium əsaslı üçqat $TIA^{III}B_2^{VI}$ ($A=In, Ga; B=S, Se, Te$) kristallarıdır.

Ötən əsrin 60-cı illərindən başlamış günümüzünə qədər tədqiq olunan $TIA^{III}B_2^{VI}$ kristallarında bir çox maraqlı elmi nəticələr alınmışdır. Bu dövrdə ən əlçatan modifikasiya üsulu kimi eyni sinifdən olan iki kristal arasında ($TIA^{III}B_2^{VI} - TIA^{III}B_2^{VI}$) bərk məhlulların alınmasıdır. Burada bərk məhlullar həm kation ($B = S, Se, Te$) alt sistemi, həm də anion ($A = In, Ga$) alt-sistemi əsasında alınmışdır.

Bəs bərk məhlul nədir? Onu mexaniki qarışıqdan, konqlomeratdan fərqləndirən cəhətlər hansıdır?

Əgər iki və daha çox komponent maye halında bir-birində istənilən qədər həll olaraq, bircinsli maye məhlul əmələ gətirirsə və kristallaşmadan sonra da, bu bircinsliyi bərk fazada saxlayırsa, belə maddələrə - bərk məhlul deyilir.

Bərk məhlulun kimyəvi tərkibi spektral analiz ilə, quruluşu isə rentgenstruktur analizi ilə sübut olunur. Bərk məhlulun massiv kristalları eynicinsli dənələrdən ibarət olsa da, onu təşkil edən komponentlərin xassələrindən fərqlənir.

Hazırkı dövrə qədər bu birləşmələr arasında demək olar ki, bütün sistemlər tədqiq edilmişdir. Bu sistemlər, əsasən, üçqat birləşmənin ya anion alt-qəfəsində, ya da kation alt-qəfəsində izomorf əvəzləmələrlə alınır. Belə sistemlərdə gözlənilən bərk məhlulların xassələrini müəyyən dərəcədə proqnozlaşdırmaq olur.

Fərqli fəza qruplu sistemlərdə bərk məhlullar

Yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, $TIA^{III}B_2^{VI}$ ($A=In, Ga; B=S, Se, Te$) kristalları iki fərqli fəza simmetriya qrupuna bölünür: laylı kristallar ($TlGaSe_2, TlGaS_2$ və $TlInS_2$) və zəncirvari (iynəvari) kristallar ($TlInSe_2, TlGaTe_2$ və $TlInTe_2$). Birinci qrup kristallar monoklin struktura, ikinci qrup kristallar isə tetraqonal struktura malikdirlər.

Belə qruplar arasında bərk məhlullar anionun və ya kationun müəyyən həllolma limitinə qədər bir fəza qrupunda, həmin limitdən sonra isə ikinci fəza qrupunda kristallaşır.

Aparılan ədəbiyyat təhlillərinin nəticəsinə əsasən demək olar ki, anion-anion, kation-kation əvəzləmələri olan sistemlərdən fərqli olaraq, anion-kation ikili

əvəzləməsi baş verən sistemlərdə fiziki xassələrin daha ciddi dəyişməsinə gözləmək olar.

İnterkalyasiya ilə tərkib və xassə modifikasiyası

Laylı və zəncirvari kristallarda atomlar arasında güclü kovalent əlaqə ilə yanaşı, laylar və zəncirlər (iynələr) zəif Van-der-Vaals rabitəsi mövcuddur. Bu laylararası məsafələr imkan verir ki, elektrik sahəsi tətbiq etməklə müəyyən ionları, məsələn litium ionlarını bu layların arasına dartmaq, daxil etmək olar. Bu prosesə interkalyasiya deyilir. İnterkalyasiya nəticəsində kristalın fiziki xassələr dəyişir.

AMEA Fizika İnstitutunun Kristallofizika laboratoriyasında 1985-ci ildən başlayaraq üçqat laylı-zəncirvari kristalların interkalyasiyası istiqamətində tədqiqatlar aparılır. $TlInSe_2$ kristallarını Li^+ ionları ilə interkalyasiya etdikdən sonra onun fotoelektrik xassələrini tədqiq edilmişdir [1]. İnterkalyasiya nəticəsində kristalın fotohəssaslığının iki tərtib artması müşahidə olunmuşdur.

İnterkalyasiya prosesi $TIA^{III}B_2^{VI}$ kristallarının fotovoltaiq spektrlərinə əhəmiyyətli dərəcədə təsir edir [2]. Fotovoltaiq signalın amplitudu 5-6 dəfə artmaqla yanaşı, fotocərəyanın spektrində həm də, yeni incə struktur yaranır.

İnterkalyasiyanın laylı kristalların elektrik, fotoelektrik və optik xassələrinə təsiri üzrə işləri yekunlaşdıraraq, qeyd etmək olar ki, interkalyasiyadan istifadə etməklə bu materialların işçi xarakteristikalarını idarə etmək imkanı yaranır.

Kristalları legirləməklə fiziki xassələrin modifikasiyası

Elmi-texniki ədəbiyyatın təhlili göstərir ki, müxtəlif tədqiqatçılar $TIA^{III}B_2^{VI}$ kristallarını ayrı-ayrı kimyəvi elementlərlə legirləməklə onun fiziki xassələrini modifikasiya etməyə böyük cəhdlər göstərmişlər. Belə tədqiqatlardan nümunə qismində $TlGaS_2$ kristallarının sürmə (Sb), gümüş (Ag), keçid metallarından kobalt (Co), xrom (Cr), dəmir (Fe), manqan (Mn), nadir torpaq elementlərindən erbiyum (Er), itterbiyum Yb və s. elementlərlə legirlənməsi hallarını qeyd etmək olar.

Kristalların elektrokimyəvi modifikasiyası

$TIA^{III}B_2^{VI}$ kristallarının unikal elektron strukturu bu kristallarda eyni zamanda həm elektron keçiriciliyi, həm də ion keçiriciliyi mövcuddur.

TlA^{III}B₂^{VI} kristallarının ion keçiriciliyi onun xassələrinin dəyişdirilməsinə imkan verir. Modifikasiya kristaldan elektrik cərəyanı keçirilərək həyata keçirilir. Cərəyanın axını kristal boyunca mobil ionların yenedən paylanması ilə müşayiət olunur ki, bu da onun xüsusiyyətlərinin dəyişməsinə səbəb olur. Bənzər bir təsir elektrokimyəvi interkalasiya yolu ilə əldə edilir. Bu zaman kristal strukturunda tallium ionları qismən litium, natrium və ya gümüş ionları ilə əvəz olunur.

Bu qrupun materiallarını dəyişdirmək üçün ikinci yanaşma materialın 2D təbəqələrə bölünməsinə əsaslanır. Məlumdur ki, kristalların kvazi-ikiözlü təbəqələ-

rə parçalanması kristalın xassələrini keyfiyyətcə dəyişir. Parçalanma zamanı materialın xassələrinin çevrilməsinin parlaq nümunəsi qrafitdən onun ikiözlü analoq qrafeninə keçiddir. Kristal parçalanmasının onun xassələrinə təsir etməsi faktı TlGaSe₂ üçün də təsdiq edilmişdir. Beləliklə, Pekin Universiteti və Arizona Dövlət Universitetinin müəllifləri mikromexaniki üsulla ultra nazik TlGaSe₂ təbəqələrini əldə etməyə nail olmuş və materialın qalınlığının azaldılmasının materialın spektral xüsusiyyətlərini keyfiyyətcə dəyişdiyini və onların əsasında fotosensorların işini əhəmiyyətli dərəcədə artırdığını göstərmişlər [3].

-
- [1] *G.D. Guseinov, S.N. Mustafæva, E.F. Bagirzade, E.G. Abdullaev, S.G. Guseinov.* Photoelectrical properties of lithium-intercalated TlInSe₂ chain crystals. Solid State Communication, 1985, v.55, № 11, pp.991-992.
- [2] *S.N. Mustafæva, M.M. Asadov, V.A. Aliyev, V.A. Ramazanade.* Influence of lithium intercalation on photovoltaic spectra of TlInSe₂ and TlGaSe₂ single crystals. In/

Materials of 12th International Conference on ternary and multinary compounds (ISTMC-12), Hsin Chu, Taiwan, 1999, p.1-56.

- [3] *Shengxue Yang, Minghui Wu, Hui Wang, Hui Cai, Li Huang, Chengbao Jiang, Sefaatin Tongay.* Ultrathin Ternary Semiconductor TlGaSe₂ Phototransistors with Broad-Spectral Response. 2D Materials, 2017. V4. № 2.

**In_{1-x}Er_xSe (x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007) In_{1-x}Sm_xSe (x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07)
KRİSTALLARININ ELEKTRİK XASSƏLƏRİNİN TƏRKİBDƏN ASILILIĞI****P.H. İSMAYILOVA, A.Ə. İSMAYILOV*, Ə.Ə. İSMAYILOV, X.Ş. VƏLİBƏYOV*****Azərbaycan ETN Fizika İnstitutu, Bakı-1073, H.Cavid prospekti 131***Azərbaycan Texniki Universiteti, Bakı-1143, H.Cavid prospekti 25****Şəki rayon mərkəzi AMEA, küçə L.Abdullayeva 24*

294K temperaturda In_{1-x}Er_xSe (x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007) və In_{1-x}Sm_xSe (x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07) monokristallarında elektrik xassələrinin tərkibdən asılılığı araşdırılmışdır. Monokristalların tərkibində Er və Sm-un miqdarı artdıqca, tarazlıqda olan yükdaşıyıcıların konsentrasiyası artır. Bu da elektrik keçiriciliyinin nəzərə çarpacaq dərəcədə artımına gətirir (3 tərtib).

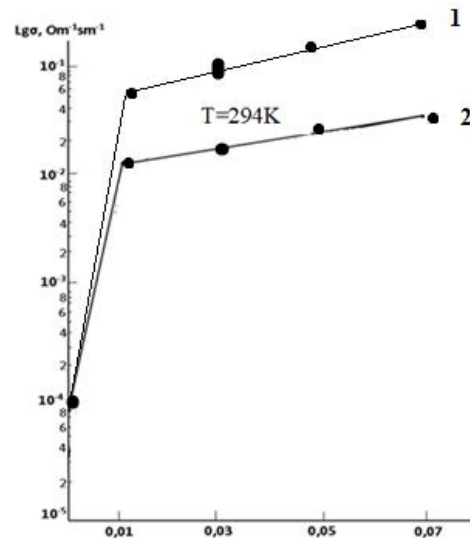
Açar sözlər: koordinasiya ədədi, elektrikkeçiriciliyi, konsentrasiya, nadir torpaq elementləri, laylı kristallar.**PACS:** 71.20.Nr; 72.20.Fr**УДК:** 546.659'23, 546.6599'23. 621.315.592**Giriş**

A³B⁶ tipli yarımkəçiricilərdə kimyəvi birləşmələrin və onların fiziki xassələrinin xüsusiyyəti valent elektronlarının qoşalaşmamış sayına görə yaranır. CaSe (InSe, CaTe) tipli belə natamam valentli birləşmələr adətən laylı və zəncirvari quruluşda kristallaşır. InSe-də metal atomlarının koordinasiya ədədi 4, Se atomlarının koordinasiya ədədi 3-dür. Uyğun olaraq 4 koordinasiyalı In atomu 3 koordinasiyalı Se atomu ilə tetraedrik əlaqə yaradır və 1 In atomu s²p elektronu hesabına sp³ hibridlənilir [1]. Yuxarıda göstərilənlər indium, erbium və samarium monoselenidləri arasındakı kimyəvi əlaqənin təbiətinin oxşar olduğu qənaətinə gəlməyə imkan verir. InSe - ErSe və InSe - SmSe arasında bərk məhlulların əmələ gəlməsinə şərait yaradır [2]. Öz unikal xassələrinə görə bu kristallar rentgen detektorlarının [3,4], nüvə reaktorlarında radioaktiv ölçmə cihazlarının [5] yaradılması üçün əlverişlidir. Bu kristalların ayrı-ayrı fiziki xassələrini və parametrlərini nadir torpaq elementləri (NTE) daxil etməklə idarə etmək mümkündür. Otaq temperaturunda p-InSe monokristalı üçün tarazlıqda olan yükdaşıyıcıların konsentrasiyası $n_0=1,84 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-3}$, yürüklüyü $\mu_0=85 \text{sm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ olmuşdur [6]. InSe-dən fərqli olaraq, In_{1-x}Er_xSe-də x=0,01; 0,03; 0,05; 0,07 tərkiblərində qaranlıqdakı xüsusi müqavimətləri uyğun olaraq $\rho_T \approx 7 \cdot 10^2 \div 2 \cdot 10^3 \text{Om} \cdot \text{sm}$; tarazlıqda olan yükdaşıyıcıların konsentrasiyası $n_0 \approx 10^{14} \div 10^{16} \text{sm}^{-3}$ və yükdaşıyıcıların yürüklüyü $\mu_0 \approx 500 \div 800 \text{sm}^2/\text{V} \cdot \text{san}$ olmuşdur [7]. In_{1-x}Sm_xSe(x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07) üçün isə yükdaşıyıcıların konsentrasiyası $n_0 \approx 7 \cdot 10^{14} \div 8 \cdot 10^{16} \text{sm}^{-3}$, yükdaşıyıcıların yürüklüyü $\mu_0 \approx 117,5 \div 2,52 \text{sm}^2/\text{V} \cdot \text{san}$ olmuşdur [2]. Müəyyən edilmişdir ki, daxil edilən NTE-nin təbiətindən, fiziki-kimyəvi xassələrindən asılı olaraq alınmış birləşmələrin tətbiq imkanları dəyişə bilər. Kristallarda indium atomlarının NTE-nin atomları ilə əvəz edildikdə donor tipli səviyyələrin yüksəlməsinə gətirir ki, bu da n-tip keçiriciliyin yaranmasına şərait yaradır.

Təcrübə və nəticələrin müzakirəsi

Elektrik xassələrini tədqiq etmək üçün In_{1-x}Sm_xSe (x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07) və In_{1-x}Er_xSe

(x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007) bircins kristallar alınmışdır. Bunun üçün In-In 000, Se B-599,99999, Sm M-1 və Er F-3 markalı elementlərdən istifadə edilmişdir. In, Sm, Se və In, Er, Se kimyəvi elementləri stexiometriyaya uyğun olaraq çəkilmiş və havası 10⁻⁴mm.c.süt. qədər sorulmuş kvarts ampulaya doldurulur. In_{1-x}Sm_xSe (x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07) və In_{1-x}Er_xSe (x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007) monokristalları şaquli Bricman üsulu ilə yetişdirilmişdir.

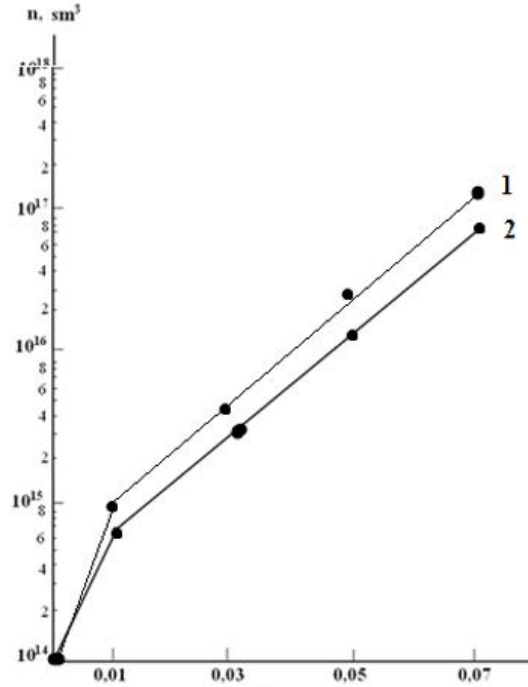


Şəkil 1. T=294K temperaturda In_{1-x}Er_xSe (x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07) (əyri 1) və In_{1-x}Sm_xSe (x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07) (əyri 2) monokristallarının elektrik keçiriciliyinin tərkibdən asılılığı.

Ampulanın sobada hərəkət sürəti 0,3 sm/saat təşkil etmişdir. Alınan ərintilər diferensial termik analiz (DTA), rentgen faza analizi (RFA) metodları ilə tədqiq edilmiş, onların sıxlığı, mikromöhkəmliyi və elektrik xassələri ölçülmüşdür. Analizin nəticələrinə görə müəyyən edilmişdir ki, monokristallar qəfəs parametrləri $a=(4,04 \pm 0,01) \cdot 10^{-4} \text{mkm}$, $c=(16,90 \pm 0,03) \cdot 10^{-4} \text{mkm}$ olan heksaqonal struktura malik alınılıblar. Bu məqsədlə müasir və dəqiq (ДСК-910, ADVNCE-8D, SINTECP-21, ДРОН-4-07) ölçü qurğularından istifadə edilmişdir [9]. In_{1-x}Sm_xSe (x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07) və

$In_{1-x}Er_xSe$ ($x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007$) monokristallarının bərk məhlullarının elektrofiziki xassələrini müəyyən etmək üçün nümunələr hazırlanmışdır. Tədqiq olunan nümunələr ölçüləri $10 \times 4 \times 2 \text{ mm}^3$ olan paralelepiped şəklində olmuşdur. Kontakt materialı olaraq gümüş pastasından istifadə edilmişdir. Kontaktlar nümunələrin əks səthlərinə qarşı-qarşıya yerləşdirilmişdir.

Şəkil 1-də otaq temperaturunda ($T=294\text{K}$) $In_{1-x}Sm_xSe$ ($x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07$) və $In_{1-x}Er_xSe$ ($x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007$) monokristallarının elektrik keçiriciliyinin tərkibdən asılılığı verilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi p-InSe monokristalının elektrik keçiriciliyi tərkibində Sm və Er-nin miqdarı artdıqca $In_{0,99}Sm_{0,01}Se$ və $In_{1-x}Er_xSe$ ($x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007$) monokristalının elektrik keçiriciliyindən 3 tərtib artır. Elektrik keçiriciliyinin tipi $In_{1-x}Sm_xSe$ ($x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07$) və $In_{1-x}Er_xSe$ ($x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007$) kristalları üçün termo e.h.q-nin işarəsinə görə müəyyən edilmişdir.

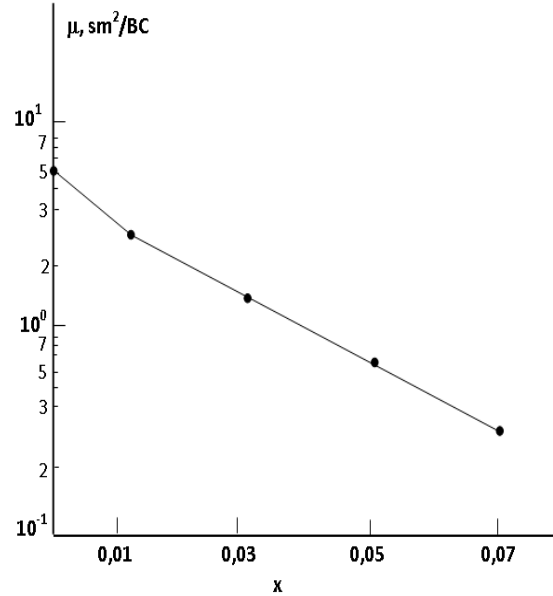


Şəkil 2. $T=294\text{K}$ temperaturunda $In_{1-x}Er_xSe$ ($x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007$) monokristalları (əyri 1) və $In_{1-x}Sm_xSe$ ($x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07$) (əyri 2) monokristallarında yükdaşıyıcıların konsentrasiyalarının tərkibdən asılılığı

Şəkil 2-də otaq temperaturunda $In_{1-x}Er_xSe$ ($x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007$) və $In_{1-x}Sm_xSe$ ($x=0;$

$0,01; 0,03; 0,05; 0,07$) monokristallarında yükdaşıyıcıların konsentrasiyalarının tərkibdən asılılığı göstərilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi, monokristalların tərkibində Er və Sm-un miqdarı artdıqca, yükdaşıyıcıların konsentrasiyası artır. Bu elektrik keçiriciliyinin artmasına səbəb olur.

Şəkil 3-də otaq temperaturunda $In_{1-x}Sm_xSe$ ($x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07$) monokristallarında yükdaşıyıcıların yüürlüklüyünün tərkibdən asılılığı göstərilmişdir. Şəkildən görünür ki, monokristalların tərkibində Sm-un miqdarı artdıqca, yükdaşıyıcıların yüürlüklüyü azalır.



Şəkil 3. $T=294\text{K}$ temperaturunda $In_{1-x}Sm_xSe$ ($x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07$) monokristallarında yüürlüklüyün tərkibdən asılılığı

Beləliklə də $In_{1-x}Er_xSe$ ($x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007$) və $In_{1-x}Sm_xSe$ ($x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07$) monokristallarında 294K temperaturda elektrik xassələrinin tərkibdən asılılığı araşdırılmışdır. InSe-nə Sm və Er daxil edilməsi elektrik keçiriciliyini nəzərə çarpacaq dərəcədə artırır (3 tərtib). Müəyyən edilmişdir ki, $In_{1-x}Sm_xSe$ ($x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07$) və $In_{1-x}Er_xSe$ ($x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007$) monokristallarının tərkibində Sm və Er-mun miqdarı artdıqca, tarazlıqda olan yükdaşıyıcıların konsentrasiyası da artır. Bu da elektrik keçiriciliyinin artmasına səbəb olur.

[1] A.З. Абасова, P.С. Мадатов, В.И. Стафеев. Радиационно стимулированные процессы в халькогенидных структурах. Баку: Элм, 2010, 349 с.
[2] G.I. Isakov, A.A. Ismailov, N.Z. Gasanov, P.G. Ismailova, A.A. Ismailov Electrophysical properties of $In_{1-x}Sm_xSe$ crystals at different doses of γ -irradiation Polish journal of science 2024, № 71, p.43-49.

[3] Г.Д. Гусейнов, Г.И. Искендеров, Э.Ф. Багирзаде, Э.М. Керимова. Воздействие жестких излучений на монокристаллы InSe. Препринт № 3 ИФАН, 1984, с.16.
[4] 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, № 7, с. 805-808.

- [5] A.A. Ismailov, N.Z. Gasanov, A.A. Ismailov, P.H. Ismailova, S.S. Abdinbekov, A.B. Magerramov, X.Sh. Velibekov. Energie Spektrum of Levels In_{1-x}Sm_xSe Crystals. Norwegian journal of development of the International Science. Physical Sciences. 2023, № 103, p.43-46
- [6] A.A. Исмаилов, Ш.Г. Гасымов, Т.С.Мамедов, К.Р. Аллахвердиев. Влияние давления на электропроводность и эффект Холла в монокристаллах селенида индия. ФТП, 1992, т.26, №11, с.1995-1997.
- [7] E.M. Kerimova, N.Z.Gasanov, A.A.Ismaylov. Electrical properties of solid solution In_{1-x}Er_xSe. GESJ:PHYSICS 2019, № 1(21),v.53-59.
- [8] A.A.Ismailov, N.Z.Gasanov, Z.M.Nazrullaeva, A.A.Ismailov. Influence of γ -irradiation on the Elektrophysical of In_{1-x}Sm_xSe. American Journal of sosial and Humanitar Research. Global Rearch, Network, vol.3issue, 5-in may 2022, p.120-122.
- [9] Г.И. Исаков, А.А. Исмаилов, П.Г. Исмаилова, А.А. Исмаилов, С.С. Абдинбеков, Х.Ш. Велибеков, Т.Я. Оруджев. Электрические свойства монокристаллов In_{0,99}Sm_{0,01}Se и In_{0,99}Er_{0,01}Se для солнечных элементов. Международный журнал, Альтернативная энергетика и экологии, 2022, № 6, с.36-43, Саров.

P.H. Ismayilova, A.A. Ismailov, A.A. Ismailov, X.Sh. Velibekov

**ELECTRICAL PROPERTIES OF In_{1-x}Sm_xSe (x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07)
AND In_{1-x}Er_xSe (x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007) CRYSTALS**

In_{1-x}Er_xSe (x=0; 0.0001; 0.0003; 0.0005; 0.0007) and In_{1-x}Sm_xSe (x=0; 0.01; 0.03; 0.05; 0.07) at 294K temperature) the dependence of electrical properties on the composition of single crystals was investigated. As the amount of Er and Sm in single crystals increases, the concentration of charge carriers in equilibrium increases. This leads to a noticeable increase in electrical conductivity (3 designs).

KEÇİD METALI Ni İLƏ AŞQARLANMIŞ TIGaS₂ MONOKRİSTALLARININ OPTİK XASSƏLƏRİ

P.H. İSMAYILOVA, N.Z. HƏSƏNOV, A.Ə. HACIYEVA, M.C. NƏCƏFZADƏ
Azərbaycan Respublikası, Elm və Təhsil Nazirliyi, H.M.Abdullayev adına Fizika İnstitutu,
Bakı: AZ-1073, H.Cavid, 131
e-mail: p.ismayilova@physics.science.az

Keçid metalı Ni ilə aşqarlanmış TIGaS₂ kristallarının sintezi və yetişdirilməsi nəticəsində keyfiyyətli monokristallar alınmışdır. 77–300 K temperatur intervalında monokristallarında optik udma kənarı tədqiq edilmiş və qadağan zonanın eninin temperaturdan asılılığı müəyyən olunmuşdur.

Açar sözlər: xalkogenid, keçid metalı, nikel, optik udma kənarı, qadağan zonanın eni.

PACS: 61.50.Ks, 77.80.Bh.

Müasir dövrdə məlum kristallar arasında laylı quruluşa malik A^mBⁿC₂^v qrupuna daxil olan üçqat yarımkeçirici birləşmələr TlInS₂, TlGaS₂ və TlGaSe₂ mühüm yer tutur. Bu yarımkeçirici birləşmələrin kristal quruluşu [1,2] işlərdə ətraflı öyrənilmişdir. Laylı quruluşa malik kristallar lay daxili güclü kovalent-ion, laylar arası zəif Van-der-Vaals əlaqə növü ilə xarakterizə olunurlar [3]. Lay daxilində atomlar arasındakı məsafə laylar arasındakı məsafədən çox kiçikdir. Lay anion və kationların yerləşdiyi müstəvilərdən ibarətdir. Laylar arasındakı zəif Van-der-Vaals qüvvələri hesabına laylar bir-birinə nisbətən zəif də olsa, yerlərini dəyişirlər. Laylar arasında zəif əlaqə asanlıqla defektlərin yaranmasına imkan verir. Layların birləşməsindəki defektlər, dislokasiyalar, anizotropiyaya səbəb olur. A^mBⁿC₂^v qrupuna aid olan həm yarımkeçirici, həm də seqnetoelektrik xassələrə malik üçqat birləşmə TlGaS₂ qəfəs parametrləri a=10.299 Å, b=10.284 Å, c=15.175 Å, β=99.6° [4,5], fəza qrupu C_{2h}⁶-C₂/c olan monoklin strukturda kristallaşırırlar. Bu qrupa daxil olan kristalların fiziki xassələri kəskin anizotropiyaya malik olurlar. Anizotropiyaya malik yarımkeçiricilər sinfini genişləndirmək, onlarda yeni xassələr yaratmaq məqsədi ilə onların NTE və ya keçid metalları ilə aşqarlanması məqsədyönlü şəkildə aparılır.

Həm yarımkeçirici, həm də seqnetoelektrik xassələrə malik TlGaS₂ nəinki elmi maraq, həmçinin praktiki maraq doğurur. Belə ki, onlar görünən və infraqırmızı oblastda yüksək fəthəssəslığə malik olub günəş elementlərinin, fotocevcilərin, tenzorentgen detektorların və γ-sensorların hazırlanması üçün perspektivli materiallardır. Məlumdur ki, bu birləşmələrə müxtəlif aşqarlar vurmaqla onların fiziki xassələrini dəyişmək olar. Ümumiyyətlə, elementar qəfəsə daxil edilmiş aşqarın növünün seçilməsi onların kimyəvi aktivliyinə, ion radiusunun, koordinasiya ədədinin qiymətinə əsasən edilir. Aşqar və əsas atomun ion radiusları və həmçinin onların elektromənfilikləri arasındakı fərq kiçik olduqda aşqar atomun əsas maddədə həll olması və əsas atomun düyünlərində yerləşməsi ehtimalı daha çoxdur. Qarşımıza qoyduğumuz əsas məsələ kecid metalı nikel ilə 1 mol% aşqarlanmış TlGaS₂ kristallarının sintezi, yetişdirilmə texnologiyasının işlənməsi, alınmış TlGa_{1-x}Ni_xS₂ bərk məhlulun optik xassələrinin tədqiqidir. Tədqiqatımızda TlGaS₂-nin kristal qəfəsinə nikelin

daxil edilməsi zamanı onun ion radiusu r=0,69 Å, [6], elektromənfiliyi 1,9 olması nəzərə alınmışdır. Belə ki, TlGa_{0,99}Ni_{0,01}S₂ Ga-nın ion radiusu r=0,62 Å, [6], elektromənfiliyi isə 1,6 olduğundan Ga→Ni əvəzləməsi mümkündür.

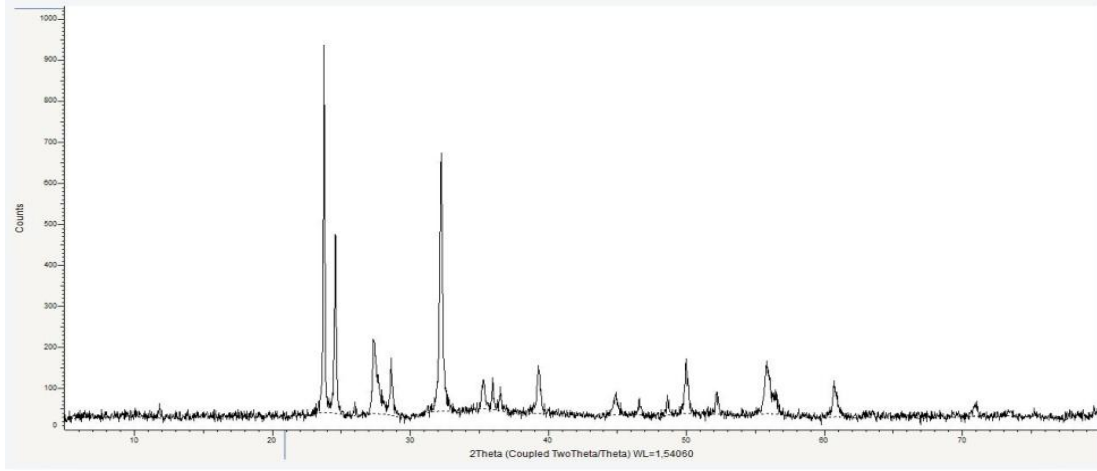
TlGa_{1-x}Ni_xS₂ (x=0,01) bərk məhlulları ilkin elementlərin stexiometrik nisbətində 10⁻³ Pa vakuum yaradılmış kvarts ampulada birbaşa əritmə yolu ilə sintez olunmuşdur. Ampula üfqi vəziyyətdə bir hissəsi sobanın içərisində, digər hissəsi sobadan kənarında qalmaqla yerləşdirilmişdir. Sintez prosesi bir neçə mərhələdə aparılmışdır. Belə ki, 1-ci mərhələdə ampulada uçucu komponent kükürdün olduğunu nəzərə alaraq sobanın temperaturu kükürdün ərimə temperaturuna T=386K-ə qədər tədricən qaldırılır ki, kükürdün buxarlanma sürəti kimyəvi reaksiyanın getmə sürətini aşmasın, əks halda ampula partlaya bilər. Ampulanın sobadan kənarında qalan hissəsinin temperaturu nisbətən aşağı olduğundan kükürd buxarlanaraq ampulanın soyuq divarına yapışır. Kondensə olunduqdan sonra yenidən yüksək temperaturlu zonaya qayıdır ki, bu da daxili təzyiqin doymuş buxarın təzyiqinə qədər qalxmasına mane olur. Ampulanın partlamasının qarşısını alınır. 2-çi mərhələdə sobanın temperaturu birləşmənin (TlGaS₂) ərimə temperaturuna (1165 K) qaldırılır. Ərinti bu temperaturda 15 saat saxlanılır ki, bu da kimyəvi reaksiyanın tam getməsinə xidmət edir. 3-cü mərhələdə nikelin ərimə temperaturunun yüksək olduğunu (1726 R) nəzərə alaraq sobanın temperaturunu 1550 K-ə qədər qaldıraraq bu temperaturda 3-4 gün saxlayaraq ərinti yavaş-yavaş qarışdırılır ki, bu da əriməkdə olan komponentlər arasındakı qarşılıqlı təsirin tam getməsi, onların bir-birinə diffuziyası və kristalın qalıqlarının tam həll olunması üçün vacibdir. Ondan sonra ampula otaq temperaturuna qədər soyudulur. Alınan polikristalların birləşmələri RFA və mikrostruktur analizlə yoxlanılır.

Sintez edilmiş TlGaS₂ <Ni 1mol%> kristalının nümunələri toz halına salınaraq CuK_α mənbəyindən şüalandırılmaqla rentgen difraktoqramı çəkilmişdir. Ölçmələr BRUKER XBD D2-PHASER cihazında aparılmışdır. Difraktoqramın təsnifatı və araşdırılması EVA və Topaz-4.2 proqramları vasitəsilə aparılıb. Difraktoqramın analizi tədqiq olunan maddənin TlGaS₂ birləşməsinin [4]-dəki qəfəs parametrlərinin olduğu kimidir.

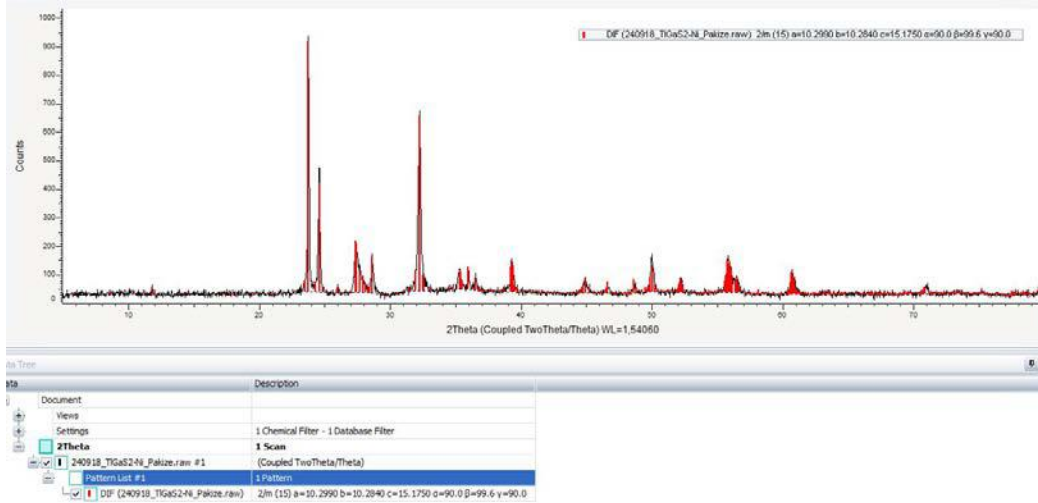
KEÇİD METALI Ni İLƏ ASQARLANMIŞ TlGaS₂ MONOKRİSTALLARININ OPTİK XASSƏLƏRİ

Tədqiqatımızın nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, TlGa_{0,99}Ni_{0,01}S₂ bir fazalıdır, bütün difraksiya əks-olmaları birgilyətli olaraq elementar qəfəs parametrləri [4,5]-də verilmiş monoklin TlGaS₂-yə uyğundur.

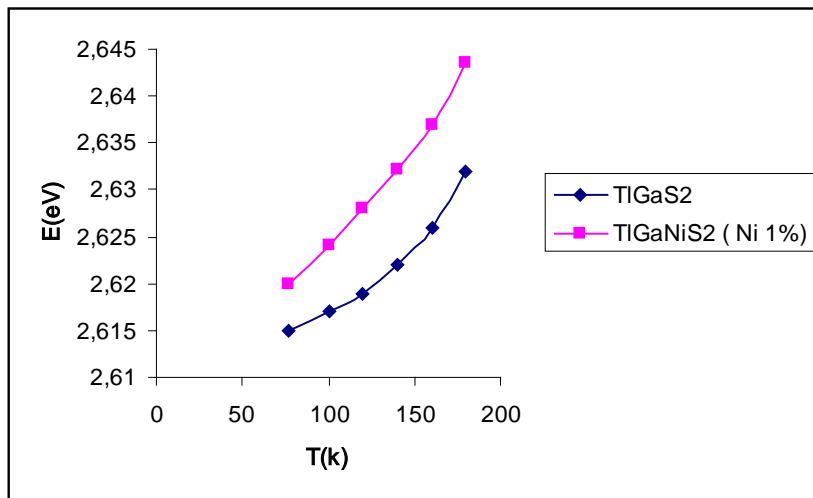
Beləliklə tədqiq etdiyimiz TlGaS₂ <Ni 1mol%> kristalı monoklin fazasına aiddir və TlGaS₂ kristalı ilə izo-strukturludur.



Şəkil 1. TlGaS₂ kristalının difraktoqramması.



Şəkil 2. TlGaS₂<Ni 1mol%> kristalının difraktoqramması.



Şəkil 3. TlGaS₂ və TlGa_{0,99}Ni_{0,01}S₂ monokristallarında eksiton pikinin enerjisinin temperaturdan asılılığı.

Optik ölçmələr üçün $\text{TlGaS}_2<\text{Ni } 1\text{mol}\%$ mono-kristalları Bricmen metodu ilə yetişdirilmişdir [7] Mono-kristal yetişdirmək üçün polikristal xırdalanaraq uzunluğu 15sm olan qalın divarlı, ucu iynəvari olan kvarts ampulaya doldurulur. 10^{-3} Pa qədər vakuumlaşdırılmış kvarts ampula kvarts tutacağı köməyi ilə iki temperaturu peçin 1-ci zonasına yerləşdirilir. Bu zonada peçin temperaturu 1165 ± 30 K (TlGaS_2 –nin ərimə temperaturundan yüksək), qədər tədricən qaldırılır. Ampula bu temperaturda 5-10 saat saxlanılır, vibrasiya edilir ki həll olma prosesi uğurla getsin. Sonra xüsusi mexanizmin köməyi ilə 0,5-1 mm/saat sürətlə 2-ci zonaya buraxılır. Burada temperatur ərimə temperturundan 50 K aşağı olur. Ampulanın iynəvari formada olan ucu nisbətən soyuq zonaya keçən zaman ucda olan kristallaşma mərkəzlərindən biri ampulanın yuxarı hissəsinə doğru böyüyür, yəni kristallaşmanı yuxarıya doğru yüksəldir. Kristallaşma zonasında temperatur qradienti 40 K /saat olmalıdır. Kristallaşma zonasını kecdikdən sonra ampula tablama zonasına daxil olur ki, burada temperatur $T=2/3T_m$ -dir. Tablama prosesi kristalın bərkiməsi zamanı meydana çıxan daxili gərginliyi azaldır. Bu zonada 1-2 gün saxlanılır. Sonra ampula otaq temperaturuna qədər soyudulur. Peçin temperaturunu 10K/saat sürətlə azaltmaqla buna nail olunur.

$\text{TlGaS}_2<\text{Ni } 1\text{mol}\%$ laylı yarımkəçirici kristalların optik udulma spektrini öyrənmək üçün nümunələr mono-kristal külçədən ayrılmış və qalınlıqları 20-80mkm olan nazik lövhələr şəklində hazırlanmışdır. Optik buraxma spektrlərinin tədqiqi əsasında MDR-23 monoxromatoru və 77-300 K intervalda temperaturu

sabit saxlayan UTREKS azot kriostatı olan qurğunun köməyi ilə aparılmışdır. Şua qəbuledicisi kimi FEU-100 cihazından istifadə olunmuşdur. Qurğunun ayırd etmə qabiliyyəti 2 Å-dır.

$\text{TlGaS}_2<\text{Ni } 1\text{mol}\%$ mono-kristalının optik udma kənarı 77-300 K temperatur intervalında tədqiq olunmuşdur. Eksperiment göstərdi ki, temperaturun azalması ilə udulma sərhədi uzundalğalı oblasta doğru sürüşür. 77-200 K temperaturda məxsusi udma sərhədi yaxınlığında düz keçidə məxsus eksiton zolağı müşahidə olunur. Müxtəlif temperaturalarda eksiton pikinin enerjisinin temperatur əmsalı təyin olunmuşdur. 77-200K temperatur intervalında $\text{TlGaS}_2<\text{Ni } 1\text{mol}\%$ -də eksiton pikinin enerjisinin temperatur əmsalı TlGaS_2 –də olduğu kimi müsbət işarəlidir. Şəkil 3-də TlGaS_2 və $\text{TlGa}_{0,99}\text{Ni}_{0,01}\text{S}_2$ mono-kristallarında eksiton pikinin enerjisinin temperaturdan asılılığı verilmişdir.

TlGaS_2 -də Ga ionlarının keçid metalı Ni ilə qismən əvəz olunması nəticəsində eksiton pikinin temperatur qradienti dəyişir, məsələn 77-200 K-də TlGaS_2 üçün $dE/dT=1,6 \cdot 10^{-4}$ eV/K, $\text{TlGa}_{0,99}\text{Ni}_{0,01}\text{S}_2$ üçün isə $dE/dT=2,28 \cdot 10^{-4}$ eV/K, başqa sözlə nəzərə çarpacaq dərəcədə böyükdür. $\text{TlGa}_{0,99}\text{Ni}_{0,01}\text{S}_2$ bərk məhlulunda qadağan zonanın eninin böyüməsi TlGaS_2 -yə nəzərən 5-6 meV təşkil edir, məsələn 77 K-də TlGaS_2 üçün $E^{ek}=2,615$ eV, $\text{TlGa}_{0,99}\text{Ni}_{0,01}\text{S}_2$ üçün isə $E^{ek}=2,620$ eV. Başqa sözlə nəzərə alsaq ki, eksitonun əlaqə enerjisi temperaturdan asılı olaraq çox az dəyişir. Ga→Ni qismən əvəz olunması nəticəsində TlGaS_2 -nin qadağan zonasının eni böyüyür.

-
- [1] *T.I. Isaacs, R.H. Hopins.* Crystal growth, symmetry and physical properties of thallium gallium disulphide, TlGaS_2 . J.Cryst. Growth, 1975, v. 29, p. 121-122.
- [2] *T.I. Isaacs, I.D. Feichtner.* Growth and optical properties of TlGaS_2 and TlInS_2 . J.Sol. State Chem., 1975, v.14, p. 260-263.
- [3] *B. Gürbulak, S. Duman, A. Ateş.* The Urbach tails and optical absorption in layered semiconductor TlGaSe_2 and TlGaS_2 single crystals, Czech. J. Phys. 55 (2005) 93-103, <https://doi.org/10.1134/S1063783412090284>.
- [4] *G.E. Delgado, Mora A.J., Perez F.V. et al.* Crystal structure of the ternary semiconductor compound thallium gallium sulfide, TlGaS_2 . Physica B: Condens. Mater. 2007. Vol. 391., № 2. P.385-388. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2006.10.030>
- [5] *W.Hengel, H.D.Hocheimer, C Carlone. et al.* Phys.Rev.B 1982.V. 26, № 6.P.3211-3221.
- [6] Periodic Table of Elements Sorted by Ionic Radius, <https://environmentalchemistry.com/yogi/periodic/ionicradius.html>
- [7] *Э.М. Керимова.* Кристаллофизика низкоразмерных халькогенидов, Баку, ЕЛМ, 2012, 708с.

P.H. İsmayilova, N.Z. Gasanov, A.A. Hacıyeva. M.C. Najafzade

OPTICAL PROPERTIES OF TlGaS_2 SINGLE CRYSTALS DOPED WITH TRANSITION METAL NI

As a result of the synthesis and growth of TlGaS_2 crystals doped with transition metal Ni, quality single crystals were obtained. The optical absorption edge of single crystals in the temperature range of 77-300 K was studied and the dependence of the forbidden zone width on temperature was determined.

PEROVSKİTƏBƏNZƏR LAYLI $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ BİRLƏŞMƏSİNDƏ YÜKSƏK TƏZYİQLƏRDƏ VİBRASIYA MODALARININ TƏTQIQI

A.G. ASADOV^{1,2}, A.İ. MAMMADOV¹, D.P. KOZLENKO², S.E. KİÇANOV²,
R.Z. MEHDİYEVA¹, E.V. LUKİN², O.N. LİS², R.E. HÜSEYNOV¹,
E.R. HÜSEYNOVA¹, X.İ. ƏHMƏDOV¹

¹ Institute of Physics, Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan,
131, H. Javid ave., Baku, AZ 1073

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

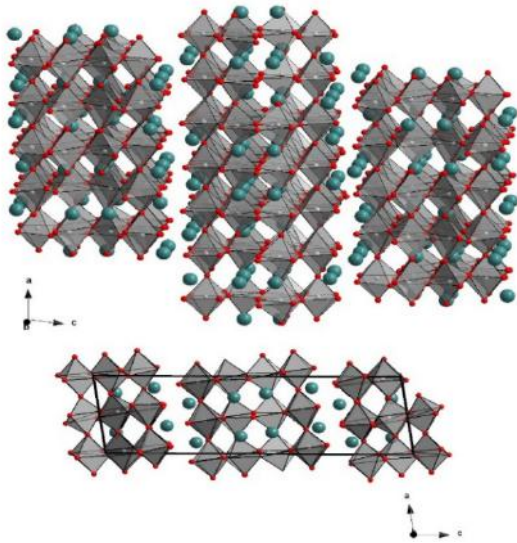
Perovskitəbənzər laylı $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ birləşməsinin vibrasiya spektrlərinə yüksək təzyiğin təsiri Raman spektroskopiyasından istifadə etməklə 30.0 GPa-a qədər təzyiqlərdə tədqiq edilmişdir. P~19.0 GPa-da əsas monoklinik $P2_1(C_2^2)$ fazadan monoklinik $P2(C_2^1)$ struktur faza keçidi müşahidə edilmişdir. TiO_6 oktaedrinin əhəmiyyətli fırlanması üçün təzyiqlik təbiiyyətinin rolu, atomlararası məsafələrin dəyişməsi və Nd atomlarının yerdəyişməsi müzakirə edilmişdir.

Açar sözlər: faza keçidləri, kiçik bucaq altında səpilmə, $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ birləşməsinin kristal strukturu, Raman səpilməsi.

PACs: 81.15.-z; 81.15.Rs; 81.20.Fw; 81.40.Tv; 68.37.Hu; 68.55-

Giriş

Ümumi formulu $A_2B_2O_7$ olan laylı perovskitəbənzər (PL) materiallar piezoelektrik xassələri [1] və müasir texnologiyalarda müxtəlif tətbiqləri sayəsində [2] böyük marağa səbəb olur. Yüksək Kuri (T_C) temperaturları və dielektrik nüfuzluğu (ϵ) onları digər ferroelektrlərdən fərqli edir. Bununla yanaşı, PL birləşmələrində müqavimət ölçmələri aşağı temperaturalarda yüksək anizotrop keçiricilik göstərir [3], bu da bu materialları temperaturla idarə olunan metal-yarımqəçirici keçidləri ilə müşahidə olunan kvazi-bir-ölçülü metallara çevirir [4]. Əlavə olaraq, ətraf mühitin çirkləndiricilərinin parçalanmasında və sudan hidrogenin ayrılmasında fotokatalizator olaraq, fotokatalitik fəaliyyəti artırmaq üçün istifadə edilir. [5-7].



Şəkil 1. $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ birləşməsinin a və c oxu istiqamətləri üzrə kristalloqrafik təsvir sxemi.

B_2O_7 ferroelektriklərinin kristal quruluşu oksigenlə zəngin boşluqlarla ayrılmış struktur təbəqələri əmələ gətirən eyni bucaqlı küncələrdə göstərilən BO_6

oktaedrləri və 12 koordinasiyalı A kationları ilə göstərilir (şəkil 1). Məlumdur ki, PL materiallarında spontan polarizasiya nadir torpaq ionlarının a oxuna perpendikulyar yerdəyişmələri, həmçinin TiO_6 oktaedrlərinin b kristalloqrafik oxu ətrafında fırlanmaları ilə müəyyən edilir [10]. $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin yüksək temperatur tədqiqatlarında ilkin $P2_1(C_2^2)$ -dən ortorombik $Cma2_1(C_2^2)$ fazasına struktur faza keçidinin müşahidə edilməsi göstərilir ki, yeni faza, nadir torpaq ionlarının mövqələrinin bir qədər dəyişməsi, həmçinin TiO_6 oktaedrinin təhrif edilməsi və əyilməsi ilə fərqlənir [11]. Qeyd olunur ki, PL birləşmələrinin kristal strukturunda nadir torpaq ionlarının oktaedral əhatəsi və struktur düzülüşü onların elektrik və dielektrik xassələrində mühüm rol oynayır [12]. Demək olar ki, yüksək təzyiqlərin birbaşa üsul olaraq atomlararası məsafələrin və bucaqların tənzimlənməsi PL birləşmələrinin fiziki xassələrinə təsiri ətraflı öyrənilmişdir. Beləliklə, $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -də ~16.8 GPa təzyiqdə baş verən faza keçidinin izahı verilmiş və monoklinik $P2(C_2^1)$ fazasına izostruktur faza keçidinin baş verməsi göstərilmişdir [11,13]. Yüksək təzyiqlik fazası TiO_6 oktaedrinin əyilməsi və nadir torpaq ionlarının struktur təbəqələrinin yenidən nizalanması hesabına ilkin ferroelektrik fazanın pozulması ilə müəyyən edilir. PL ferroelektrikləri arasında $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ birləşməsində nadir torpaq ionlarının $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ilə müqayisədə daha kiçik ion radiusuna malik olması və bu səbəbdən daha yüksək struktur pozğunluğu ilə xarakterizə olunduğundan, onun ferroelektrik xassələrində daha xüsusi azalmasını gözləmək olar [14]. $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ PL birləşməsinin struktur və vibrasiya xassələrinə yüksək təzyiğin təsiri başa düşmək üçün biz 0-30,0 GPa təzyiqlik diapazonunda Raman spektroskopiyaya üsulundan da istifadə edərək ətraflı tədqiqatlar apardıq.

Experiment

$\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ birləşməsinin nümunələrinin sintezi üçün minerallaşma - polimerləşmə kompleks üsulundan istifadə edilmişdir. İlkin komponentlər kimi tetra-butil 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 ($C_6H_8O_7$) və niobim nitrat ($Nd(NO_3)_3 \times 6H_2O$) istifadə edilmişdir. Qarışıq prekursor məhlulu, artıq sərbəst su buxarlanana və öz-özünə alovlanana qədər qızdırılaraq konsentrə edilmişdir. Kristallığı artırmaq üçün hazırlanmış nümunələri mufel sobasında 3 saat ərzində $1000^\circ C$ -də qızdırılmışdır. İlk rentgen analizi $Nd_2Ti_2O_7$ -nin saf monoklinik PL fazasını göstərir. Bundan əlavə, $Nd_2Ti_2O_7$ birləşməsinin kristal quruluşu neytron difraksiya üsulu ilə tədqiq edilmişdir. Ölçmələr DN-6 difraktometri [16] ilə IBR-2 yüksək axınlı impulsu reaktorda (FLNP JINR, Dubna, Rusiya) aparılmışdır. Əldə edilmiş kristal quruluş parametrləri sıralanmışdır və qəfəs parametrləri $a=7,763(4)\text{Å}$, $b=5,503(2)\text{Å}$, $c=25,962(3)\text{Å}$ və $\beta=98,412(2)^\circ$ son zamanlar tapılanlarla yaxşı uyğunlaşdırılmışdır [17].

Raman spektrləri ətraf mühitin temperaturunda, 1atm- 30,8 GPa-a qədər təzyiqdə He-Ne lazerindən yayılan 633 nm dalğa uzunluqlu ilə Confotec® Duo spektrometrindən (SOL instruments GmbH, Augsburg, Almaniya), 1800 dərəcədən, 10 μm dəlik, diapazon 20cm^{-1} - 1100cm^{-1} və $\times 20$ obyektivdən istifadə edilərək toplanmışdır. Raman spektrlərinin spektral ayırdetmə qabiliyyəti $2,5\text{cm}^{-1}$ - $3,2\text{cm}^{-1}$ -dir.

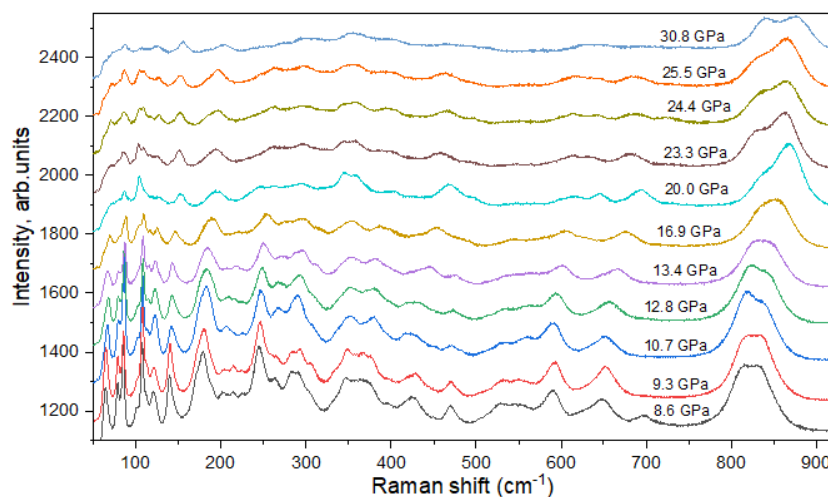
Yüksək təzyiq təcrübələrində Boehler-Almax Plate tipli almaz anvil qəfəsi istifadə edilmişdir. 200 μm -lik kuletləri olan almazlar istifadə edilmişdir.

Nümunə, təxminən 30 μm qalınlığı olan Re gasgetdə hazırlanmış 100 μm diametrli dəliyə yüklənmişdir. Təzyiq metanol-etanol (4:1) qarışıq mühitində yaqut flüoresensiya texnikasından istifadə etməklə ölçülmüşdür [19].

Təzyiq ölçmələrində Almaz Anvil Qəfəsində (DAC) nümunənin yanında təzyiçölçən kimi yaqut çiplərindən istifadə etdik. Mikroskopik müşahidələr zamanı yaqut çipləri DAC-da yaqut çiplərini vizual olaraq təyin etməyə imkan verən gücləndirilmiş parlaqlıq göstərdi. İlk şərtlərdə ($P \approx 1\text{ atm}$, $T =$ ətraf mühitin temperaturu) yaqut kristal üçün əsas Raman rejimi təxminən 694,24 nm-dir. Sonra bu Raman rejiminin dəyişməsini təhlil edərək, Shen et. al. [20] tərəfindən göstərilən tənliklə hesabladıq.

Müzakirə

$Nd_2Ti_2O_7$ birləşməsinin seçilmiş təzyiqlərdə ölçülən Raman spektrləri şəkil 2-də göstərilmişdir. Göründüyü kimi, ətraf mühit şəraitində əldə edilmiş Raman spektrləri ümumiyyətlə $La_2Ti_2O_7$ birləşməsi üçün son zamanlar müşahidə edilən spektrlərinə bənzəyir. $P2_1(C_2^2)$ - in monoklinik kristal quruluşu üçün simmetriya, qrup nəzəriyyəsi 132 Raman-aktiv modasını göstərir [12].



Şəkil 2. Raman spektrləri (a) və $Nd_2Ti_2O_7$ -nin genişləndirilmiş hissələri (b və c) 0,9 GPa-dan 30,8 GPa-a qədər təzyiqdə və otaq temperaturunda. Təcrübə 633 nm He -Ne lazeri ilə 20cm^{-1} - 1100cm^{-1} diapazonda aparılmışdır.

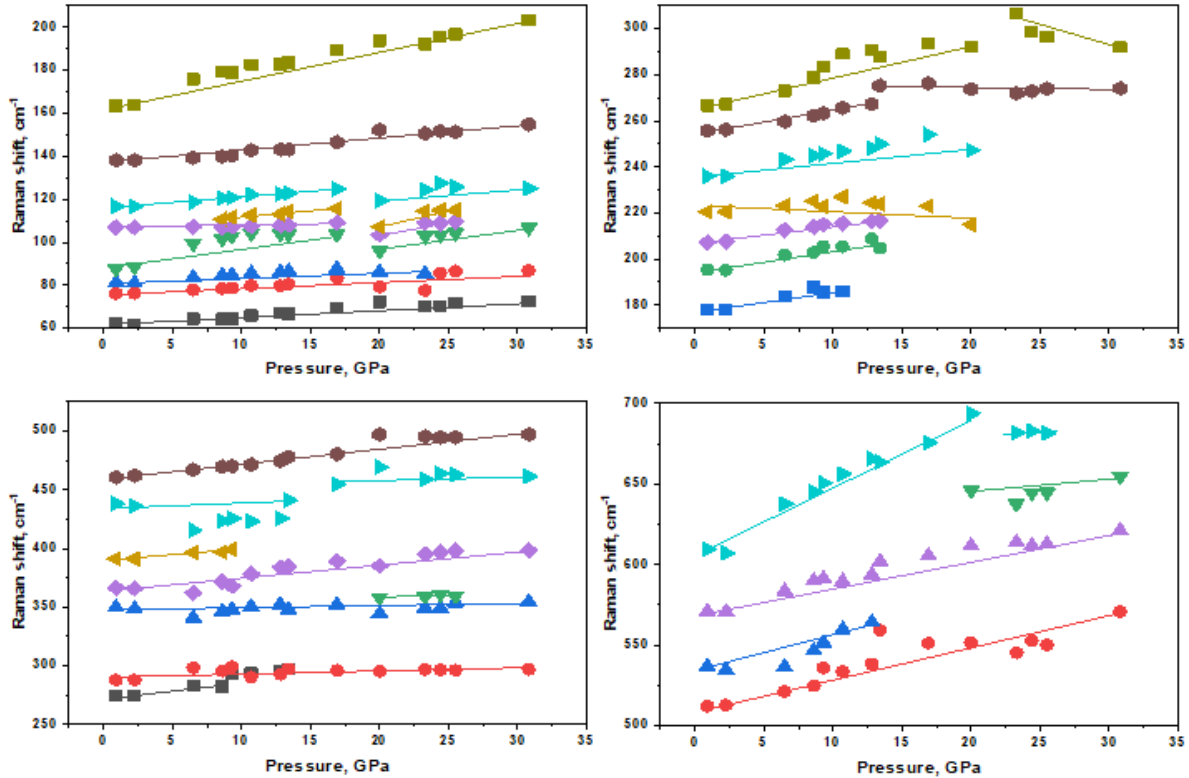
Faza keçidinin baş verdiyi təzyiqdən aşağı təzyiqlərdə $P < 19,2\text{ GPa}$, müşahidə olunan dalğa ədədinin artması baş verir. Vibrasiya modalarının təzyiqdən asılılıqları .şəkil 3-də göstərilmişdir. Bu kontekstdə, $61,9\text{cm}^{-1}$ - $459,7\text{cm}^{-1}$ arasında dalğa ədədi diapazonunu əhatə edən Raman modaları Nd-O qarşılıqlı təsirlərinin qəfəs vibrasiyalarına aid olaraq təyin edilmişdir.

Eynilə, $459,7\text{cm}^{-1}$ - $571,3\text{cm}^{-1}$ arasında olan vibrasiya modaları TiO_6 oktaedr vibrasiyalarına aid edilmiş, dalğa ədədi diapazonu $788,6\text{cm}^{-1}$ - $814,6\text{cm}^{-1}$ arasında olanlar isə TiO_6 vibrasiyalarına aid edilmişdir. Raman vibrasiya modaları tərəfindən müşahidə edilən təzyiqlə bağlı dəyişikliklər tətbiq olunan təzyiq yüksəldikcə artırılmış Raman sürüşmələrinə nəzərəcarpacaq

meyl göstərir. Nd-O atomlarının vibrasiyalarının müxtəlif növlərinə uyğun $196,2\text{cm}^{-1}$, $205,0\text{cm}^{-1}$, $221,0\text{cm}^{-1}$, $255,6\text{cm}^{-1}$, $289,0\text{cm}^{-1}$, $321,0\text{cm}^{-1}$ və $350,9\text{cm}^{-1}$ dalğa uzunluqlarında olan vibrasiya modalarının ya tamam yoxa çıxmasına və ya da modaların intensivliyinin yoxa çıxması və ya fonun itirilməsinə gətirir. Raman vibrasiya modalarında müşahidə edilən zəifləmənin atomların [22], xüsusən də TiO_6 oktaedri ilə əhatə olunmuş Nd_1 , Nd_2 , Nd_7 və Nd_8 kimi qeyd olunanların fəza quruluşuna aid edilə biləcəyi düşünülür. Yüksək təzyiq şəraitində bu oktaedral vahidlərin pozulması baş verir, Bu Nd-O əlaqələrinin uzunluğunun azalmasına gətirib çıxarır və bununla da vibrasiya

yanın yayılmasına mane olur. Bu fərqli modalar, müvafiq ədəbiyyatda göstərildiyi kimi, Nd atomlarının koordinasiya ədədlərindəki dəyişikliklərlə izah oluna bilər [23]. Bu isə $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ birləşməsində güman edilən faza keçidinin davamlı xarakterinin göstəricisi ola bilər [11]. Bəzi əlavə Raman modalarının yer alması aşağı simmetriyalı monoklinik fazaya keçidin göstəricisi ola bilər, bu da rentgen analizlərinin nəticələri ilə təsdiqlənir. Yüksək təzyiqli əmsalları və Qrüneisen parametrləri $162,7 \text{ sm}^{-1}$, $365,0 \text{ sm}^{-1}$, $512,6 \text{ sm}^{-1}$ və $571,3 \text{ sm}^{-1}$ əlaqə modaları mənfidir və onlar qeyri-anizotropik Nd – O əlaqələri və TiO_6 vibrasiyaları deformasiyanı əks

etdirən kifayət qədər fərqli qiymətlərə malikdirlər. Bu kontekstdə, yüksək təzyiqli mühitdə, əvvəlcədən mövcud olan monoklinik struktur konfigurasiyadan yeni bir fazanın əmələ gəlməsi ilə izah edilə bilər. Bu yaranan fazada TiO_6 oktaedrlərinin məruz qaldığı nəzərəçarpaq bucaq təhrifi, Nd_3 , Nd_4 , Nd_5 və Nd_6 atomlarının c oxu istiqaməti boyunca baş verdiyi yerdəyişmə ilə birlikdə Nd-O əlaqəsinin uzanması ilə nəticələnir. Bu nəticəyə uzanma bu əlaqələrlə bağlı enerjini əhəmiyyətli dərəcədə gücləndirir və nəticədə Raman sürüşmələrinin aşağı spektral rejimində nəzərəçarpaq dərəcədə zəifləməsinə səbəb olur.



Şəkil 3. $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin vibrasiya modalarının təzyiqdən asılılıqları və onların xətti interpolyasiyası. Kəsik xətlər struktur faza keçidinə uyğun gələn təzyiqli $P = 19,2 \text{ GPa}$ ifadə edir. Bütün məlumat nöqtələri xüsusi təzyiqdə unikal Raman rejimini təmsil edir və xətti funksiya ilə təchiz edilmişdir.

Kristal quruluşun artan pozğunluğu $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -də ferroelektrik xassələrinin azalmasına səbəb ola bilər. Yüksək təzyiqlərdə təqribən $\sim 800,0 \text{ sm}^{-1}$ -də yerləşən dublet daxilində intensivliyin nəzərəçarpaq dərəcədə yenidən paylanması müşahidə edilir. Bu nəzərə çarpan fenomen, əvvəlki işdə [26] göstərildiyi kimi, təhrif olunmuş TiO_6 oktaedrlərinin simmetriyası ilə edilə bilər. Tədqiqat zamanı aşkar edilmiş Raman spektrlərindəki dəyişikliklərin $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin ilkin aşağı təzyiqli fazasında özünü göstərən struktur qeyri-sabitliyini əks etdirə bilər və bununla da bu birləşmədə ferroelektrikliyinin yaranmasının qarşısını ala bilər [11]. Raman vibrasiyalı modalarının alınma rejimlərinin təyin edilməsində son tədqiqatlar bir neçə əsas modaları müvəffəqiyyətlə müəyyən etmişdir [26-29]. Xüsusilə, RE-O sistemi daxilində S. Jiang et al. [29] $106,6 \text{ sm}^{-1}$ (Nd-O, Eg əyilməsi), $196,2 \text{ sm}^{-1}$ (Nd-O, A1g əyilməsi) tezliklərində mühüm vibrasiya modaları müəyyən etmişlər. Eynilə, Ti-O sistemi üçün bir neçə diqqətə cəlb

edən vibrasiya modaları göstərilir. Bunlara $137,5 \text{ sm}^{-1}$ (O-Ti-O, B1g asimmetrik əyilmə), $236,0 \text{ sm}^{-1}$ (A2u + Eu, Multifonon prosesi), $390,7 \text{ sm}^{-1}$ (Nd-O məsələn, uzanma), $459,7 \text{ sm}^{-1}$ (O-Ti-O, məsələn, asimmetrik əyilmə), $512,6 \text{ sm}^{-1}$ (A1g + B1g), $610,8 \text{ sm}^{-1}$ (A1g, O-Ti-O simmetrik uzanma) və $814,6 \text{ sm}^{-1}$ (B2g, O-TiO asimmetrik uzanma) tezliklərdə modalar daxildir.

Nəticə

Hesablama məlumatları birmənalı şəkildə göstərir ki, ətraf mühit şəraitində kristal quruluşu $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 44 atomdan ibarət vahid hüceyrə malik olan $P2_1 (C_2^2)$ monoklinik fazaya uyğundur. Nəticələrimiz göstərir ki, yüksək təzyiqlərin tətbiqi ($P=19,2 \text{ GPa}$) laylı perovskitəbənzər birləşmə c -də ilkin $P2_1 (C_2^2)$ simmetriyasından $P2 (C_1^2)$ simmetriyası ilə yeni monoklinik fazanın əmələ gəlməsinə səbəb olur. 1 atm-dən $30,8 \text{ GPa}$ -a qədər təzyiqli diapazonunda atomlararası məsafələrin tədricən

qısıldılması $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ vahid hüceyrəsində ikinci də-rəcəli faza keçidinin baş verməsinə səbəb olur. Raman vibrasiya modalarının təhlili göstərir ki, yüksək təzyiq-də baş verən faza keçidi üçün yalnız $P_2 (C_1^2)$ fəza qrupu təxmin edilir. Bundan əlavə, $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -nin təzyiqdən asılı vibrasiya modaları tədqiq edilməsi faza keçidinə dair mühüm anlayışların ortaya çıxmasına səbəb oldu. Müəyyən dalğa diapazonlarını əhatə edən Raman mo-daları Nd-O qarşılıqlı təsirlərinin qəfəs vibrasiyaları, TiO_6 oktaedr vibrasiyaları və Ti-O uzanma vibrasiyala-rı kimi müəyyən edilmişdir. Yüksək təzyiq vibrasiya modalarında dəyişiklikləri ifadə edən Raman sürüşmə-lərinin artmasına səbəb oldu. Xüsusilə, Nd-O atom müxtəlif vibrasiyalarına uyğun gələn müəyyən vibra-siya modaları, ehtimal ki, Nd-O əlaqə uzunluqlarına təsir edən TiO_6 oktaedrdəki pozğunluqlar səbəbindən artan təzyiq altında yox olub və ya intensivliyini itirib.

Əksinə, $P = 20.0$ GPa olduqda müəyyən dalğa ədədlə-rində yeni vibrasiya modalarının yaranmasına, Nd atomlarının koordinasiya ədədlərində dəyişikliklərə və davamlı faza keçidinə işarə edir. Mənfi Grüneisen pa-rametrlərinin görünməsi, yeni modaların formalaşması və piklərin yox olması, TiO_6 oktaedrdə əyilmə və Nd-O əlaqələrinin uzanmasına səbəb olan yeni fazanın əmələ gəlməsi ilə əlaqələndirildi.

Bu struktur qeyri-sabitliyi $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ -də ferro-elektrik vəziyyətin yaranmasının qarşısını ala bilər, bu da kristal strukturunda artan pozğunluq səbəbindən sı-xılmış ferroelektrik vəziyyətlə əlaqəlidir. Faza keçi-dindən əvvəl və sonra sıxılma parametrlərindəki fərqlər c oxu boyunca sıxılmanın a və b oxları ilə müqayisədə daha əhəmiyyətli olduğunu göstərir. $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ üçün he-sablanmış toplu modulu əvvəl və sonra müvafiq olaraq $B_0 = 191,6(3)$ GPa və $B_0 = 202,2(3)$ GPa-dır.

- [1] J. L'opez-P'erez, J. T'niguez, 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. 84 (2011), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.075121>.
- [2] N. Yamamoto, K. Yagi, G. Honjo, M. Kimura, T. Kawamura. New phases of $\text{Sr}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ and $\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ found by Electron microscopy and diffraction, J. Phys. Soc. Jpn. 48 (2013) 185–191, <https://doi.org/10.1143/JPSJ.48.185>.
- [3] W.S. Kim, S.M. Ha, J.K. Yang, H.H. Park. Ferroelectric-Gate Field Effect Transistors Using $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7/\text{Y}_2\text{O}_3/\text{Si}$ Structures 398–399, 2001, pp. 663–667, [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(01\)01333-5](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(01)01333-5).
- [4] Z. Gao, L. Yi, L. Chengjia, M. Yongjun, X. Yuanhua, F. Leiming, H. Qiang, L. Yan, L. Gaomin, Y. Jia, H. Hongliang, H. Duanwei. Origin of the phase change from pyrochlore to perovskite-like layered structure and a new lead-free ferroelectric, Mater. Sci. (2017). <https://arxiv.org/abs/1703.01016>.
- [5] H. Yan, H. Ning, Y. Kan, P. Wang, M.J. Reece. Piezoelectric ceramics with super-high piezoelectric ceramics with super-high curie points, J. Am. Ceram. Soc. 92 (2009) 2270–2275, <https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2009.03209.x>.
- [6] Y. Li, G. Chen, H. Zang, Z. Li, J. Sun. Electronic Structure and Photocatalytic Properties of $\text{ABi}_2\text{Ta}_2\text{O}_9$ (A=Ca, Sr, Ba) 181, 2008, pp. 2653–2659, <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2008.05.020>.
- [7] D.W. Hwang, H.G. Kim, J.S. Lee, J. Kim, W. Li, S.H. Oh. Photocatalytic Hydrogen Production from Water over M-Doped $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ (M = Cr, Fe) under Visible Light Irradiation ($\lambda > 420$ nm) 106, 2004, pp. 2093–2102, <https://doi.org/10.1021/jp0493226>.
- [8] G. Herrera, J. Jim'enez-Mier, 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. 89, 2014, 13–22, <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2013.12.013>.
- [9] N. Ishizawa, K. Ninomiya, T. Sakakura, J. Wang. Redetermination of $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$: a non-centrosymmetric structure with perovskite-type slabs, Acta Crystallogr. 69 (2013) i19, <https://doi.org/10.1107/S1600536813005497>.
- [10] F.X. Zhang, J. Lian, U. Becker, R.C. Ewing, L.M. Wang, Hu Jingzhu, S.K. Saxena. Structural change of layered perovskite $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ at high pressures, J. Solid State Chem. 180 (2007) 571–576, <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2006.11.022>.
- [11] S.J. Patwe, V. Katari, N.P. Salke, S.K. Deshpande, R. Rao, M.K. Gupta, R. Mittal, S. N. Achary, A.K. Tyagi. 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 3, 2015, 4570–4584, <https://doi.org/10.1039/C5TC00242G>.
- [12] A.G. Asadov, D.P. Kozlenko, A. Mammadov, R. Mehdiyeva, S.E. Kichanov, E. V. Lukin, O.N. Lis, A.V. Rutkauskas. A structural phase transition in $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ at high pressure, Phys. B Condens. Matter 655, 2023, 414753, <https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.414753>.
- [13] E. Bruyer, A. Sayede. Density functional calculations of the structural, electronic, and ferroelectric properties of high- k titanate $\text{Re}_2\text{Ti}_2\text{O}_7\text{Re}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ (re=LaRe=La and Nd), J. Appl. Phys. 108, 2010, 053705, <https://doi.org/10.1063/1.3459891>.
- [14] M.M. Milanova, M. Kakihana, M. Arima, M. Yashima, M. Yoshimura. A simple solution route to the synthesis of pure $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ and $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ at 700–800°C by polymerized complex method, J. Alloys Compd. 242, 1996, 6–10, [https://doi.org/10.1016/0925-8388\(96\)02323-7](https://doi.org/10.1016/0925-8388(96)02323-7).
- [15] D. Kozlenko, S. Kichanov, E. Lukin, B. Savenko. The DN-6 neutron diffractometer for high-pressure research at half a Megabar scale, Crystals 8, 2018, 331, <https://doi.org/10.3390/cryst8080331>.

- [16] K. Scheunemann, Hk. Müller-Buschbaum. Zur Kristallstruktur von Nd₂Ti₂O₇, J. Inorg. Nucl. Chem. 37, 1975, 2261–2263, [https://doi.org/10.1016/0022-1902\(75\)80723-8](https://doi.org/10.1016/0022-1902(75)80723-8).
- [17] J. Rodriguez-Carvajal. Recent advances in magnetic structure determination by neutron powder diffraction, Physica B 192, 1993, 55, [https://doi.org/10.1016/0921-4526\(93\)90108-I](https://doi.org/10.1016/0921-4526(93)90108-I).
- [18] J.C. Chervin, B. Canny, M. Mancinelli. Ruby-spheres as pressure gauge for optically transparent high pressure cells, High Pressure Res. 21, 2006, 305–314, <https://doi.org/10.1080/08957950108202589>.
- [19] N.O. Golosova, D.P. Kozlenko, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, A.V. Rutkauskas, K. V. Glazyrin, B.N. Savenko. Magnetic and structural properties of Fe-doped layered cobaltite TbBaCo_{1.9}Fe_{0.09}O_{5.5} at high pressures, J. Magn. Mater. 494, 2020, <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.165801>, 165801.
- [20] G. Shen, Y. Wang, A. Dewaele, C. Wu, D.E. Fratanduono, J. Eggert, S. Klotz, K. F. Dziubek, P. Loubeyre, O.V. Fatyanov, P.D. Asimow, T. Mashimo, R.M.M. Wentzcovitch. Toward an International Practical Pressure Scale: A Proposal for an IPPS Ruby Gauge (IPPS-Ruby2020) 40, 2020, pp. 299–314, <https://doi.org/10.1080/08957959.2020.1791107>.
- [21] R. Jeanloz. Universal equation of state, Phys. Rev. B 38, 1988, 805, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.805>.
- [22] A. Segura, R. Cuscó, T. Taniguchi, K. Watanabe, G. Cassabois, B. Gil, L. Artús, High-pressure softening of the out-of-plane A_{2u}(transverse-optic) mode of hexagonal boron nitride induced by dynamical buckling, J. Phys. Chem. C 123, 2019, 17491–17497, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b04582>.
- [23] H. Man, A. Ghasemi, M. Adnani, M.A. Siegler, E. Anber, Y. Li, C.L. Chien, M. Taheri, C.W. Chu, C.L. Broholm, S.M. Koochpayeh. Quantum paramagnetism in a non-Kramers rare-earth oxide: monoclinic Pr₂Ti₂O₇, Mater. Sci., 2022, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2211.06758>.
- [24] N.A. Abdullaev. Grüneisen parameters for layered crystals, Phys. Solid State 43, 2001, 727–731, <https://doi.org/10.1134/1.1366002>.
- [25] P.S. Peercy, B. Morosin. Pressure and temperature dependences of the Raman-active phonons in SnO₂, Phys. Rev. B 7, 1973, 2779, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.7.2779>.
- [26] F.X. Zhang, M. Lang, J.M. Zhang, Z.Q. Cheng, Z.X. Liu, J. Lian, R.C. Ewing. Phase transition and abnormal compressibility of lanthanide silicate with the apatite structure, Phys. Rev. B 85, 2012, 214116, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.214116>.
- [27] I. Lukačević, S.K. Gupta, P.K. Jha, D. Kirin. Lattice dynamics and Raman spectrum of rutile TiO₂: the role of soft phonon modes in pressure induced phase transition, Mater. Chem. Phys. 137, 2012, 282–289, <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2012.09.022>.
- [28] Y. Zhang, C.X. Harris, P. Wallenmeyer, J. Murowchick, X. Chen. Asymmetric lattice vibration characteristics of rutile TiO₂ as revealed by laser power dependent Raman, Spectroscopy 117, 2013, 24015–24022, <https://doi.org/10.1021/jp406948e>.
- [29] S. Jiang, J. Liu, L. Bai, X. Li, Y. Li, S. He, S. Yan, D. Liang, Anomalous Compression Behaviour in Nd₂O₃ Studied by X-ray Diffraction and Raman Spectroscopy 8, 2018, <https://doi.org/10.1063/1.5018020>, 025019.

A.G. Asadov, A.İ. Mammadov, D.P. Kozlenko, S.E. Kiçanov,
R.Z. Mehdiyeva, E.V. Lukin, O.N. Lis, R.E. Huseynov, E.R. Huseynova

STUDY OF VIBRATION MODES AT HIGH PRESSURES IN LAYERED PEROVSKITE-LIKE Nd₂Ti₂O₇

The vibrational properties of a layered Nd₂Ti₂O₇ have been studied by means Raman spectroscopy at pressures up to 30 GPa. The gradual structural phase transition from the initial monoclinic $P2_1$ (C_2^2) phase to the monoclinic $P2$ (C_1^2) phase was observed at $P \sim 19$ GPa. The role of pressure application as a trigger for a significant rotation of the TiO₆ octahedra, alterations in interatomic distances, and the displacement of Nd atoms were discussed.

As-Se, As-Se-S, As-Se-Te XALKOGENİD ŞÜŞƏVARI SİSTEMLƏRİNDƏ OPTİK UDULMANIN TƏDQIQI

S.İ. MEHDİYEVA¹, A.İ. İSAYEV¹, A.Z. ABASOVA^{1,2}, R.İ. ƏLƏKBƏROV¹

1. Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu

2. Bakı Dövlət Universiteti

E-mail: rahim-14@mail.ru

Optik udulma spektrlərinin tədqiqi nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, $As_{40}Se_{60}$ - tərkibində selenin tellurla (Te) əvəzlənməsi qadağan zona eninin kəskin azalmasına səbəb olur ki, bu da σ^* -orbitalları və Te-Te, Se-Te rabitələrinin LP-orbitallarının selenin (Se) yüklük aralığına düşərək zona kənarında əlavə enerji halları yaratması ilə bağlıdır. Selenin (Se) kükdürlə (S) əvəzlənməsi isə yüksək enerjili rabitələrin (Se-S) yaranmasına gətirir ki, bu da qadağan zona eninin (E_g) artması ilə nəticələnir. Stexiometriyadan kənara çıxdıqda qalığı xalkogen atomlarının konsentrasiyasının artması nəticəsində Urbax enerjisinin qiymətinin artması quruluşun nizamsızlıq dərəcəsinin artması ilə izah olunur.

Açar sözlər: xalkogenid şüşə, amorf, Urbax enerjisi

Pacs: 81.05. Gc

1. GİRİŞ

Spektrin infraqırmızı oblastında yüksək şəffaflığa və qeyri-xətti optik xüsusiyyətlərə malik olan xalkogenid şüşəvari yarımkeçiricilər infraqırmızı fotonun perspektivli materialları hesab olunur [1]. Son illər müxtəlif xalkogenid şüşələrdə optik qeyri-xəttiliyin tədqiq olunması yuxarıda söylənilən fikirləri birmənalı sübut edir [2]. Tədqiqatlar [3] göstərir ki, $As-Se$, As_2Se_3 , As_2S_3 , As_2Te_3 binar xalkogenidlər ilə, müqayisədə zəif fonon qarşılıqlı təsir enerjisinə, yüksək kimyəvi davamlılığa malik mürəkkəb komponentli $As-S-Se$ və $As-Se-Te$ şüşəvari maddələrin spektrin yaxın infraqırmızı oblastında yüksək şəffaflığa və geniş intervalda dəyişən optik sındırma əmsalına malik olması onların lifli optika üçün tətbiq perspektivlərini artırır [4]. Xalkogenid şüşələr əsasən gecə görmə cihazlarında, istilik müşahidə kameralarında, gücləndiricilərdə, kimyəvi sensorlarda uğurlu alternativ tətbiq imkanlarına malikdir [5]. Tədqiqatlar göstərir ki, tərkibində selen (Se) və tellur (Te) olan şüşələr spektrin görünən oblastında tamamilə qeyri-şəffafdır. Yəni matrisaya daha massiv xalkogen elementlər əlavə edib fonon rəqslərini modifikasiya edərək şəffaflıq diapazonunu spektrin uzun dalğalar oblastına doğru genişləndirmək olar. Lakin şəffaflıq pəncərəsinin və ya oblastının spektrin qısa dalğalar oblastına doğru genişləndirilməsi qadağan zona eninin (E_g) dəyişməsi ilə, bağlı olduğundan mürəkkəb problem hesab olunur. Bu baxımdan şüşələrin optik və mikrostruktur xassələri arasındakı əlaqələrin fiziki mexanizmləri geniş təsvir edilməmişdir [6].

Məqalənin məqsədi $As-Se-S$, $As-Se-Te$ xalkogenid şüşəvari sistemlərində kimyəvi tərkib stexiometriyasından kənaraçıxmaların optik qadağan zonasına və Urbax enerjisinə təsir mexanizmlərini araşdırmaqdır.

2. TƏCRÜBƏNİN METODİKASI VƏ NÜMUNƏLƏRİN ALINMASI

$As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$,
 $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$, $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$ xalkogenid şüşəvari

tərkibləri fırlanan soba üsulu ilə $950^{\circ}C$ -dən yuxarı temperaturda sintez edilmişdir. Optik tədqiqatların aparılması üçün şüşə altlıqlar üzərində vakuumda termik buxarlandırma üsulu ilə $d=2mk$ qalınlıqlı nazik təbəqələr alınmışdır. Nazik təbəqələrin alınması zamanı maddənin buxarlandırılma sürəti ~ 0.6 nm/s olmuşdur. İşdə dalğa uzunluğunun $\lambda=190 \div 1100$ nm intervalında optik tədqiqatlar aparmağa imkan verən spekol-1500 markalı spektrofotometri istifadə olunmuş və təcrübələr otaq temperaturunda yerinə yetirilmişdir. Optik buraxma spektrlərinin nəticələri WINASPEKT paket proqram təminatından istifadə olunaraq avtomatik rejimdə kompüterə verilmişdir.

3. NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil 1a-da izostatik və qismən elastik şüşə hallarına uyğun $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$ və $As_{33,3}Se_{33,3}S_{33,4}$, $As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$ xalkogenid şüşələrin optik udulma spektrləri təsvir olunmuşdur. Mövcud tədqiqatlar göstərir ki, XŞY-lərdə optik udulma əmsalının (α) fotonun enerjisindən asılılığı üç əsas oblastdan ibarətdir [7]. Fotonun enerjisinin kiçik qiymətlərində zəif udulma oblastı (qeyd olunan halda udulma əmsalı $\alpha < 1$ şərtini ödəyərək fotonun enerjisindən zəif asılı olur), Urbax qanununa tabe olan eksponensial udulma oblastı ($\alpha \sim 1 \div 10^3 cm^{-1}$) [8] və fotonun enerjisinin nisbətən yüksək qiymətləri (bu halda fotonun enerjisi ($h\nu$) optik qadağan zonanın enindən (E_g) böyük olub $h\nu > E_g$ şərtini ödəyir) oblastını əhatə edən üstlü asılılıq oblastı.

Üstlü asılılıq oblastı (şəkil.1b) Taus qanununa tabe olub, aşağıdakı düsturla ifadə olunur.

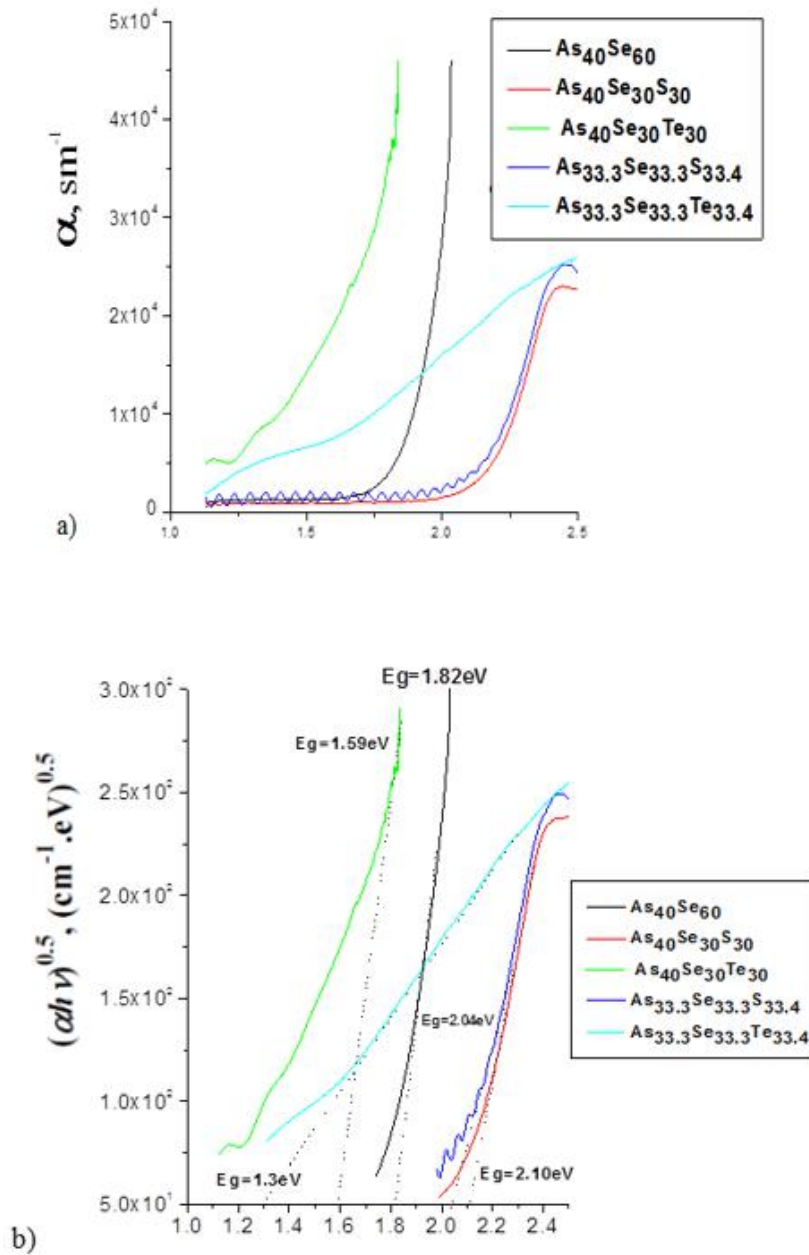
$$\alpha \cdot h\nu = B(h\nu - E_g)^n \quad (1)$$

Burada, E_g - qadağan zonanın optik eni, B-üstlü asılılığın meylinə uyğun əmsal, ν - maddənin üzərinə düşən şüalanmanın tezliyi, h - Plank sabitidir. Taus qanununa tabe olan (1)-asılılığının qüvvət üstü (n) amorf seləndə ($a-Se$) $n=1$ olsa da, tədqiq olunan tərkiblərdə və

o cümlədən əksər xalkogenid şüşəvari materiallarda (As_2Se_3 , As_2S_3 və s.) $n=2$ olub, çəp optik keçidlərin varlığı ilə əlaqələndirilir [8]. Taus qanununa tabe olan oblastdan udulma spektrlərinin qrafiklərini (şəkil 1b) $(ah\nu)^{1/2} \sim f(h\nu)$ asılılığı şəklində qurub onların absis oxu ilə kəsişməsinə ekstrapolyasiya edərək E_g -nin və qrafikin meyindən B-nin qiymətləri təyin olunaraq nəticələr cədvəl 1-də göstərilmişdir. Cədvəl 1-də təsvir olunan parametrlər XŞY materialların atom və elektron konfigurasiyaları haqqında informasiya əldə etməyə imkan verir. Cədvəl 1-də həmçinin [9]-in müəllifləri tərəfindən mürəkkəb komponentli şüşələr ($A_xB_yC_z$) üçün təklif olunan aşağıdakı münasibətə əsasən qadağan zonanın optik eninin (E_g) hesablanmış qiymətləri də təsvir olunmuşdur.

$$E_g^r = xE_g(A) + yE_g(B) + zE_g(C) \quad (2)$$

Burada x , y və z - tədqiq olunan tərkiblərə daxil olan elementlərin həcmi payı, $E_g(A)$, $E_g(B)$ və $E_g(C)$ isə uyğun olaraq A, B, C tərkib elementlərinin qadağan zonalarının enidir (E_g). Bu işlərin aparılması zamanı həcmi paydan atom faizə keçid atomar kütlə və sıxlığın qiymətləri nəzərə alınaraq edilmiş və tədqiq olunan tərkiblərə daxil olan ayrı-ayrı komponentlər üçün optik qadağan zona eninin (E_g) ədədi qiymətləri cədvəl.1-də təsvir olunmuşdur. Nəticədə müəyyən olunmuşdur ki, bu maddələrin qadağan zonasında baş verən dəyişmələrin XŞY materiallar üçün [10] əsərinin müəllifləri tərəfindən təklif olunan model çərçivəsində şərh olunması mümkündür.



Şəkil 1. $As_{40}Se_{60}$, $As_{40}Se_{30}S_{30}$, $As_{40}Se_{30}Te_{30}$, $As_{33.3}Se_{33.3}S_{33.4}$, $As_{33.3}Se_{33.3}Te_{33.4}$ xalkogenid şüşələrin optik udulma (a) və Taus qanununa uyğun udulma (b) spektrləri.

Maddələrin təcrübi, empirik təyin olunan qadağan zonaları və kohesiv enerjiləri

Tərkiblər	$E_{g(\text{təcrübi})}$ [eV]	$E_{g(\text{empirik})}$ [eV]	E_g , [eV]	$B^{1/2}$, $\text{cm}^{-1/2} \text{eV}^{-1/2}$	Kohesiv enerji (KE) , [kcal/mol]
$\text{As}_{40}\text{Se}_{60}$	1.82	1.79	1.2(As)	1266	41.2
$\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{Te}_{30}$	1.59	1.274	1.99(Se)	904	36.95
$\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{S}_{30}$	2.1	1.955	0.9(Te)	663	43.15
$\text{As}_{33,3}\text{Se}_{33,3}\text{S}_{33,4}$	2.04	1.8612	2.6(S)	540,6	39.95
$\text{As}_{33,3}\text{Se}_{33,3}\text{Te}_{33,4}$	1.3	1.25907		181	34.19

Bu modelə görə xalkogen atomlarının (S,Se,Te) və ya onların arsenium (As) atomları ilə kimyəvi əlaqələri rabitəli (σ -molekulyar orbital), antirabitəli (σ^* – orbital) və təklənmiş elektron cütləri orbitalları (LP-orbital) ilə yaranır. Bərk cisimlərdə bu orbitallar zolağa çevrilir. Hesab olunur ki, LP – halları valent zonasının yuxarı (E_V), σ^* -halları isə keçirici zonanın aşağı (E_C) hissəsini yaradır ki, həmin hissələr arasındakı energetik məsafə də qadağan zonanın eninə uyğun gəlir. Cədvəl 1-dən görüldüyü kimi, $\text{As}_{40}\text{Se}_{60}$ tərkibində Se-nin S-lə əvəz olunması nəticəsində optik qadağan zonasının eni (E_g) artır. Doğrudanda, $\text{As}_{40}\text{Se}_{60}$ - tərkibində mövcud olan selenin (Se) yarısı kükürlə (S) əvəzləndikdə yüksək enerjili rabitələr, tellurla (Te) əvəzləndikdə isə aşağı enerjili rabitələr yaranır (cədvəl 2). Tellur (Te) tərkibli nümunələrdə qadağan zonanın eninin kəskin azalması σ^* -orbitalları və Te-Te, Se-Te rabitələrinin LP-orbitallarının selenin (Se) yüklük aralığına düşərək əlavə (quyruq) zona kənarı hallarının artmasına səbəb olması ilə izah olunur [7]. Digər tərəfdən cədvəl.1 və cədvəl 2-dən görüldüyü kimi, tədqiq olunan tərkiblərin kohesiv enerjisi (KE) və qadağan zona enləri (E_g) arasında korelyasiya mövcuddur. Yəni Se-nin S-lə qismən əvəzlənməsi sözü gedən fiziki kəmiyyətlərin birgə artmasına, Te-la əvəzlənməsi isə onların anoloji olaraq azalmasına səbəb olur. Tədqiq olunan maddələrdə üstlü asılılıq oblastını xarakterizə edən (1) düsturunda B-parametri nazik təbəqələrin materialından asılı olub Taus qaydasına uyğun olan udulma kənarının meylliliyini xarakterizə edir. B-parametri müxtəlif müəlliflər tərəfindən QKM-lərin nizamsızlıq dərəcəsinin ölçüsü kimi, qəbul olunur [11]. Mürəkkəb komponentli $\text{Sb}_{20}\text{Se}_{80-x}\text{G}_{ex}$ ($x = 10, 15, 20$ və 25) xalkogenid şüşələrdə aparılan optik və quruluş tədqiqatları [12] göstərir ki, B və Urbax enerjisi (U) parametrləri genişlənmiş və Urbax oblastında maddənin atom və elektron konfigurasiyaları haqqında məlumat əldə etməyə imkan verir. Atomik konfigurasiyada xaotikliyin artması nəticəsində B-nin azalması verir. Stexiometrik olan XŞY-tərkiblərdə (cədvəl.1, $\text{As}_{40}\text{Se}_{60}$, $\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{S}_{30}$, $\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{Te}_{30}$) B-parametrinin ədədi qiymətinin yüksək olması onlara məxsus amorf matrisanın təkmil olduğunu göstərir. Lakin xalkogenlə zəngin olan tərkiblərdə (cədvəl.1, $\text{As}_{33,3}\text{Se}_{33,3}\text{S}_{33,4}$, $\text{As}_{33,3}\text{Se}_{33,3}\text{Te}_{33,4}$) B-nin ədədi qiymətinin aşağı olması atomların yerləşməsindəki nizamsızlıq dərəcəsinin yüksək olduğunu sübut edir. Doğrudan da, qeyd olunan tərkiblərdə Raman səpilməsi tədqiqatları

[13] göstərir ki, xalkogen atomları arasında homopol-yar rabitələrin (Se-Se, Te-Te) nisbi payının nəzərə çarpacaq səviyyədə böyük olması icazəli zonalər ətrafında lokal halların sıxlığını artırır [7]. Udulma spektrlərinin Urbax qaydasına uyğun olan oblastı $\ln\alpha \sim f(h\nu)$ asılılığı şəklində müxtəlif temperaturalarda qurularaq şəkil.2-də təsvir olunmuşdur. Burada udulma əmsalı(α) düşən fotonun enerjisindən eksponensial asılı olub aşağıdakı kimi, ifadə olunur:

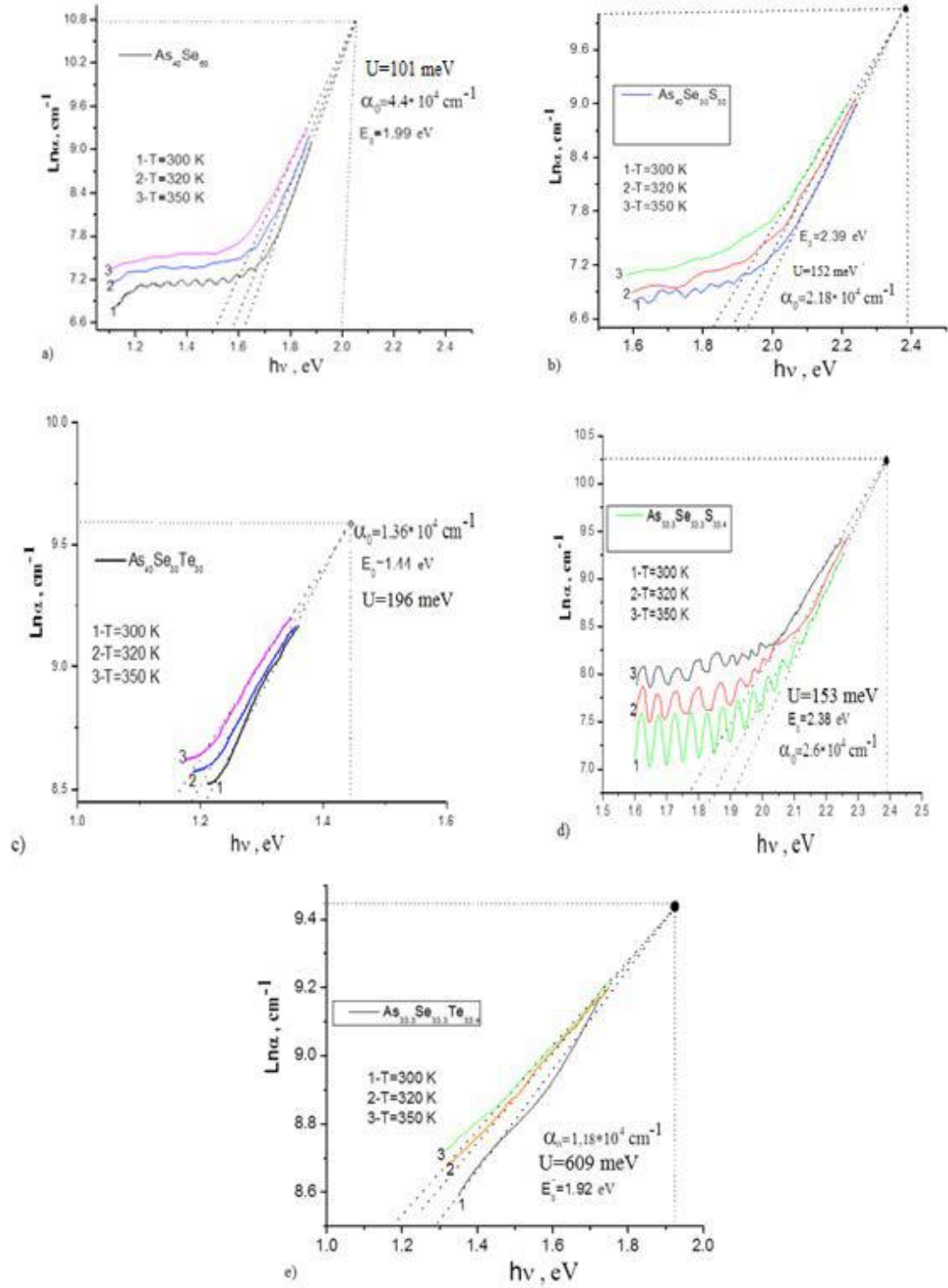
$$\alpha = \alpha_0 \exp \left[\frac{\sigma(h\nu - E_0)}{kT} \right] = \alpha_0 \exp \frac{h\nu - E_0}{U} \quad (3)$$

3-düsturuna əsasən $U = \sigma/kT$ -şəklində təyin olunan Urbax enerjisinin tərs qiyməti (U^{-1})

$$U^{-1} = \frac{\Delta(\ln\alpha)}{\Delta(h\nu)} \quad (4)$$

şəklində təyin olunur, σ -udulma kənarının dikliyi parametridir. Maddələrin müxtəlif temperaturalarda ayrı-ayrı Urbax asılılıqlarının kəsişmə nöqtəsinin koordinatları (α_0 və E_0) təyin olunaraq qiymətləri cədvəl.2-də təsvir olunmuşdur. Cədvəl.2-də təsvir olunan parametrlər XŞY materialların atom və elektron konfigurasiyaları haqqında dolğun informasiya əldə etməyə imkan verir. Qeyd edək ki, udma kənarı yaxınlığında Urbax qaydasını (3) ifadə edən udulma əmsalı (α) əksər xalkogenid şüşələrdə müşahidə olunmuşdur. Urbax qaydasının ödənilməsi halda udulma əmsalının (α) fotonun enerjisindən eksponensial asılılığının təbiətini müəyyənləşdirmək üçün [14] müxtəlif mülahizələr mövcuddur. Müxtəlif məqalələrin [7, 14, 15] müəllifləri ion və kovalent rabitəyə malik materiallarda eksponensial asılılığa malik optik udulma kənarını amorf maddəyə xas quruluş nizamsızlığının nəticəsində meydana gələn daxili sahənin xaotik fluktuasiyaları ilə əlaqələndirirlər. İşdə [15] nəzəri hesablamaların aparılması üçün qeyri-bircins mikrosahənin paylanması bircins mikrosahənin statistik paylanması ilə, əvəz olunur.

Göstərilmişdir ki, müxtəlif materiallarda zona kənarlarının temperatur asılılığı keyfiyyətə mikro sahə mənbəyinin təbiətindən asılıdır [15]. Urbax udulma kənarı digər tədqiqatçılar tərəfindən [16] icazəli zonaların sərhədində yerləşən və hal sıxlığı enerjiden eksponensial asılı olan lokal hallar arasındakı elektron keçidləri ilə izah olunur.



Şəkil 2. As_2Se_3 (a), $\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{S}_{30}$ (b), $\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{Te}_{30}$ (c), $\text{As}_{33.3}\text{Se}_{33.3}\text{S}_{33.4}$ (d) $\text{As}_{33.3}\text{Se}_{33.3}\text{Te}_{33.4}$ (e) xalkogenid şüşələrin müxtəlif temperaturlarda Urbax udulma oblastına uyğun spektral asılıqları

Cədvəl 2

Urbax enerjisi (U), asılılıqlarının kəsişmə nöqtəsinə uyğun koordinatları (α_0 və E_0) və rabitə enerjiləri

Tərkiblər	U , meV	α_0 , cm^{-1}	E_0 , eV	Rabitə enerjisi, [kcal/mol]	Rabitə enerjisi, [kcal/mol]
$\text{As}_{40}\text{Se}_{60}$	101	$4.4 \cdot 10^4$	1.99	As-S (45.18)	Se-Te (40.8)
$\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{Te}_{30}$	196	$1.36 \cdot 10^4$	1.44	As-Se (41.2)	Se-Se (44)
$\text{As}_{40}\text{Se}_{30}\text{S}_{30}$	152	$2.18 \cdot 10^4$	2.39	As-Te (32.7)	Te-Te (33)
$\text{As}_{33.3}\text{Se}_{33.3}\text{S}_{33.4}$	153	$2.6 \cdot 10^4$	2.38	Te-S (47.25)	S-S (50.9)
$\text{As}_{33.3}\text{Se}_{33.3}\text{Te}_{33.4}$	609	$1,18 \cdot 10^4$	1.92	Se-S (47.47)	As-As (32.1)

Temperaturun və fotohəyəcənlanmanın Urbax kənarına təsirini öyrənən [17]-in müəllifi göstərmişdir ki, Urbax udulma kənarının əmələ gəlməsi fotoquruluş çevrilmələrindən əhəmiyyətli dərəcədə asılı olan güclü elektron-fonon qarşılıqlı təsiri ilə əlaqədardır. Digər tərəfdən müəyyən olunmuşdur ki, Urbax kənarının formalaşmasında Ge-Se(S) və As-Se(S) əlaqələri ilə bağlı olan fononlar əsas rol oynayır [17].

Mott və Devis [18] əksər kristal və qeyri-kristal materiallar üçün udma kənarının eksponensial gedişinə məxsus olan meyilliliyin dəyişməz olduğuna əsaslanaraq zonaların sərhədindəki lokal hallar arasındakı elektron keçidlərinin Urbax udulma kənarının yaranmasında rolunu inkar etmişlər. Mottun tədqiqatlarında [18] göstərilir ki, As_2Se_3 və As_2S_3 -də eksponensial udulma kənarı meyilliyini xarakterizə edən Γ -parametrinin qiymətləri 20 eV^{-1} və $18,6 \text{ eV}^{-1}$ olub onların hazırlanma şəraitindən asılı deyildir. Apardığımız tədqiqatlar göstərir ki, Urbax enerjisinin (U) (3)-düsturunda qiyməti tədqiq olunan XŞY maddələrin kimyəvi tərkibindən asılı olaraq əhəmiyyətli dərəcədə dəyişməyə məruz qalır. Bu nəticələr onu deməyə imkan verir ki, tərkibdən asılı olaraq U-nun dəyişməyə məruz qalması icazəli zonalar kənarında olan lokal hallara uyğun zolağın eni ilə bağlı olub maddənin nizamsızlıq dərəcəsini əks etdirir. Hesab olunur ki, Urbax oblastında udulma bir

icazəli zonanın halları ilə digər zonanın eksponensial kənarının (quyruq) lokal halları arasındakı elektron keçidləri ilə əlaqədardır. Cədvəl 2-dən görüldüyü kimi, tərkibində tellur (Te) olan XŞY maddələr üçün Urbax enerjisinin qiyməti daha yüksəkdir. Tellurla zəngin olan həmin nümunələr ($As_{33,3}Se_{33,3}Te_{33,4}$) üçün σ^* -orbitalları və Te – Te, Se-Te rabitələrinin LP-orbitalları selenə məxsus yüüklük aralığına düşərək onun qadağan zonasının kiçilməsinə (cədvəl 1.) və Urbax kənarına məxsus lokal halların artmasına gətirir.

4. XÜLASƏ

Optik tədqiqatların nəticələri göstərir ki, $As_{40}Se_{60}$ - tərkibində selenin tellurla (Te) əvəzlənməsi qadağan zona eninin (Eg) kəskin azalmasına, kükürlə (S) əvəzlənməsi isə uyğun olaraq Eg-nin artmasına səbəb olur. Bu nəticə tədqiq olunan maddələrin qadağan zona sərhədləri ətrafında lokal halların konsentrasiyasının dəyişməsi ilə bağlıdır. Stexiometriyadan kənara çıxdıqda qalıq xalkogen atomlarının konsentrasiyasının artması nəticəsində Urbax enerjisinin qiymətinin artması quruluşun nizamsızlıq dərəcəsinin artması ilə izah olunur.

- [1] J.L. Adam, L. Calvez, J. Troles V. Nazabal. Chalcogenide Glasses for Infrared Photonics. International Journal of Applied Glass Science, 2015, 6(3), –p. 287-294.
- [2] Q. Liu, X. Zhao. Non-linear optical properties of chalcogenide and chalcobalide glasses// Journal of Non crystalline solids. 2010, 356(45), –p.2375-2377.
- [3] A. I. Isayev, S.I. Mekhtiyeva, R. I. Alekperov, N.Z. Jalilov, Ya.G. Gasanov. Influence of rare-earth atom(Sm) impurity on optical properties of chalcogenide glass-like semiconductors of Se-As system //Journal of Non-Oxide Glasses. 2009, 1(2), p.113-120.
- [4] R.I. Alekberov, A.I. Isayev, S.I. Mekhtiyeva, M. Fábíán. Local structures and optical properties of As-Se-Te(S) chalcogenide glasses// Physica B: Condensed Matter,-2018, 550(1),-p.367-375.
- [5] V.S. Shiryaev, A.P. Velmuzhov, Z.Q.Tang, M.F. Churbanov, A.B. Seddon. Preparation of high purity glasses in the Ga-Ge-As-Se system// Journal of Optical Materials, 2014, 37, p.18-23.
- [6] L. Calvez, L. Chalcogenide glasses and glass-ceramics Transparent materials in the infrared for dual applications. Comptes Rendus Physique, 2017, 18(6), p. 314- 322.
- [7] К.Д. Цэндин. Электронные явления халькогенидных стеклообразных полупроводников. - Санкт-Петербург: Наука, 1996. 486 с.
- [8] K. Tanaka, K. Shimakawa. Amorphous Chalcogenide Semiconductors and Related Materials/New York: Springer Science +Business Media LLC, 2011, 259 p.
- [9] K. Shimakawa. On the compositional dependence of the optical gap in amorphous semiconducting alloys. J. Non-Crystalline solids, 1981, 43(2), p. 229-244.
- [10] M. Kastner. Bonding bands, lone-pair bands, and impurity states in chalcogenide Semiconductors//Physical Review Letters, – 1972, 28(6), p.355-357.
- [11] M. Behera, P. Naik, R. Panda, R. Naik. Role of Te on the spectroscopic properties of $As_{50}Se_{40}Te_{10}$ thin films: An extensive study by FTIR and Raman spectroscopy//Optical Materials, 2017, 66, p.616-622
- [12] G.H. Jung, H. Kong, J.B. Yeo [et al.]. Evaluations of $Sb_{20}Se_{80-x}Ge_x$ (x = 10, 15, 20, and 25) Glass Stability from Thermal, Structural and Optical Properties for IR Lens Application// Journal of the Korean Ceramic Society, 2017, 54(6), –p.484-491.
- [13] R.I. Alekberov, S. I. Mekhtiyeva, A.I. Isayev, M. Fabian. The local structure of As-Se-S chalcogenide glasses studied by neutron diffraction and Raman scattering // J. Non - Crystalline Solids, 2017, 470(15), p.152-159.
- [14] Н.Ф. Мотт, Э.А. Девис. Электронные процессы в некристаллических веществах/ Москва: Мир, 1982, 664с.
- [15] J. D. Dow, D. Redfield. Toward a unified theory of Urbach's rule and exponential absorption edges// Physical Review B, 1972, 5(2), p.594-610.
- [16] С.И. Мехиева, Д.Ш. Абдинов. Развитие Физика селена/ Баку: ЭЛМ, 2000. 232 с.

[17] *Y. Upsurge, Y. Mizushima*. Photostructural change in the Urbach tail in chalcogenide glasses// *Journal of Applied Physics*,–1980, 51(3), p. 1772-1779.

[18] *N.F. Mott, E.A. Davis*. *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials/ USA: Oxford University Press, 1979, 605 c.*

S.I. Mekhtiyeva, A.I. Isayev, A.Z. Abasova, R.I. Alekberov

STUDY OF OPTICAL ABSORPTION IN CHALCOGENIDE GLASSY SYSTEMS

As-Se, As-Se-S, As-Se-Te

As a result of studying the optical absorption spectra, it was established that the replacement of selenium with tellurium (Te) in the $As_{40}Se_{60}$ content leads to a sharp decrease in the band gap, which leads to the formation of σ^* -orbitals and LP orbitals of Te-Te, Se-Te bonds with selenium (Se) is associated with the creation of additional energy states at the edge of the zone when entering the mobility gap. Replacing selenium (Se) with sulfur (S) results in the formation of high-energy bonds (Se-S), which results in an increase in the gap width (E_g). As a result of an increase in the concentration of residual chalcogen atoms with deviation from stoichiometry, the increase in the value of the Urbach energy is explained by an increase in the degree of disorder of the structure.

С.И. Мехтиева, А.И.Исаев, А.З. Абасова, Р.И. Алекберов

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ

СТЕКЛООБРАЗНЫХ СИСТЕМАХ As-Se, As-Se-S, As-Se-Te

В результате исследования спектров оптического поглощения установлено, что замещение селена теллуrom (Te) в содержании $As_{40}Se_{60}$ приводит к резкому уменьшению ширины запрещенной зоны, что приводит к образованию σ^* -орбиталей и LP -орбитали связей Te-Te, Se-Te с селеном (Se) связано с созданием дополнительных энергетических состояний на краю зоны при попадании в щель подвижности. Замена селена (Se) на серу (S) приводит к образованию высокоэнергетических связей (Se-S), что приводит к увеличению ширины щели (E_g). В результате увеличения концентрации остаточных атомов халькогена при отклонении от стехиометрии увеличение значения энергии Урбаха объясняется увеличением степени неупорядоченности структуры.

CdGa₂Te₄ KRİSTALININ DİNAMİK XASSƏLƏRİNİN AB-INITIO TƏDQIQI

Z.A. CAHANGİRLİ^{1,2,*}, B.Q. MEHDİYEV^{1,2}, R.G. SEYİDOV¹, T.O. BAYRAMOVA²

¹AR Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu, AZ-1073, Bakı, Azərbaycan

²AR Elm və Təhsil Nazirliyi BDU, AZ-1148, Bakı, Azərbaycan

³ Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti, Azadlıq pr., 16/21, Bakı, Azərbaycan

*zakircahangirli@yahoo.com

CdGa₂Te₄ yarımkəçirici kristalının dinamik xassələri Həyəcanlaşma Sıxlıq Funksionalı nəzəriyyəsi (DFPT) istifadə edilərək tədqiq olunmuşdur. Səkkiz Raman aktiv və on iki infraqırmızı (İQ) aktiv modları qrup-simmetriya analizindən istifadə etməklə identifikasiya olunmuşdur. Nəzəri olaraq hesablanmış nəticələr ədəbiyyatdakı eksperimental nəticələrlə müqayisə edilmişdir.

Açar sözlər: CdGa₂Te₄, Raman, İQ aktiv modlar, fonon dispersiyası, PDOS.

PACS: 63.20.dk, 74.25.Kc

1. Giriş

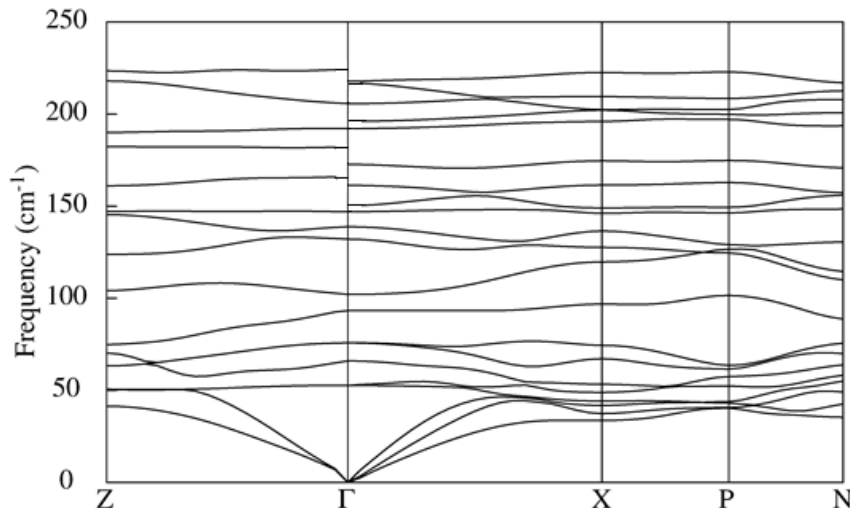
A^{II}B₂^{III}C₄^{VI} üçlü birləşmələri elektrooptik, opto-elektron və qeyri-xətti optik cihazlarda istifadə üçün perspektivli sayıldığı üçün tədqiqatçıların diqqətini cəlb edir [1]. Bu birləşmələrə optik anizotropiya, ikiqat şüasınma, böyük qeyri-xətti həssaslıq əmsalları, yüksək fətohəssaslıq kimi xüsusiyyətlər xasdır. Bu xüsusiyyətlərin mövcudluğu, eləcə də geniş qadağan olunmuş zona bu birləşmələri yarımkəçirici cihazların hazırlanmasında perspektivli materiallar sırasına çıxarır [1]. Buna görə də, bu birləşmələrin fiziki xüsusiyyətlərinin tədqiqi mühümdür. Bu məqalədə CdGa₂Te₄ kristalının dinamik xassələrinin nəzəri tədqiqatının nəticələri təqdim olunur.

2. CdGa₂Te₄-ün dinamik xassələri

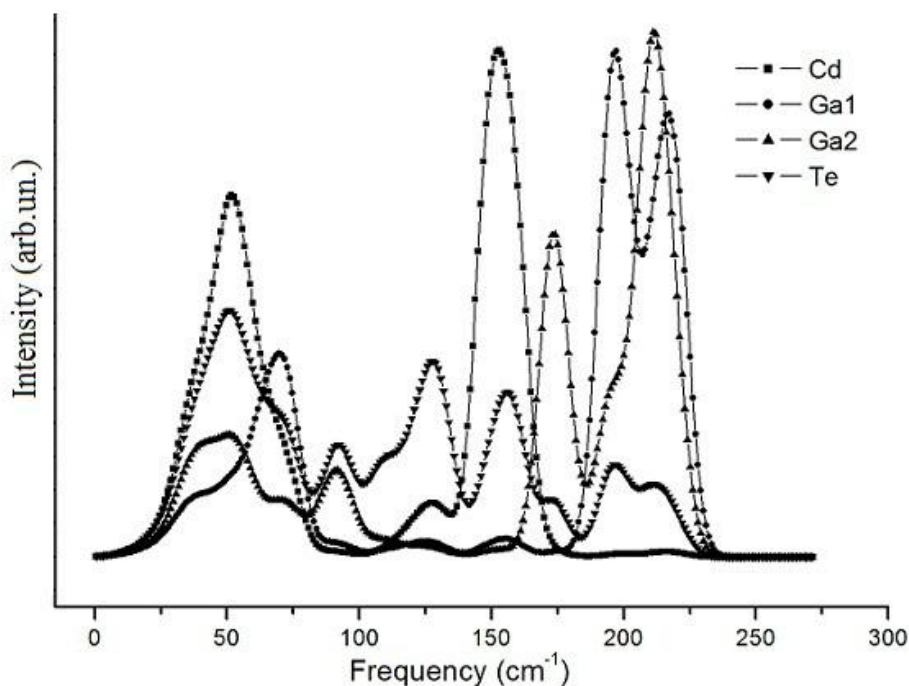
Ab-initio hesablamaları DFPT [2-4] vasitəsilə həyata keçirilmişdir. Hesablamalar ABINIT kodunda reallaşdırılmış psevdopotensial metodu ilə aparılmışdır [5]. CdGa₂Te₄ kristalının primitiv qəfəsində 7 atom var və fonon spektri buna görə 21 normal moddan ibarətdir.

Qrup nəzəriyyəsi analizi aşağıdakı fonon modlarını verir: $\Gamma=3A+6B+6E$, akustik modlar: $\Gamma_{\text{acoustic}}=B+E$ və optik modlar: $\Gamma_{\text{optic}}=3A+5B+5E$. E simmetriyalı modlar ikiqat cırlaşmışdır. Bütün optik modlar Raman aktivdir, B və E modları isə həmçinin infraqırmızı (İQ) spektrlərdə aktivdir. A modları qeyri-polyar Raman aktiv modlardır, B və E modları polyar modlardır və buna görə LO-TO parçalanma göstərir. A modlarında atomlar əsasən kristalloqrafik x, y və z oxları boyunca hərəkət edir. B modlarında isə kation qəfəsi ilə anion alt qəfəsi arasındakı hərəkət əsasən tetragonal c oxu boyunca baş verir. Ex və Ey simmetriyalı modların hərəkəti əsasən c oxuna perpendikulyar ab müstəvisində baş verir.

CdGa₂Te₄ kristalının fonon modlarının dispersiyası Brilluen zonasının yüksək simmetriyalı xətləri boyunca şəkil 1-də göstərilmişdir. Şəkil 1-dən görünür ki, P-N xətti istisna olmaqla, bütün yüksək simmetriyalı istiqamətlərdə optik fononların dispersiyası əhəmiyyətsizdir, bu da xüsusilə tetragonal c oxu boyunca Γ -Z istiqamətində zəif atomlararası qarşılıqlı təsiri göstərir. İQ aktiv B və E modları Brilluen zonasının mərkəzində LO-TO parçalanmasına səbəb olur və spektrdə qırılmalar kimi görünür (şəkil 1).



Şəkil 1. CdGa₂Te₄ kristalının fonon spektri.



Şəkil 2. CdGa₂Te₄ kristalının atomlara proyeksiya edilmiş fonon sıxlığı.

Cədvəl 1.
CdGa₂Te₄ üçün hesablanmış və eksperimentdən alınmış İQ və Raman fonon tezlikləri

CdGa ₂ Te ₄		
$\omega_{\text{theo}}, \text{cm}^{-1}$	$\omega_{\text{exp}}, \text{cm}^{-1}$	
	IR	R
102 132 138.8		132
63.4 90.2 161.2 172.6 228.1	58/77 98 140 182 220/237	64 85 114 234
52.6 75.8 150.2 197 215.1	78 140 201 213	162 203
50.1 75.8 146.9 192 205.6	155	57

İzostruktur birləşmələrin CdGa₂Se₄ [6], CdGa₂S₄ [7] və CdGa₂Te₄ fonon spektrlərinin müqayisəsi göstərir ki, bütün birləşmələrdə fononların dispersiyasının xarakteri ümumilikdə üst-üstə düşür. İki mühüm fərqi vurğulamaq olar: birincisi, anionun atom kütləsinin azalması ilə uyğun optik modların əlavələri azalır, ikincisi, kation və anion atomları arasındakı böyük kütlə fərqi nəticəsi olan enerji aralıqları CdGa₂S₄-də böyükdür, CdGa₂Se₄-də azalır və CdGa₂Te₄-də yox olur. Həmçinin, xalkogenlərin vibrasiya payı atom kütləsi artdıqca (S, Se, Te) aşağı tezliklərə doğru sürüşür.

Atomlara proyeksiya edilmiş fonon sıxlığı (PDOS) Şəkil 2. də göstərilmişdir. Hər bir atom üçün PDOS-un təhlili göstərir ki, 0 ilə 60 sm⁻¹ tezlik aralığında maksimumu 50 sm⁻¹ olan B və E modları ilə akustik və aşağı tezlikli optik budaqlar Cd və Te atomlarının hərəkətini əhatə edir. 85-dən 170 sm⁻¹-ə qədər olan ikinci tezlik aralığı, əsasən, Cd atomunun vibrasiyası ilə əlaqəlidir, Te-un isə az miqdarda payı var. Bu aralıqda Ga atomları fonon vibrasiyalarında iştirak etmir. Qeyd etmək lazımdır ki, Cd atomları yalnız 20-85 sm⁻¹ və 140-170sm⁻¹ tezlik diapazonlarında vibrasiyalarda iştirak

edir. Orta tezliklərdə onların payı demək olar ki, yoxdur. Yüksək tezlikli üçüncü sahə əsasən kristalloqrafik mövqelərdə (2b) və (2c) olan Ga atomlarının hərəkəti ilə bağlıdır. Spektrin 132 cm^{-1} -dəki ən güclü piki yalnız anion Te atomlarının iştirak etdiyi A modasına uyğundur. Aşağı tezlikli və yüksək tezlikli sahələr əsasən B və E modalarına uyğundur, halbuki qeyri-polyar A modaları orta tezlik intervalında yerləşir.

Cədvəl 1-də CdGa_2Te_4 üçün hesablanmış fonon tezlikləri və IQ və KR spektrləri verilmişdir. Cədvəldən

görüldüyü kimi, nəzəri və eksperimental tezliklər kifayət qədər uyğundur.

3. Nəticə

Hesablama nəticələri göstərir ki, aşağı və yüksək tezlikli enerjilər əsasən B və E modlarına uyğun gəlir, orta tezlikli modlar isə qeyri-polyar A modları ilə bağlıdır. Ən intensiv spektral pik 132 cm^{-1} tezliyindədir və Te anionlarının stexiometrik vakansiya ətrafında simmetrik hərəkətinə uyğundur.

-
- [1] *A.H. Georğobiani, C.I. Radaucan, I.M. Tiginyanu.* ФТП, 19, 193, 1985.
- [2] *P. Gianozzi, S. de Gironcoli, P. Pavone, S. Baroni.* Phys. Rev. B, 43, 7231. 1991
- [3] *S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, P. Gianozzi.* Rev. Mod. Phys. 73, 515, 2001.
- [4] *X. Gonze.* Phys. Rev. B, 55, 10337 (1997)
- [5] *X. Gonze, J.M. Beuken, R. Caracas, F. Detraux, M. Fuchs, G.M. Rignanese, L. Sindic, M. Verstraete, G. Zerah, F. Jallet.* Comput. Mater. Sci. 25, 478 (2002)
- [6] *З.А. Джахангирли, Т.Г. Керимова, Н.А. Абдуллаев, И.А. Мамедова, Н.Т. Мамедов.* ФТП, 51, в.5, 585 (2017)
- [7] *З.А. Джахангирли, Т.Г. Керимова, И.А. Мамедова, Н.А. Абдуллаев, Н.Т. Мамедов.* ФТТ, 60,11, 2265, 2018.

Z.A. Jahangirli, B.G. Mekhtiev, R.G. Seidov, T.O. Bayramova

Ab INITIO INVESTIGATION OF THE DYNAMIC PROPERTIES of CdGa_2Te_4

The dynamic properties of CdGa_2Te_4 have been investigated using density functional theory (DFT). Eight Raman-active modes and twelve IR-active modes were discovered and identified by considering the point group symmetry. The theoretically calculated results are compared with the experimental data of this study and with the available experimental data from the literature, obtained by infrared spectroscopy and Raman scattering methods.

З.А. Джахангирли, Б.Г. Мехтиев, Р.Г. Сеидов, Т.О. Байрамова

Ab INITIO ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ CdGa_2Te_4

Динамические свойства CdGa_2Te_4 исследованы с использованием теории функционала плотности (DFT). Восемь Раман активных мод и двенадцать ИК активных мод были обнаружены и идентифицированы из рассмотрения точечной группы симметрии. Теоретически рассчитанные результаты сравнены с экспериментальными данными настоящей работы и с результатами имеющихся в литературе экспериментальными данными, полученными методами инфракрасной спектроскопии и комбинационного рассеяния света.

EHTİMAL VƏ L. ZADƏNİN QEYRİ-SƏLİS ÇOXLUQLAR NƏZƏRİYYƏLƏRİNİN MÜQAYİSƏSİ

E.A. İSAYEVA

Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu

Bakı, Azərbaycan AZ1073, H. Cavid pr.131,

e-mail: eaisaeva@mail , e.isayeva@physics.science.az

Ehtimal nəzəriyyəsi qeyri-müəyyənliklərlə məşğul olur. Bəs onda Zadə nəzəriyyəsinə ehtiyac nədən yarandı? Süni intellektin həyata keçirdiyi məntiqi əməliyyatlar çoxqıymətli, qeyri-səlis məntiqə əsaslanır. Burada L.Zadənin qeyri-səlis çoxluqlar nəzəriyyəsi (FMS) istifadə etmək məqsəduyğun olardı. Süni intellektə baş verən fiziki prosesləri qeyri səlis hadisələr hesab etmək olar.

Açar sözlər: qeyri-dəqiqlik, təsadüfilik, qeyri-müəyyənlik, Kolmoqorov aksiomatikası, ehtimal ölçüsü, elementar hadisənin indikatoru, məhsubiyyət funksiyası

Giriş

Hələ 1996-cı ildə mənim yaddaşında qözəl xatirələrlə yaşayan müəllimim akademik Maqsud Əliyev Lütfi Zadənin qeyri-səlis çoxluqlar (QSC) nəzəriyyəsi haqqında danışarkən, qarşımıza belə bir sual geydu: “Bəs bizim həyat fəlsəfəsində QSC nə deməkdir və elmlərdə onun rolu nə ola bilər?”

Müasir dünyada bir çox şey görüştümüzü dəyişdi və biz başa düşdük ki, bir çox şeylər bizim sadələşdir-mələrimizdən daha dərin məzmun daşıyır. Bu xüsusilə süni intellekt problemlərinə aiddir.

Zadənin QSC nəzəriyyəsi bu problemlə birbaşa bağlıdır [1]. Süni intellektdən danışarkən başa düşürük ki, söhbət yeni nəsil kompüterlərdən gedir [2]. Bəs bu yeni maşınlar sələflərindən nə ilə fərqlənəcək? Məyər mövcud kompüterlər bir çox problemi həll etməmiş və niyə onları süni intellekt kimi təsnif etmirik? Fakt budur ki, bu gün maşınların həyata keçirdiyi məntiqi əməliyyatlar iki dəyərli məntiqə əsaslanır.

Burada yalnız iki nəticə mümkündür, “bəli və ya xeyr” və bu, əlbəttə ki, zəkaya xas olan tələblərə cavab vermir. Bu günün köhnə nəsil kompüterləri dünyamızı dərk edə bilsəydilər, onu ağ və qara rəngdə qavrayardılar.

Bu baxımdan ehtimal nəzəriyyəsi də ağ-qaradır. Axı o, eyni Aristotel məntiqinə əsaslanır. Buna görə də, kompüterlərdə baş verən proseslərdən danışarkən, bunların ehtimal prosesləri olduğunu nəzərdə tuturlar. Bu proseslər fiziklərin tədqiqat mövzudur. Ehtimal nəzəriyyəsi və onun tətbiqləri fiziklərin tədqiqatlarında böyük rol oynayır.

Statistik fizikada və termodinamikada təsadüfilik, xaos, dalğalanmalar, sabitlik xüsusi yer tutur. Bu məqalədə biz bu məsələləri qeyri-müəyyənliklər iyerarxiyasının daha yüksək səviyyəsindən nəzərdən keçirmək istərdik.

Ehtimal nəzəriyyəsi baxımından fiziki hadisə

Ehtimal nəzəriyyəsinə Kolmoqorovun aksiomatikasından [3] istifadə edərək hadisəni nəzərdən keçirərək ona elementar hadisələrin alt çoxluğu $\{\omega\}$ təyin edilir. Sonra, hər hansı digər hadisələrin müxtəlif alt

çoxluqlarını birləşdirərək, Ω hadisələr çoxluğu və ya fəzasını təşkil edirlər. Bu şəkildə formalaşan Ω çoxluğu sıfır ölçü dəsti olmadan ölçülə bilən çoxluq hesab olunur, yəni Borel çoxluğu. Məlum olduğu kimi, Borel çoxluqları üçün üç şərti ödəyən Lebesq ölçüsü adlanan $L(S)$ funksiyası müəyyən edilir:

- mənfi olmayan,
- additivli,
- uzunluğuna bərabər olan hər bir interval üçün [3].

Lakin ehtimal nəzəriyyəsinə yalnız a) və b) şərtlərini ödəyən başqa bir funksiya $P(S)$ nəzərdən keçirilir və belə müəyyən edilir:

$$P(S) = \int f(x) dx,$$

əgər $f(x)$ funksiyası S çoxluğunda müəyyən olunub, və $P(S) = +\infty$, digər hallarda burada $f(x)$ ehtimalın paylanması sıxlığıdır. Əgər S çoxluğu intervaldırsa, o zaman $f(x)$ Riman mənasında inteqraldır. Əgər intervallardan daha ümumi çoxluqlar sinfini nəzərə alsaq, onda $f(x)$ Lebesq mənasında inteqraldır. $L(S)$ yerinə başqa ölçü $P(S)$ istifadə edildikdə, $f(x)$ Lebesq-Stieltjes mənasındadır.

Gördüyümüz kimi, ehtimal nəzəriyyəsinə belə ölçülər $P(S)$ qəsdən 1-ə bərabər seçilir. Bu ölçülər ehtimal ölçüləridir. R_1 birölçülü fəzasında müvafiq ehtimal paylanma funksiyası $F(x)$ aşağıdakı kimi müəyyən edilir:

$$F(x) = P(\zeta < x),$$

burada ζ təsadüfi dəyişəndir,

$$0 \leq F(x) \leq 1, F(-\infty) = 0, F(+\infty) = 1.$$

Yuxarıdakıların hamısı məşhur nəzəriyyələrdən (Kolmoqorovun aksiomatikası, çoxluqlar nəzəriyyəsi və ölçülər nəzəriyyəsi) irəli gəlir [3, 4].

2. Qeyri-səlis çoxluqlar nəzəriyyəsi nöqtəyi-nəzərindən fiziki hadisə

Lakin, $P(S)$ 1-dən böyük və ya kiçik olan digər ölçülər də mövcuddur və onlar ehtimal nəzəriyyəsinin

seçimindən kənar qalırlar və L. Zadə tərəfindən qeyri-səlis çoxluqlar nəzəriyyəsi (QSQ) ilə tədqiq edilir.

Onlar $\Pi(S) > 1$ - imkan ölçüsü və $N(S) < 1$ - zərurət ölçüsü adlanır.

Aydındır ki, bütün bu üç ölçü Π , P , N -ni eyni vaxtda nəzərə almaqla biz ehtimal nəzəriyyəsinin məhdudiyətlərindən kənara çıxırıq.

Ehtimal nəzəriyyəsində olduğu kimi, imkan ölçü-

$$F_N(x) = N(\eta < x), 0 \leq F_N(x) \leq 0,5, F_N(-\infty) = 0 \text{ və } F_N(+\infty) = 0,5,$$

(biz ixtiyari olaraq 0,5 ədədini götürmüşük).

Bu funksiyalar, məsələn, [5]-də edildiyi kimi başqa bir şəkildə təqdim edilə bilər. Bu işdə elementar hadisələrə (Ω dəstinin nöqtələri) əlavə olaraq, "fokus elementləri" kimi təqdim olunur.

Onlar müşahidələrin qeyri-dəqiqliyini əks etdirən Ω çoxluğunun E_1, E_2, \dots, E_n -in cüt-cüt fərqlənə bilən

$$P_*(A) = \sum_{E_j \subseteq A} m(E_j) = \sum_j m(E_j) = N_{E_j}(A) - \text{bu kəmiyyət zərurətdir,}$$

$$P^*(A) = \sum_{E_j \cap A = \emptyset} m(E_j) = \sum_j m(E_j) = \Pi_{E_j}(A) - \text{bu kəmiyyət mümkündür.}$$

Qeyd edək ki, Zadənin QSQ nəzəriyyəsində $P(A)+P(B)=1$ həmçinin $\Pi(A)+N(B)=1$ bərabərliklərinə baxılır, burada A və B iki əks hadisələrdir.

Məlumdur ki, ehtimal nəzəriyyəsi və statistiknın tətbiqi üçün zəruridir ki, hadisənin tezliyi $\nu = \frac{n}{N}$ sabit qiymət almağa meyli olsun və bu sabitlik qorunsun. Burada N – təcrübələrin ümumi sayı, n - təcrübə nəticəsində bizi maraqlandıran hadisənin baş vermə sayıdır və dəyişən kəmiyyətdir.

Bu sabitlik qorunursa, n - təsadüfi dəyişən kəmiyyətdir. Əgər bu sabitlik yoxdursa, onda n qeyri-səlis kəmiyyətdir və burada ehtimal nəzəriyyəsi və statistikadan istifadə etmək olmaz. L. Zadə və R. Bellman [6] dəfələrlə qeyd etmişlər ki, qeyri-dəqiqliyin mənbəyi təkcə təsadüfilik deyil, həm də qeyri-səlislikdir. Qeyri-səlisliklə bağlı qeyri-dəqiqliyi nəzərə almaq üçün, Zadənin QSQ nəzəriyyəsindən istifadə olunur.

3. Qeyri-səlis çoxluqlar nəzəriyyəsi və statistika

Məlum olduğu kimi, bütün təcrübələr üç qrupa bölünür [7]:

1) Təcrübənin nəticəsinin tam sabitliyi olan yaxşı təcrübələr. Bu, determinizmin nadir halıdır. Ehtimal nəzəriyyəsi olmasa belə burada hər şey aydındır.

2) Çox yaxşı olmayan təcrübələr. Onların nəticələri statistik sabitliyinə malikdirlər. Burada ehtimal nəzəriyyəsi və statistikadan istifadə olunur.

3) Nəticənin statistik sabitliyinin olmadığı pis təcrübələr. Lütfi Zadənin GSC nəzəriyyəsi burada istifadə edilə bilər.

Statistik sabitliyin mövcudluğu nadir hallarda tam təmin edilə bilər. Bununla belə, kvant mexaniki səviyyəsində bir çox təcrübələr ikinci qrupa düşür.

Burada L.Zadənin dediyi söz yada düşür: "Əgər məqsədə çatmaq üçün əlində çəkilə varsa, ətrafdakı hər şey mismarlar kimi görünür".

sü $\Pi(S)$ üçün onun imkanların bölüşdürülməsi funksiyası $F_{\Pi}(x)$ təqdim olunur:

$$F_{\Pi}(x) = \Pi(\eta < x),$$

burada η – qeyri səlis kəmiyyətdir, $0 \leq F_{\Pi}(x) \leq 2$, $F_{\Pi}(-\infty) = 0$ və $F_{\Pi}(+\infty) = 2$ (2 ədədi ixtiyari alınır), və ehtiyacların bölüşdürülməsi funksiyası $F_N(x)$:

alt çoxluqlarıdır. Bu halda $m(E_i)$ ehtimalı E_i -ni təşkil edən elementar hadisələr çoxluğunun ehtimalının qiyməti kimi başa düşülür. Bu vəziyyətdə A hadisəsinin baş vermə ehtimalı qeyri-dəqiq səciyyəyəndirilə bilər və $\{P_*(A), P^*(A)\}$ intervalında olan baxıla bilər:

Kvant mexaniki səviyyəsindəki təcrübələr artıq 3-cü qrupa aiddir, yəni kvant dünyasına xas olan Heyzenberg qeyri-müəyyənliklərə görə pis təcrübələrdir. Buna görə də kvant mexanikasının aparatı xüsusi incəliklərə malik ehtimal nəzəriyyəsi anlayışları ilə yaradılmışdır. Amma Zadənin QSQ nəzəriyyəsinin istifadəsi daha məqsədə uyğun ola bilər.

Belə görünür ki, gündəlik təcrübələr, makroskopik səviyyədə təcrübələr 1 və ya 2-ci qruplara aiddir, yəni yaxşı təcrübələrdir. Ancaq buna tam zəmanət verilmir. Məsələn, Uspekhi-Physics jurnalında çap olunan məqalədə [8] göstərilir ki, mövcud olan statistik üsulları eksperimental nəticələrin paylaşılmasının "incə" strukturunu təhlil etmək üçün uyğun deyil.

Bu məqalə makroskopik proseslərdəki fluktuasiyaları öyrənmə və müəlliflər bizi belə qənaətə gətirirlər ki, "ehtimal" və "təsadüfilik" anlayışları fluktuasiyaların necə paylaşılacağı sualının cavabını müəyyənləşdirir. Ehtimal nəzəriyyəsinin orta kəmiyyət anlayışı burada keçərli deyil.

Burada Bellman və Zadənin necə xəbərdarlıq etdiklərini xatırlaya bilərik: "Biz hesab edirik ki, təsadüfilik və qeyri-səlislikləri ayırmaq lazımdır, ikincisi bir çox qərarların qəbulu proseslərində qeyri-dəqiqliyin əsas mənbəyidir". Beləliklə, L.Zadənin QSQ nəzəriyyəsinin fizikada tətbiqi çox vacib bir məsələdir.

Məlumdur ki, Kolmoqorovun aksiomatikasına görə Ω ehtimal fəzasının elementləri və ya nöqtələri gələcəkdə baş verəcək və ya olmayacaq A, B, \dots hadisələri deyil, $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots$ elementar hadisələrdir, yəni $\Omega = \{ \omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots \}$ [3]. Bu halda, ehtimal nəzəriyyəsində Ω -nin müxtəlif alt alt çoxluqları $I(\omega)$ adlanan hadisə indikatoru ilə əlaqəli olan A, B, C, \dots hadisələrdir:

$$I(\omega) = \begin{cases} 1, & \text{əgər } \omega \in A \\ 0, & \text{əgər } \omega \notin A \end{cases}$$

Burada A – biz tərəfdən baxılan hadisədir. O, elementar hadisələrdən ibarət olunan səlissə çoxluğudur.

Lakin L.Zadə öz QSC nəzəriyyəsində M səlissə yox, qeyri səlissə olan çoxluqlara baxır. Buraya o yeni bir anlayış gətirir – bu x elementinin M çoxluğuna $\mu(x)$ məhsubiyyət funksiyasıdır.

$$\mu(\omega) = \begin{cases} 1, & \text{əgər } \omega \in A \\ 0, & \text{əgər } \omega \notin A \\ [0, 1], & \text{digər hallarda.} \end{cases}$$

Gördüyümüz kimi, Zadənin QSC-da olan məhsubiyyət funksiyası $\mu(\omega)$ ehtimal nəzəriyyəsində olan $I(\omega)$ indikatorun analoqudur, lakin daha geniş əhatəli.

Məlumdur ki, ehtimal nəzəriyyəsində $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots$ elementar hadisələrdən başqa onların üzərində olan operasiyalarda baxılır. Onlar F klas hadisələr – hadisələrin cəbri - adlanır. Ona görə də ehtimal fəzası Θ , $\Theta = \{\omega, F, P\}$ kimi yazılır, burad P – ehtimalın özüdür. Əgər Ω n sayda $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$ elementar hadisələrdən ibarətdirsə, onda F klası $2^n = C_n^0 + C_n^1 + C_n^2 + \dots + C_n^n$ hadisələrdən ibarətdir. Burada ehtimal nəzəriyyəsində geniş istifadə olunam kombinatorika elminin 2^n aranje-manları və C_n^k kəmbinzonlarıdır. Burada 2 rəgəmin mənası isə odur ki, Aristotelin iki cavablı, yəni baxılan hadisədə elementar hadisə baş verir ya yox məntiqidir. Buna əlavə olaraq ehtimal nəzəriyyəsində elementar hadisələr cüt-cüt bir yerdə baş verməyən bərabər ehtimallı hadisələrdir. Beləliklə ehtimal nəzəriyyəsində F klasdan seçim edilir və cüt-cüt bir yerdə baş verməyən bərabər ehtimallı hadisələrdir tam bütöv qrup yaradır.

Beləliklə, tam A_1, A_2, \dots, A_n hadisələr yeni Ω ehtimal fəzanın nöqtələri sayıla bilər $\Omega = \{\omega_1\} + \{\omega_2\} + \dots + \{\omega_n\}$, burada $\{\omega_n\}$ - bir A_n nöqtədə cəmləmiş elementar hadisələrin çoxluğudur.

Lakin, bu Ω fəzanın ətrafında F klasdan $A_1^*, A_2^* \dots A_n^*$ cüt-cüt bir yerdə baş verən bərabər ehtimallı olmayan hadisələr gəlir. Onlar L.Zadənin QSC nəzəriyyəsində aiddilər. Bu $A_1^*, A_2^* \dots A_n^*$ nöqtələr tam yeni qeyri-səlissə Ω^* fəzanın nöqtələridir, $\Omega^* = \{\omega_1^*\} + \{\omega_2^*\} + \dots + \{\omega_n^*\}$. Biz burada əmin deyilik ω^* nöqtə bu Ω^* fəzaya məhsubdur ya yox, diz yalnız onun məhsubiyyət dərəcəsinə danışı bilərik. Bu iki Ω və Ω^* fəzaları birləşdirərək, biz tam yeni Ω^{**} fürsətlər ya da mümkünliklər fəzasını yaradırıq, $\Omega^{**} = \Omega \cup \Omega^*$. Bu

(Ω^{**}, F, Π) fəzada, Π – mümkünlik ölçüsüdür, F – hadisələrin cəbri. Aydındır ki, bu yeni məkanda ehtimal nəzəriyyəsində nəzərdən keçirilə bilməyən nəticələri indinəzərdən keçirilə bilər. Yuxarıda qeyd edilmiş kimi, statistik sabitliyin mövcud olduğu təcrübədə təcrübənin nəticəsi sabit qiymət alır, ona görə ki, bu hadisə eyni dərəcədə ehtimal olunan, qoşa uyğun gəlməyən hadisələrin birliyi və ya $A = A_1 + A_2 + \dots + A_k$ cəmi kimi təmsil oluna bilər. Bu halda $P(A_i) = \frac{1}{n}$, və $P(A) = \frac{k}{n}$. Statistik sabitliyin olmadığı təcrübədə nəticə $A_1 + A_2 + \dots + A_k$ cəmi kimi təqdim edilə bilməz. Buna görə də, burada ehtimal nəzəriyyəsindən istifadə etmək olmaz, lakin Zadə qeyri-səlissə çoxluqlar nəzəriyyəsi istifadə oluna bilər.

Sadə birmisal verək. Zər-kub üçün ehtimal fəza tərəfləri nomrələnmiş 6 elementar hadisədən ibarətdir ($\omega_1 - 1$ -ci üz düşəcək, $\dots, \omega_6 - 6$ -cı üz düşəcək). F adlanan ehtimal fəzamızın cəbri $2^6 = 64$ element - hadisə ilə işləyir. Bu 64 hadisə arasında 6 bərabər ehtimallı, $\{1\}, \{2\}, \dots, \{6\}$ hadisə seçilir ki, bunlar ikili bir-biri ilə baş verməyən, eyni dərəcədə ehtimal olunan hadisələrin tam qrupunu təşkil edir. İstənilən nəticə, məsələn $\{1, 5\}$ – hər iki tərəfdən ya $\{1\}$, ya $\{5\}$ tərəf – statistik sabitliyə malikdir, $v = \frac{2}{6}$. Bu Kolmogorov aksiomatikasındadır.

İndi isə təsəvvür edək ki, biz burada yalnız 3 bərabər ehtimallı, cüt-cüt baş verməyən $A_1 = \{1, 2\}$, $A_2 = \{3, 4\}$, $A_3 = \{5, 6\}$ elementar hadisələri görürük. Onlar tam qrupu təşkil edirlər və bu hadisələrin cəbri $F = 2^3 = 8$ elementdən ibarətdir. Məsələn, $A = \{1, 2, 3, 4\}$ nəticə üçün $A = A_1 + A_2$. Bu halda $I(\omega_1) = 1$, $I(\omega_2) = 1$, $I(\omega_3) = 0$ və ehtimal $P(A) = \frac{2}{3}$.

Lakin, məsələn $A = \{1, 5\}$ nəticə haqqında baz hecnə deyə bilərik? Burada biz $I(\omega)$ indikator anlayışından L.Zadənin QSC nəzəriyyəsində olan $\mu(\omega)$ məhsubiyyət funksiyası anlayışına keçməliyik. Bundan sonra biz ehtimal fəzada olan $\omega_1 = \{1, 2\}$, $\omega_2 = \{3, 4\}$, $\omega_3 = \{5, 6\}$ elementar hadisələrin yanına $\omega_1^* = \{1, 5\}$, $\omega_2^* = \{4, 6\}$... və s. fokal adlanan elementləri, yəni qoşa baş verən hadisələri də goymalıyıq. Zadənin qeyri-səlissə çoxluqlar nəzəriyyəsində bu fokus elementləri $\Pi(A)$ imkan ölçüsü ilə bağlıdır [1]. Ehtimal nəzəriyyəsində indikator $I(\omega)$ göstəricisinin orta qiyməti hadisəsinin ehtimalıdır $P(A)$:

$$E(I(\omega)) = \frac{1 + 1 + \dots + k \text{ dəfə} + 0 + 0 + \dots + (N - k) \text{ dəfə}}{N} = P(A),$$

Burada $A = A_1 + A_2 + \dots + A_k$.

Eynilə, L.Zadənin QSC nəzəriyyəsində olan $\mu(\omega)$ məhsubiyyət funksiyasının orta qiyməti hadisəsinin mümkünlüyüdür $\Pi(A)$:

$$E(\mu(\omega)) = \mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_k = \Pi(A).$$

Ehtimal nəzəriyyəsində təsadüfi dəyişən kəmiyyət X anlayışı mərkəzi yer tutur. Təsadüfi dəyişən X – funksiyadır. O, Ω fəzadan hansısa bir sistemin müxtəlif hallar fəzasına keçid edən funksiyadır. Hallar fəzası R

həqiqi ədədlər dəsti də ola bilər, yəni $X : \Omega \rightarrow R$. Təsadüfi dəyişən kəmiyyət aşağıdakı xüsusiyyətə malik olmalıdır:

$$A = \{\omega / X(\omega) \leq x\} \in A, \quad \forall x \in R,$$

Burada ω – elementar hadisə, A – hadisələrdir və yaxud σ - sahə A .

Əgər elementar hadisələrin məkanı Ω birbaşa müşahidə üçün ölçədən deyilsə, yuxarıdakı X funksiyasından istifadə etməklə məlumat əldə edilə bilər, yəni $X : \Omega \rightarrow R$.

Təsadüfi dəyişən X bir növ “ölçmə cihazı”dır. Bununla belə, Ω fəzasındakı hər hadisə “ölçmə cihazı X ” tərəfindən aşkar edilə bilməz. Başqa sözlə, hər bir hadisə $A \in \mathcal{A}$ belə $A=X^{-1}(B)$ şəklində təmsil oluna bilməz. Buna görə də, σ - sahə $A(x)$ A hadisə sahəsinin alt sahəsidir, yəni $A(x) \subset A$.

Belə hadisələrə Zadənin QSC nöqtəyi-nəzərindən baxmaq və qeyri-səlis kəmiyyət X^* anlayışını təqdim etmək çox maraqlıdır. X təsadüfi dəyişən kimi, qeyri-səlis dəyişən X^* -in tərifində əsas rolu qeyri-səlis fəza $\Omega^* = \{\omega_1, \omega_2, \dots\}$ oynayacaq və bütün hadisələr A σ -sahədir.

Təsadüfi dəyişən X kimi, qeyri-səlis dəyişən X^* da Ω^* fəzasından elementəri R həqiqi ədədlər çoxluğuna aparən funksiyadır, yəni $X^*: \Omega^* \rightarrow R$. O , aşağıdakı xüsusiyyətlərə malikdir:

$$A = \{\omega / X^*(\omega) \leq x\} \in \mathcal{A}, \quad \forall x \in R.$$

X -ə bənzər qeyri-səlis kəmiyyət X^* həm də bir növ “ölçü cihazıdır”. Aydın ki, iki ölçmə vasitəsi həmişə bir vasitədən daha yaxşıdır.

İfadə olunan fikirləri S.Şnolun məqaləsi ilə əlaqələndirmək olar. Məqələdə deyilir ki, müxtəlif xarakterli hər hansı proseslər üçün eksperimental nəticələrin qəribə səpələnməsi var, yəni hamısı eyni “incə” paylanma strukturuna malik idilər. Məqələnin son sözü belə bir sualdır: “Nə üçün nəzəriyyə bunu izah

edə bilmir?” və müəllif belə qənaətə gəlir ki, “ehtimal”, “təsadüfilik” və “xaos” anlayışları aydınlaşdırma tələb edir.

“Nəticələrin səpələnməsi”ndə incə qanunauyğunluqlar axtarmaq lazımdır və təəssüf ki, mərkəzi ehtimal teoremlərə əsaslanan nəticələrin statistik emalı üsulları nəticələrin paylanmasının “incə” strukturunu təhlil etmək üçün kifayət deyil. Beləliklə, müəllifin bəhs etdiyi nəticələrin qəribə səpələnməsi təkcə təsadüfiliklə deyil, həm də prosesin qeyri-səlisliyi ilə bağlıdır və məhs “incə” quruluş qeyri-səlisliklə bağlıdır.

Yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, qeyri-səlis kəmiyyət “ölçmə cihazıdır” və burada onun köməyi ilə istəsək də, istəməsək də, eksperimental nəticələrin paylanmasının incə strukturu aşkarlanır.

Bir çox fiziki proseslərdə, o cümlədən stoxastik proseslərdə sabitliy məsələsinə çox diqqət yetirilir. Riyaziyyatçılar bu məsələlərdə Lyapunov funksiyasını öyrənirlər. Aydın ki, sistemin sabitliyi üçün əlavə məhdudiyətlər lazımdır ki, L.Zadənin QSC nəzəriyyə-sində bu kəmiyyət - zərurətdir N , və yuxarıda müzakirə edilmişdir ki $N(A) + N(B) < 1$.

Sonda, ehtimal və L.Zadənin QSC nəzəriyyələrin içində olan qeyri-müəyyənliklər və fizika- riyaziyyat elmində olan təriflərlərin əlaqəsinə cədvəl şəkilində vermək yaxşı olardı.

Cədvəl

Fizika və riyaziyyat	Ehtimal və L. Zadənin QSM nəzəriyyələri
Entropiya (S)	Qeyri-müəyyənlik ölçüsü (g)
Təsadüfi dəyişən və ya hadisə $X(\omega)$	Ehtimal ölçüsü P
Təsadüfi funksiya və ya stoxastik proses $X_t(\omega)$	Mümkünlükdür ölçüsü Π
Sabitliy (Lyapunov funksiyası L)	Zərurət ölçüsü N
Elementar hadisə ω	İndikator I və məhsubiyyət funksiyası μ

- [1] Л.А. Заде. Роль мягких вычислений и нечеткой логики в понимании, конструировании и развитии информационных интеллектуальных систем. Новости искусственного интеллекта, № 2-3, 2001, (44-45), с.7-152.
- [2] М.И. Алиев, И.М. Алиев, Э.А. Исаева. Флуктуации сточки зрения теории нечетких множеств Л.Заде. Ис-кусственный Интеллект и принятие решений, 2009, № 2, с.70-753.
- [3] А.Н. Колмогоров. Основные понятия теории вероятностей, М.: Наука, 1974.
- [4] Г. Крамер. Математические методы статистики, М.: Мир, 197
- [5] А. Дюбуа, А. Прад. Теория возможностей: Приложе-ния к представлению знаний в информатике, М.: Радио и связь, 1990, 290с.
- [6] R.E. Bellman, L.A. Zadeh. Making in Fuzzy Environment, Management Science, 17, No.4, 1970, p.141-1647. В.Н. Тутубалин. Теория вероятностей, М.: Изд. МГУ, 1972, 209с.
- [7] С.Е. Шноль и др. Флуктуации в макросистемах. УФН, 1998, т. 168, № 10, с.1129-1140
- [8] M.I. Aliyev, E.A. Isayeva, I.M. Aliyev. Random and fuzzymagnitudes as some kind of measuring devices. Pro-ceeding of ICAFS-2010 (Ninth International conferenceon Application of Fuzzy System and Soft Computing), Prague, Czech Republic, August 26-27, 2010, p.275-277

E.A. Isayeva

COMPARISON OF THEORIES OF PROBABILITY AND L. Zadeh's FUZZY SETS

Probability theory deals with the uncertainties. So what was the need for the Zadeh's fuzzy sets theory? Logical operations performed by artificial intelligence are based on multi-valued fuzzy logic. Here it would be appropriate to use L. Zadeh's fuzzy set theory (FST). Physical processes occurring in the artificial intelligence can be considered as fuzzy phenomena.

Э.А. Исаева

СРАВНЕНИЕ ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ И ТЕОРИИ НЕЧЕТКИХ МНОЖЕСТВ Л. ЗАДЕ

Теория вероятностей имеет дело с неопределенностями. Так в чем же была необходимость в теории нечетких множеств Заде? Логические операции, выполняемые искусственным интеллектом, основаны на многозначной нечеткой логике. Здесь уместно было бы воспользоваться теорией нечетких множеств (ТНТ) Л. Заде. Физические процессы, происходящие в искусственном интеллекте, можно рассматривать как нечеткие явления.

BOŞLUQDA YAYILAN DALĞA ENERJİSİNİN UDULMASI

E.R. HƏSƏNOV^{1,2}, Ş.G. XƏLİLOVA^{2,1}, R.K. MUSTAFAYEVA¹¹Bakı Dövlət Universiteti Akad. Z.Xəlilov, küç.23, Bakı, Azərbaycan Respublikası²ETN Fizika İnstitutu, AZ-1073, H.Cavid 131, Bakı, Azərbaycan Respublikasıshahlaganbarova@gmail.com

Vakuum fiziki nöqteyi-nəzərdən, xüsusən də fiziki xüsusiyyətləri baxımından hələ də sirli bir mühit olaraq qalır. Bizim işimizdə monoxromatik dalğanın L ölçülü vakuumdən keçməsi nəzərdən keçirilir. Bu işdə monoxromatik dalğanın L ölçülü vakuumdən keçməzdən əvvəl və sonra enerjisi hesablanır. İsbüt edilmişdir ki, bir rəngli dalğanın enerjisinin nisbəti. vakuumdən keçməzdən əvvəl monoxromatik dalğa 1-dən azdır. Bu o deməkdir ki, monoxromatik dalğa vakuumdə elastik şəkildə səpələnmişdir və vakuum sıx bir mühitdir. Vakuum dalğası keçdikdən sonra monoxromatik dalğanın uzunluğu azalır. Monoxromatik dalğa vakuumdə enerji itirir.

Açar sözlər: vakuum, enerji, qeyri-elastik qarşılıqlı təsir, monoxromatik dalğa, udma, qeyri-bircinslik.**PACS:** 78.55, 73.22.CD, 73.22**УДК** 539.2**Giriş**

Kvant mexanikası riyazi metod kimi dalğa funksiyasına əsaslanır [1-3]. Bir ölçülü halda, monoxromatik dalğa funksiyası formaya malikdir:

$$\psi(x,t) = ce^{i(kx-\omega t)} = ce^{i\left(kx - \frac{Et}{\hbar}\right)} \quad (1)$$

Budur k -dalğa vektoru $k = \frac{2\pi}{\lambda}n$, ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), λ -dalğa uzunluğu, K - dalğanın vakuumdəki enerjisi, dalğa vektoru ilə aşağıdakı kimi əlaqəlidir:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2 n^2}{2m_0}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2)$$

m_0 - sərbəst elektron kütləsi. Dalğa funksiyası (1) Şredinger tənliyini ödəyir

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m_0} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (3)$$

Təsəvvür edək ki, $E_{00} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m_0 \lambda_0^2}$ enerji ilə monoxromatik dalğa vakuuma düşür

Nəzəriyyə

Klassik fizika nöqteyi-nəzərindən bu dalğanın uzunluğu L olan vakuumu tərk etdikdən sonra enerji dəyişməməlidir. Lakin biz enerjinin (4) vakuumu tərk etdikdən sonra dəyişdiyini göstərəcəyik. Bu, vakuunun monoxromatik dalğa ilə qarşılıqlı əlaqədə olması deməkdir. Deməli, vakuumdə dalğa ilə qarşılıqlı təsir var. Şredinger tənliyindən (3) istifadə edərək vakuumdə enerjini hesablayırıq. (1)-dən $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ və $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = 2\pi i \psi \left(-\frac{x}{\lambda^2} \frac{d\lambda}{dt} - \frac{\hbar}{m\lambda^2} + \frac{2\hbar t}{m\lambda^3} \frac{d\lambda}{dt} \right) \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -4\pi^2 \psi \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{x}{\lambda^2} \frac{d\lambda}{dx} + \frac{2\hbar t}{m\lambda^3} \frac{d\lambda}{dx} \right)^2 + 2\pi i \psi \left[-\frac{2}{\lambda^2} \frac{\partial \lambda}{\partial x} + \frac{2x}{\lambda^3} \left(\frac{d\lambda}{dx} \right)^2 - \frac{6\hbar t}{m\lambda^4} \frac{d\lambda}{dx} + \frac{2\hbar t}{m\lambda^3} \frac{d^2 \lambda}{dx^2} \right] \quad (5)$$

hesablanır. (4) və (5) (3)-də yerinə yazsaq və tənliyin xəyalı və həqiqi tərəflərini bölsək

$$2 \frac{\partial \lambda}{\partial x} - \frac{2x}{\lambda} \left(\frac{d\lambda}{dx} \right)^2 + \frac{6\hbar t}{m\lambda^2} \frac{d\lambda}{dx} = 0 \quad (6)$$

$$\left(\frac{x}{\lambda^2} - \frac{2\hbar t}{m\lambda^3} \right) \frac{\partial \lambda}{\partial t} = \frac{\hbar}{m\lambda^2} - \frac{2\hbar t}{m\lambda^3} \left(1 - \frac{x}{\lambda} \frac{d\lambda}{dx} + \frac{2\hbar t}{m\lambda^2} \frac{d\lambda}{dx} \right)^2 \quad (7)$$

alırıq. (6)-dən

$$\frac{\partial \lambda}{\partial x} = \frac{\lambda \left(2 + \frac{6\hbar t}{m\lambda^2} \right) \hbar}{x} \quad (8)$$

alırıq. (8)-i (7) –in yerinə yazsaq

$$\frac{\partial \lambda}{\partial x} = -\frac{2\pi\hbar}{m\lambda A(t)} \left[1 + \frac{2\lambda}{x} u A(t) + \left(\frac{\lambda}{x} \right)^2 (Au)^2 \right] \quad (9)$$

alırıq.

Burada: $A(t) = \frac{2\hbar t}{m\lambda^2} - \frac{x}{\lambda}$, $u = 2 + \frac{6\hbar t}{m\lambda^2}$. (9) –u inteqrallasaq və fərz etsək ki,

$$\frac{2\hbar t}{m\lambda} < x, \quad A = -\frac{x}{\lambda}, \quad u = 2 \quad (10)$$

(11)-i (10)-nun yerinə yazsaq

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \frac{2\pi\hbar}{mx} \quad (11)$$

alırıq.

$$\lambda = \lambda_0 + \frac{2\pi\hbar t}{mx} = \lambda_0 \left(1 + \frac{2\pi\hbar t}{mx\lambda_0} \right) \quad (12)$$

(12) tənliyində $\frac{\partial^2 \lambda}{\partial x^2}$ atdıq, və bu tamamilə əsaslıdır, çünki koordinatlarından xətti asılıdır. Beləliklə, $x = L$ ölçülü vakuumdən çıxdıqdan sonra dalğanın son enerjisi

$$E_{sonra} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m_0 \lambda_0^2} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{2\pi\hbar t}{m_0 \lambda_0 L} \right)^2} \cdot \text{Ona görə } \frac{E_{evvel}}{E_{sonra}} = \frac{1}{\left(1 + \frac{2\pi\hbar t}{m_0 \lambda_0 L} \right)^2} \ll 1 \quad (13)$$

(13) ifadəsi (9) tənliyini (10)-də A və u qiymətləri ilə həll etməklə əldə edilmişdir. A və u qiymətlər üçün və $\lambda \rightarrow \infty$ bu, dalğanın xəttə çevrildiyi klassik sahədir.

$$A = \frac{2\hbar t}{m_0 \lambda^2}, \quad u = \frac{6\hbar t}{m_0 \lambda^2} \quad (14)$$

qiymətlərdə (9) un tənliyin həlli çətdir. (14)-ü (9)-a yazsaq dalğa uzunluğu üçün

$$\lambda = \lambda_0 \left[1 - 2 \left(\frac{2\hbar \tau}{m_0 \lambda_0^2} \right)^2 \left(\frac{3\lambda_0}{L} \right)^2 \right]^{1/6} \quad (15)$$

$$\frac{E_{evvel}}{E_{sonra}} = \frac{1}{\left[1 - 2 \left(\frac{\hbar \tau}{m_0 \lambda_0^2} \right)^2 \left(\frac{3\lambda_0}{L} \right)^2 \right]^{1/6}} \quad (16)$$

alırıq. Burada τ - dalğanın L ölçülü vakuumdən keçməsi üçün lazım olan vaxtdır. Beləliklə, L uzunluğunda vakuumdən keçən monoxromatik dalğa öz enerjisini azaldır. Bu, dalğanın vakuumla qeyri-elastik qarşılıqlı təsiridir. Bu o deməkdir ki, vakuum boş bir mühit deyil.

Nəticə

Sübut edilmişdir ki, L ölçülü vakuumdən keçən monoxromatik dalğa öz enerjisinin bir hissəsini itirir. Enerji itkisi L -nin müxtəlif dəyərlərində fərqli şəkildə baş verir. Vakuum maddədir və heterojenliyə malikdir. Bu qeyri-homogenlik monoxromatik dalğa enerjisinin itkisinə səbəb olur. Daha uzun dalğa uzunluğuna malik bir dalğa, daha qısa dalğa uzunluğuna malik bir dalğadan daha çox enerji itirir. Bundan əlavə, enerji itirən dalğa vakuumu tərk edir, yəni vakuum dalğa ilə qeyri-elastik qarşılıqlı əlaqənin baş verdiyi kütləvi bir mühit kimi davranır. Lakin təəssüf ki, hansı elementar zərəciklərin vakuumu doldurduğu və hansı qanunla hərəkət etdiyi məlum deyil. Vakuum (boşluq) fiziki dərkətmə mənasında sirlə bir obyektədir. Vakuumun xüsusiyyətləri dəqiq müəyyən edilməmişdir və insanlar üçün qapalıdır.

- [1] *L.D. Landau, E.M. Lifshitz. Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory. Series: Theor. physics, Moscow: Nauka, 1984, pp.13-37*
 [2] *L.D. Landau E.M. Lifshitz. Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory. Series: Theoretical physics, Moscow: Nauka, 1984, pp.42-66*

- [3] *L.D. Landau, E.M. Lifshitz. Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory. Series: Theoretical physics, Moscow: Nauka, 1984, pp.70-100*

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

ABSORPTION OF WAVE ENERGY PROPAGATION IN VACUUM

Vacuum still remains a mysterious medium from a physical point of view, especially its physical properties. The passing of a monochromatic wave is examined through a vacuum of size L in our work. In this work, the energy of a monochromatic wave is calculated before and after passing through a vacuum of size L . It has been proven that the ratio of the energy of a monochromatic wave before passing through a vacuum is less than 1. This means that the monochromatic wave was scattered in elastically in a vacuum and vacuum is a dense medium. After the passage of the vacuum wave, the length of the monochromatic wave decreases. A monochromatic wave loses energy in a vacuum.

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

ПОГЛОЩЕНИЕ ВОЛНОВОЙ ЭНЕРГИИ, РАСПРОСТРАНЯЮЩЕЙСЯ В ВАКУУМЕ

Вакуум до сих пор остается загадочной средой с физической точки зрения, особенно с точки зрения его физических свойств. В нашей работе рассматривается прохождение монохроматической волны через вакуум размером L . В данной работе рассчитана энергия монохроматической волны до и после прохождения через вакуум размера L . Доказано, что отношение энергии монохроматической волны до прохождения через вакуум меньше 1. Это означает, что монохроматическая волна упруго рассеивалась в вакууме, а вакуум является плотной средой. После прохождения вакуумной волны длина монохроматической волны уменьшается. Монохроматическая волна теряет энергию в вакууме.

MAQNETRON ÇÖKDÜRÜLMƏ ÜSULU İLƏ ALINMIŞ İNDIUM QALAY OKSİD (ITO) TƏBƏQƏSİNİN ELEKTROFİZİKİ VƏ OPTİK XASSƏLƏRİ

Ə.Ə. RƏCƏBLİ

Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu

Azərbaycan, Bakı 1073, Hüseyn Cavid pr. 131

rajabli.alovsat@mail.ru

Şəffaf keçirici oksidlər (ŞKO) sinfinə aid olan İndium Qalay Oksid (ITO) təbəqəsi maqnetron çökdürülmə üsulu ilə alınmışdır. Bunun üçün indium oksid (In_2O_3) və qalay oksid (SnO_2) qarışığından ibarət keramik nümunələr istifadə olunmuşdur. Alınmış Şüşə/ITO strukturunda yükdaşıyıcılarının yüklüklüyünün onların konsentrasiyasından asılılığı, materialın müqaviməti kimi elektrofiziki xassələri və təbəqə üçün keçiriciliyinin, işıq şüasının əks olunmasının və udulmasının fotonun enerjisindən asılılığı kimi optik xassələri tədqiq edilmişdir. Alınan nəticələrin izahı verilmişdir.

Açar sözlər: Şəffaf keçirici oksidlər, indium oksid, qalay oksid, İndium Qalay Oksid (ITO), maqnetron çökdürülmə

Giriş

Şəffaf keçirici oksidlər (ŞKO) görünən və yaxın infraqırmızı spektral diapazonda yüksək optik qəbul edicilik və yüksək elektrik keçiricilik kimi zahirən ziddiyətli görünən iki xüsusiyyəti özündə saxlayan materiallar sinfidir. ŞKO materialların bu iki əsas xüsusiyyətə malik olmaları onları şəffaf nazik təbəqəli elektrodlar üçün nazik təbəqəli günəş elementlərində şəffaf elektrodlar qismində istifadə etməyə imkan yaradır. İndium Qalay Oksid (ITO) də ən geniş istifadə edilən ŞKO materialıdır, çünki ən yüksək keçiriciliyə ($\sigma \approx 10^4 \text{Om}^{-1}\text{sm}^{-1}$) malikdir və aşağı temperaturlarda (hətta otaq temperaturunda) çökdürülə bilər. Yüksək elektrik keçiriciliyi və görünən spektral diapazonunda yüksək udulma əmsalı, sabitlik xüsusiyyətlərinə görə, onlar şəffaf elektrodlardan biri hesab olunur [1-3]. Lakin, verilmiş parametrlə, mükəmməl strukturlu nazik təbəqəli İTO-nun alınması, fiziki xüsusiyyətləri ilə, həmçinin həcmi boyu bircinsliliyi ilə, strukturun və xassələrinin həm çökdürülmə şərtlərindən, həm də təbəqələrin sonrakı emalından güclü şəkildə asılı olması səbəbindən mürəkkəb texnoloji problem yaradır [4].

Bu tədqiqat işi lazım olan parametrlə nazik təbəqənin alınma mexanizmi və alınmış təbəqənin elektrofiziki və optik xassələrinin tədqiqinə həsr olunmuşdur.

Eksperiment

Maqnetron çökdürülmə, ITO (indium qalay oksidi) kimi nazik təbəqələrin çökdürülməsi üçün geniş istifadə olunan bir üsuldür. Bu üsul, həm effektiv, həm də geniş səthlərə çökdürmə imkanı verir.

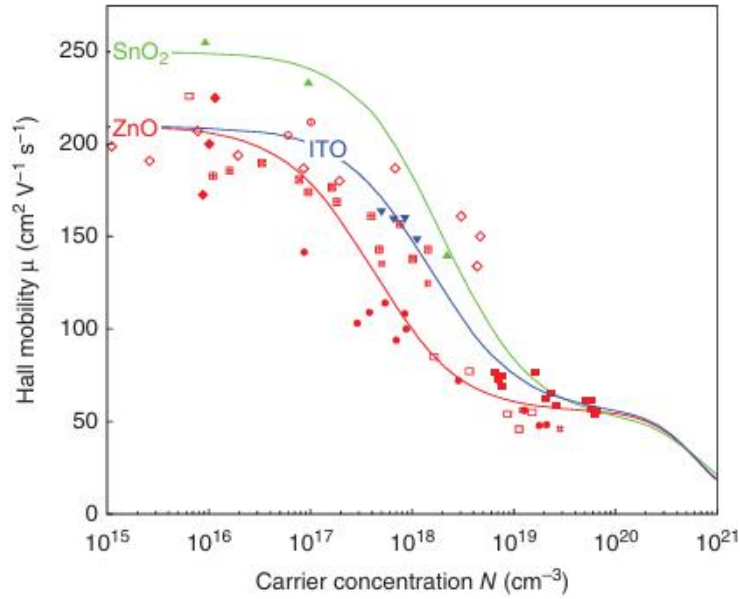
Çökdürülmə Z-550 Leybold-Heraouz qurğusunda vakuum kamerasında arqon və oksigen qarışığı olan mühitdə aparılmışdır. Əvvəlcədən kimyəvi təmizlənmiş 3×5 cm ölçüdə şüşə lövhənin vakuum kamerasında arqonun maqnetron boşalmasında ion təmizlənməsi aparılmışdır. İon təmizləmə 500Vt güclü yüksək tezlikli qaz boşalması, 4 dəqiqə ərzində aparılmışdır. ITO təbəqələrinin maqnetron çökdürülməsi üçün indium oksid (In_2O_3) və qalay oksid (SnO_2) qarışığından (90%

:10%) ibarət 210 mm diametrli hədəfdən istifadə olunmuşdur. Çökdürülmə prosesi zamanı alınacaq təbəqənin xassələrinə (müqavimətinə, şəffaflığına və yükdaşıyıcılarının yüklüklüyünə) əhəmiyyətli dərəcədə təsir edə bilən prosesin aparılma temperaturu, qaz tərkibi və təzyiqi kimi amillərə dəqiq nəzarət edilmişdir. Boşalma gücü təxminən 100 Vt olmuş, çökdürülmə müddəti isə təbəqənin qalınlığına əsasən seçilmişdir. Nəticədə, Şüşə/ITO struktur alınmışdır. Alınmış təbəqənin daha şəffaf və daha yüksək elektrik keçiriciliyinə malik olması üçün arqon qazı mühitində müxtəlif temperaturalarda termiki işlənmə aparılmışdır. Strukturun elektrofiziki xassələri (səthi müqaviməti, yükdaşıyıcıların yüklüklüyünün onların konsentrasiyasından asılılığı) dördzondlu metodla ölçmələr aparılmaqla tədqiq olunmuşdur, optik xassələri isə Specord 210 spektrofotometrində öyrənilmişdir.

Nəticələr və onların müzakirəsi

ITO indiyə qədər məlum olan ən aşağı müqavimətlərə malik ŞKO materialıdır ($\rho \approx 1,1 \cdot 10^{-4} \Omega\text{sm}$) [1]. O, genişzolaqlı (qadağan olunmuş zolağın eni 3.8eV-dir) yüksək konsentrasiya və yüksək yürüklüklü sərbəst yükdaşıyıcılara malik, n-tip yarımkəçiricidir [2].

İndium Oksid (IO) kristalları və təbəqələri, oksigen çatışmazlığı olan şəraitdə hazırlanıqda daha yüksək keçiriciliyə malik olur [3]. Bu, həm oksigen vakansiyaları, həm də indium atomlarının bu kristal quruluşunda, atomların düzgün yerləşdiyi quruluş vəziyyəti arasında qeyri-adi yerlərdə yerləşməsi (interstisiyaları) sayəsində baş verir, çünki hər iki növ qüsurlar indiumun normal nisbətdən daha az miqdarda istifadə olunduğunu göstəribilən IO-in yaranmasına səbəb olur [4, 5]. ITO-ya aşqarların əlavə edilməsi, yükdaşıyıcıların konsentrasiyanı xeyli artırmağa imkan verir. Qatqı kimi ən yüksək elektrik aktivasiyaya malik olan Sn elementindən istifadə edilmişdir. Əldə edilə bilən maksimum yükdaşıyıcıların konsentrasiyaları Sn-un həllolma limitinə yaxın olan təxminən 5at.% [6] təşkil edir.



Şəkil 1. ITO, ZnO və SnO₂ də Hall əmsalının yükdaşıyıcılarının konsentrasiyasından asılılığı.

Qrafikdən görüldüyü kimi, SnO₂ üçün Hall yürüklüyü bütün yükdaşıyıcıların konsentrasiyası diapazonunda ən yüksəkdir. 240 cm²/V·s yaxınlığında pik nöqtəsinə çatır və yükdaşıyıcıların konsentrasiyası artdıqca azalır, nəhayət 10²⁰sm⁻³ yaxınlığında çox aşağı qiymətlərə düşür.

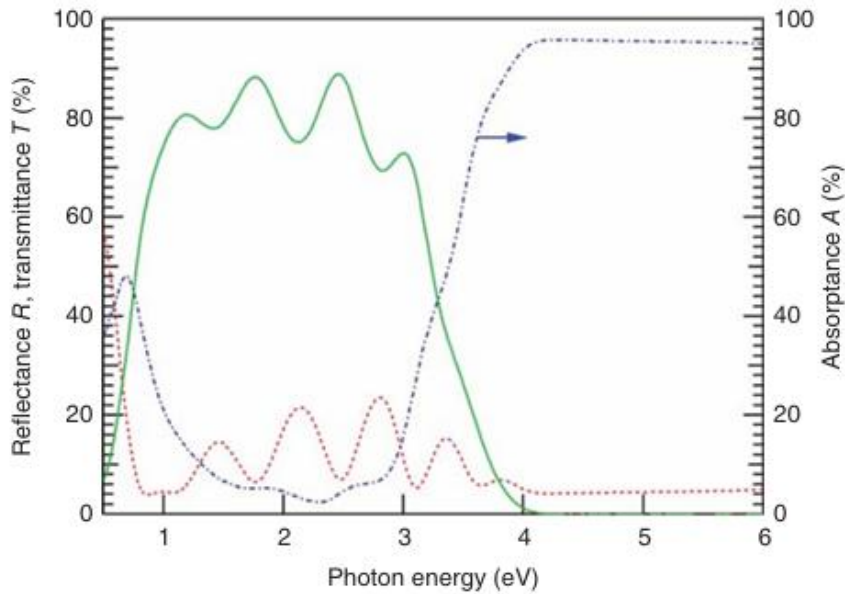
ZnO-nun Hall yürüklüyünün başlanğıc qiyməti təxminən 200 cm²/V·s ətrafındadır, lakin yükdaşıyıcıların konsentrasiyası artdıqca əhəmiyyətli dərəcədə azalır. 10¹⁸ sm⁻³-dən sonra yürüklük SnO₂-dən daha sürətlə enir.

İndium qalay oksidi (ITO) üçün yürüklükün başlanğıc qiyməti təxminən 150 cm²/V·s-dir və SnO₂ və ZnO ilə müqayisədə daha aşağıdır. Baxmayaraq ki, 10¹⁸ sm⁻³-dən yüksək yükdaşıyıcıların konsentrasiyalarında ZnO-dan daha yüksək qalır, lakin artan yükdaşıyıcıların konsentrasiyası ilə eyni azalma tendensiyasını da saxlayır.

Yükdaşıyıcıların konsentrasiyası artdıqca hər üç material üçün Hall yürüklüyü azalır. Yükdaşıyıcıların konsentrasiyası ilə yürüklük arasında bu tərs əlaqə, material daxilində daşıyıcıların daha çox toqquşması nəticəsində alınır.

Aşqar konsentrasiyası təxminən 2at.%-ə qədər olanaq, elektron konsentrasiyası təbəqələrin aşqar tərkibi ilə xətti şəkildə artır. Bu, aşqarın elektrik aktivasiyasının təxminən 100% olduğunu göstərir. Daha yüksək aşqar konsentrasiyaları (>3at.%) üçün elektronların konsentrasiyası təxminən 1,5 · 10²¹sm⁻³ qiymətində doymağa başlayır. Bu doyma, IO-da aşqarın həllolma limiti ilə əlaqəlidir [6].

İşdə qalayla aşqarlanmış In₂O₃ təbəqələrinin optik xassələri də tədqiq edilmişdir.



Şəkil 2. ITO təbəqəsi üçün əks olunmanın (bütöv xətt), optik keçiriciliyin (qırıq xətt) və udulmanın (nöqtəli-kəsikli xətt) fotonun enerjisindən asılılığı.

Qrafik, müxtəlif fotonun enerjiləri üçün materialın optik xüsusiyyətlərini-reflektivlik (optik ötürülmə),

transmissiya (keçiricilik) və absorbansiya (udulma) faizlərinin necə dəyişməsinə göstərir.

Refleksiya (R, yaşıl əyri) işıq şüasının materialın səthindən əks olunmasını göstərir.

Refleksiya nisbətən yüksək (60%-dən yuxarı) başlayır və foton enerjisi artdıqca dalğalanmalar göstərir. Bu dalğalanmalar nazik təbəqələr üçün xarakterik olan interferensiya effektlərini göstərir.

Qrafikdən görünür ki, ən yüksək əks olunma təxminən 1 eV ilə 3 eV intervalında enerjinin qiymətlərində baş verir, burada əks olunma faizi təxminən 100%-ə çatır. Bu, o deməkdir ki, bu enerji səviyyələrində materiala düşən işıq demək olar ki, tamamilə əks olunur. Təbəqə bu enerji intervalında (1240- nm-dən 400 nm dalğa uzunluğuna uyğun) şəffafdır, yəni bu spektral diapazonda şəffaf elektroda uyğundur.

Transmissiya (T, mavi kəsikli əyri) isə materialın işığı neçə faiz keçirdiyini göstərir. Ən aşağı keçiricilik 2 ilə 3 eV enerji intervalında olduğu müşahidə olunur ki, bu da əks olunmanın ən yüksək olduğu hissəyə uyğundur.

Absorbansiya (A, mavi kəsikli əyri) qrafikdə sağ tərəfdə absorbansiya faizini, yəni material tərəfindən udulan işığın miqdarını göstərir. Enerji 4 eV-dən yuxarı olduqda, udulma faizi sürətlə 100%-ə yüksəlir. Bu, materialın bu enerji səviyyələrində işığı tamamilə udulduğunu göstərir.

Bu optik xassələr, bu materialın optik qurğularda, məsələn, aşağı enerji intervalında əks olunma və ya bloklayıcı kimi, yüksək enerjilərdə (4 eV və yuxarı) işıq şüasını keçirilməsində və udulmasında istifadə edilməsinə imkan verir.

Nəticələr

Bu xassələr materialşünaslıqda, xüsusən də ITO kimi yarımkeçirici və ya şəffaf keçirici oksidlərin ekranlar, fotovoltaiqlər və sensorlar kimi cihazlarda optimallaşdırılması üçün vacibdir. Yükdəyiçicilərin konsentrasiyası ilə hərəkətiliyin necə dəyişdiyini anlamaq, material xüsusiyyətlərini xüsusi elektron tətbiqlər üçün tənzimləməyə kömək edir.

İTO təbəqələrinin optimallaşdırılması, daha yaxşı sensor ekranlar, daha effektiv günəş panellərinin alınması üçün materiallar və daha yüksək göstəricili display texnologiyalarında istifadə olunmasına imkan verir. Eyni zamanda, bu texnologiya enerji effektivliyi və qurğuların inteqrasiyası sahələrində yeniliklər üçün də mühüm potensiala malikdir. Aparılan tədqiqatın nəticələri göstərir ki, maqnetron çökdürmə, nazik İTO təbəqələrinin alınması üçün etibarlı və təkrarlanabilən bir metod kimi müasir elektronikanın tələblərinə cavab verir.

- [1] T. Minami. New n-type transparent conductive oxides. MRS Bull. 2000. 25: 38–44.
- [2] Ш.О., Эминов, А.А. Раджабли., Х.Д. Джалилова, А.Ш. Алиев, В.Б. Тагиев. Структурные, электрические и оптические свойства тонких пленок ITO, полученных магнитронным напылением на стекле, АМЕА Хəbərləri, Fizika-Texnika və Riyaziyyat elmləri seriyası, cild XXXVI № 5, səh. 19-27, 2016.
- [3] G. Frank and H. Köstlin. Electrical properties

- and defect models of tin-doped indium oxide layers. Appl. Phys., 1882, A 27: 197–206.
- [4] R. Claret. 1973. Ionized impurity scattering in degenerate In_2O_3 . Appl. Phys. A 2: 247–256.
- [5] de Wit, J.H.W. Electrical properties of In_2O_3 J. Solid State Chem. 1973, 8: 142–149.
- [6] G. Frank, L. Brock and H.D. Bausen. The solubilities of Sn in In_2O_3 and In in SnO_2 crystals grown from Sn–In melts. J. Cryst. Growth 36: 179–180.

A.A. Rajabli

THE ELECTRICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF THE INDIUM TIN OXIDE (ITO) LAYER OBTAINED BY THE MAGNETRON SPUTTERING METHOD ARE AS FOLLOWS

The Indium Tin Oxide (ITO) layer belongs to the class of Transparent Conductive Oxides (TCO) and was obtained by the magnetron sputtering method. For this, ceramic targets consisting of a mixture of indium oxide (In_2O_3) and tin oxide (SnO_2) were used. In the obtained Glass/ITO structure, electrophysical properties such as the dependence of charge carriers' mobility on their concentration and the material's resistance, as well as the optical properties of the layer, including the conductivity, reflection, and absorption of light depending on the photon's energy, were studied. The results have been explained.

А.А. Раджабли

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОЯ ОКСИДА ИНДИЯ И ОЛОВА (ITO), ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ

Оксид индия-олова (ITO) является слоем прозрачных проводящих оксидов (ППО) и получен методом магнетронного распыления. Для этого использовались керамические мишени, состоящие из смеси оксида индия (In_2O_3) и оксида олова (SnO_2). В полученной структуре Стекло/ITO были исследованы электрофизические свойства, такие как зависимость подвижности носителей заряда от их концентрации, сопротивление материала, а также оптические свойства слоя, включая зависимость проводимости, отражения и поглощения света от энергии фотона. Приведены объяснение результатов исследований

**Akademik Magsud Əliyevin
100 illik yubileyinə həsr olunmuş**

Fizikanın Aktual Problemləri

beynəlxalq elmi konfrans

**İngilis dilində məqalələr
Gəncə - 2024**



**EFFECTIVE ROLE OF VOLUMETRIC COLLISIONS IN BREAKDOWN AT
ATMOSPHERIC PRESSURE IN SEMICONDUCTOR GAS DISCHARGE SYSTEM****E. KOÇ¹, M.M. SHIRINOV² and B.G. SALAMOV²**¹*Department of Electrical and Electronics Engineering, Faculty of Engineering,
Istanbul Arel University, 34537 Istanbul, Turkey*²*Institute of Physics, Ministry of Science and Education, AZ 1073 Baku, Azerbaijan*

The effects of collision processes in discharge volume in breakdown were investigated in the range of E/p (100-600 V/cm×Torr). We obtained the breakdown curve for argon micro-plasma in a semiconductor gas discharge system consisting of GaAs cathodes to the contributions of the collision processes in discharge volume when the gas discharge gap (d) is 45 μm. The secondary electron emission liberated by the semiconductor cathode was found as a result of interaction with the cathode of ions and photons occurring in plasma space. Under electric fields, the collision processes in discharge volume provide the rapid growth of electron multiplication required for avalanches. At high pressures up to atmospheric pressure, our investigations show that the value of secondary electron emissions for semiconductor cathode gradually grows. In these conditions, micro-plasma was obtained with a homogeneous formation. For plasma light sources and gas discharge lasers, our results become important to reveal the volumetric processes of micro-discharge electronic devices at high pressures up to atmospheric pressure.

PACS: 71.55.Eq, 72.20.Ht, 72.80.Ey, 73.40.Qv**Keywords:** cathode surface–plasma interactions, electrical breakdown, secondary electron emission, semiconductor cathodes.**INTRODUCTION**

Atmospheric-pressure dc cold micro-discharges that are stable and the low-current are one of the most common plasma types. It is due to the advantages. They contain the wealthy species in the plasma volume. It isn't observed the damages to the environment. However, the important disadvantage in atmospheric-pressure cold micro-discharges is the high energy required for the discharge formation and the self-sustained discharge. The effect of the cathode on the discharge is weak, which means that the volumetric processes gain importance. This disadvantage leads to the difficulties such as cost in the cold micro-plasma applications. Also, it can be the transitions from a stable state to an unstable state for the micro-discharges in the plasma volume. Micro-discharges have been prevalently utilized in the various technologies of light sources, microreactors, and plasma display panels [1-3].

Recently, to detect the characteristic properties of the atmospheric-pressure cold micro-discharges the studies were widespread. In such a type of discharge, it is mainly encountered with intense collisions in discharge volume, thermal effects, under the small mean free path, and the developments in the collision frequency. The discharge volume occurring in volumetric collisions covers the intense electron density and photon. The existence of plasma species gives the markedly various spectra lines with the collisions in the discharge volume [4-8]. Particularly, a photoionization process in the discharge volume becomes important in the development of the discharge plasma. It plays a critical role in the evaluation of volume processes for the discharge formations and the self-sustained discharge at high pressures up to atmospheric pressure.

A gas discharge system that consists of a semiconductor cathode is a semiconductor gas discharge system (SGDS) employed in the production of atmospheric-pressured cold micro-discharges. In SGDS, the semiconductor cathode makes an important contribution to the micro-plasma via secondary electron emission (SEE), and at the same time, it can be the ability to extinguish the formations of nonhomogeneous current in the discharge space due to its spatial distribution [9-12]. In SGDS, the volumetric collision processes occurring in discharge volumes far haven't been investigated for the atmospheric pressure dc cold micro-discharges. It becomes important to evaluate volumetric collision processes for the cold micro-discharges revealed in the discharge volume of SGDS.

We aim to present the effective processes of volume ionization playing a role in atmospheric-pressure dc cold discharges with the semiconductor cathode at the breakdown instant. SGDS was applied the enough high electric fields to generate collisions in discharge space. SGDS generated a uniform micro-plasma with numerous collisions in discharge space, and the collision processes including mainly collision-induced excitations and collision-induced ionization, and photoionization were obtained with the inelastic collisions. It depends on the energy given between the cathode and anode the discharge formation and the self-sustained discharge with these collisions. We consider that the volumetric collision processes will become important in developing micro-discharge applications and technologies.

EXPERIMENTAL

The experimental scheme of SGDS with the semiconductor cathode is shown in Figure 1.

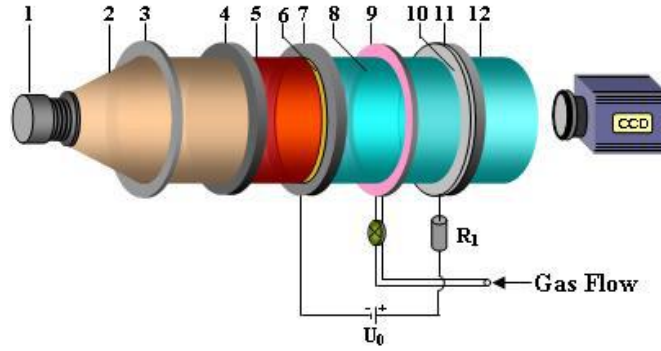


Fig. 1. Scheme of SGDS with GaAs semiconductor cathode: 1 - light source, 2 - incident light beam, 3 - lens, 4 - Si filter, 5 - IR light beam, 6 - semi-transparent Ni contact, 7 - semiconductor cathode, 8 - discharge gap, 9 - insulating mica foil, 10 - semitransparent conductive SnO₂ contact, 11 - flat glass disk, 12 - visible light beam.

Semiconductor material (7) consists of semi-insulating n-type GaAs:Cr with high resistivity ($\rho \cong 10^8 \Omega \times \text{cm}$), and it is a direct semiconductor that has a bandgap of 1.43 eV at room temperature. The thickness and the diameter are 1 and 36 mm, respectively. The anode was covered with a conductive SnO₂ (10), and it had a glass disk (11) with a 2 mm thickness and a 36 mm diameter. An insulator slab (9) between the semiconductor cathode and the glass plate has a spacer with a circular aperture (8). The discharge gap $d = 45 \mu\text{m}$ and the pressure p between 550 and 760 Torr were used to obtain the right-hand branch of the breakdown curve. The discharge gap between the glass plate and the semiconductor cathode plate was filled with argon gas. The gas pressure of the discharge system was changed by a needle valve between the discharge chamber and the mechanical pump. The values of breakdown voltage U_B were determined from current-voltage characteristics. The experiments were carried out at room temperature. In this study, when the semiconductor cathode absorbs the incident radiation L_3 , we investigate the volumetric processes in the atmospheric-pressure dc cold discharges in SGDS with GaAs cathode.

RESULTS AND DISCUSSION

The breakdown curve of SGDS with the GaAs cathode is presented in Figure 2 at high pressures up to atmospheric pressure. When the pressure is increased, the voltage values required for the onset of discharge plasma also increase. We obtained the breakdown voltages $U_B = 315 \text{ V}$ at 550 Torr, and $U_B = 345 \text{ V}$ at 760 Torr at $d = 45 \mu\text{m}$ in L_3 . With the increasing pressure, the collisions of more gas atoms placed in the discharge space lead to the onset of discharge plasma at higher voltage values. To express this increase, the volumetric collisions of atoms, species, and electrons in the plasma space are taken into account when the applied potential and the pressure increase. In discharge plasma, with increasing electric field, the volumetric collisions continuously develop,

while GaAs cathode markedly emits SEEs in discharge space.

At high pressures up to atmospheric pressure, Figure 3 shows γ levels released by the GaAs cathode at the onset of discharge plasma. The secondary electron emission coefficient (γ) for the electrons emitted from the cathode gradually increases with the increasing pressure in the ranges of E/p between 100 $\text{V/cm} \times \text{Torr}$ and 150 $\text{V/cm} \times \text{Torr}$. It was found as $\gamma = 7.26 \times 10^{-4}$ at 550 Torr, and $\gamma = 1 \times 10^{-3}$ at 760 Torr. In the plasma space, the electron gainsless energy from the electric field when E/p decreases. At the reduced values of E/p , the electron-induced excitations become important, and this case reveals the presence of formation in discharge volume due to photons. VUV-UV photons and the resonant emissions are dominant processes, and the increasing number of metastable species are important in these ranges of E/p but it is observed the decreases in the ionizations [7,8]. For these ranges of E/p , the photoionization mechanism makes an important contribution to ionizing the atoms in the discharge space. Photons formed in the discharge volume have enough energy to ionize the atoms. The collision-induced excitations and ionizations continuously develop in the discharge volume with the increasing electric field. This consideration indicates the importance of volumetric collisions in the discharge space at high pressures up to atmospheric pressure. The onset of discharge plasma depends on the volumetric collisions while SEEs emitted from the cathode increase at the reduced values of E/p . The formation of SEEs in these ranges of E/p originated from the photon-induced SEEs. But, when the pressure increases, the photon-induced SEEs liberated by the cathode also increase.

With the increasing pressure, the increase in the number of collisions is significant to initiate the discharge plasma. The increase of applied voltage leads to the increase in the number of collisions in this volume, and therefore the discharge plasma is required for the high voltages. The results obtained from Figure 2 show that the voltages of breakdown curves shift to the high values. It is about the high electric field at $45 \mu\text{m}$ at high pressures up to atmospheric pressure for

micro-discharges. In these conditions, the onset of plasma and the self-sustained plasma are required for enough high electric fields. This case results in a time lag in the breakdown curve when the pressure increases. At high pressures up to atmospheric pressure, collision-induced excitation becomes important while collision-induced ionization gives

their products in the discharge volume. We conclude that the collision processes occurring in the micro-plasma volume present unique effects in the onset of discharge plasma. Therefore, the plasma space at the high pressures up to atmospheric pressure is occupied by the intensely collision-induced excitation and ionization processes.

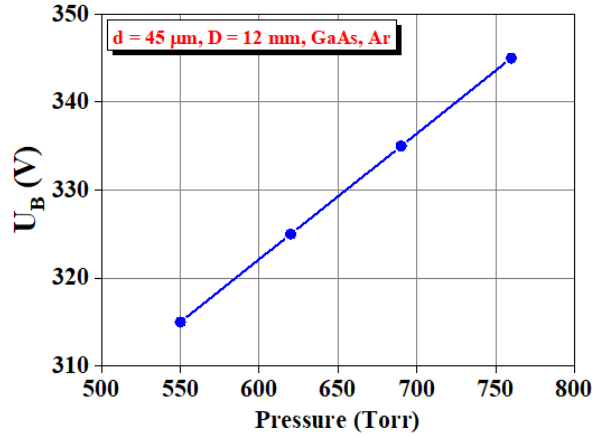


Fig. 2. Breakdown curve in Ar medium in SGDS at high pressures up to atmospheric pressure.

To form the microplasma, the photoionization occurring in the discharge space gives a unique contribution with an ionizing effect on the gas atoms under the inelastic collisions when the number of gas atoms increases. Photoionization becomes important in the electron multiplication required for avalanches in SGDS. On the cathode, due to the photons occurring in the discharge volume, the photoelectron mechanism is valid, and the photons contribute to the electron emission from the cathode; however, in the plasma volume, there are increases in the amount of space charge. Also, the different plasma regimes can be observed with the processes of collision-induced excitation and ionization when the electron density increases. The results obtained in [14,15] show the critical role of the volumetric processes occurring in the formation of discharge plasma and self-sustained plasma. It can result in disorders in the spatial-time distribution of microplasma.

processes become important to generate the current in discharge space. The current-voltage characteristics to express the state of the atmospheric-pressure DC discharge of SGDS under the collision-induced excitation and ionization processes are shown in Figure 4. The formation and maintenance of low-current discharge are directly about the numerous collision-induced excitation and ionization processes obtained in discharge space. For the breakdown, it needs to have a high electric field under these conditions. With the increasing electric field, many collisions in discharge space develop. From this point, the volumetric collision processes in discharge space are characteristic of microplasma at high pressures up to atmospheric pressure, and therefore discharge volume presents a main effect for microplasma. There is an important dependency on the discharge volume of microplasma at high pressures up to atmospheric pressure [8].

In the atmospheric-pressure DC discharge of SGDS, the collision-induced excitation and ionization

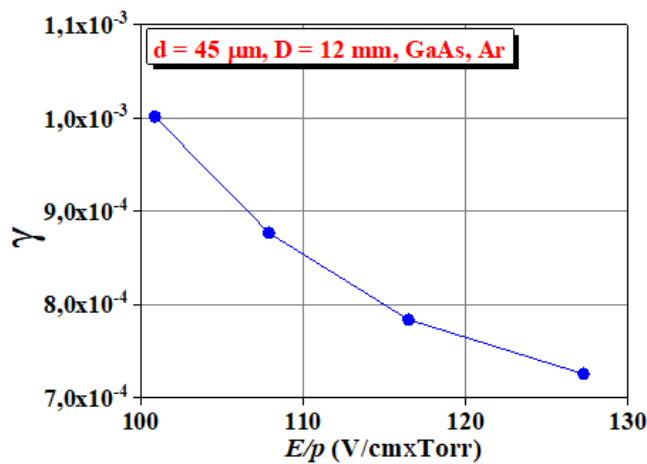


Fig. 3. Secondary electron emission and E/p graph obtained in SGDS in L₃.

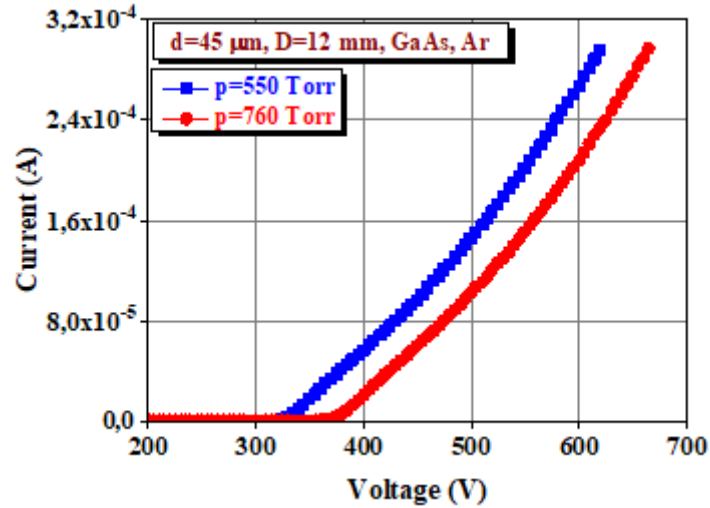


Fig. 4. Current-voltage characteristics obtained at high pressures up to atmospheric pressure in SGDS in L_3 .

After the breakdown, the growth in the discharge current develops step by step when the applied voltage increases. The homogeneous spatial-time distribution is established in the conditions of low-current microdischarge after the breakdown. The discharge current is sustained by the main volumetric collision processes and also SEEs liberated by cathode through discharge space. When the accumulation of space charge in discharge volume becomes important, deviations in the stability of discharge space can be observed [16]. With the important development of volumetric collision processes, the homogeneity of spatial-time distribution begins the losses, and it results in the oscillations or abrupt decrease of discharge current. It becomes important the govern volumetric collision processes to obtain the stable discharge in microplasma applications.

CONCLUSIONS

We investigated the effect of volumetric collisions in breakdown in argon environment in atmospheric-pressure dc microdischarge in SGDS with GaAs cathode. At high pressures up to atmospheric pressure, the amount of SEE released by the cathode reaches high values at the reduced values of E/p . It was observed that the breakdown voltages shift to the higher applied voltage values when the amount of SEE is at higher values. At the reduced values of E/p , the formation of discharge plasma is about photoionization structure in the effects of collision-induced excitation and ionization. When the volumetric collision processes in discharge plasma are taken into account, we consider that the efficiency of microplasma applications will develop at high pressures up to atmospheric pressure.

-
- [1] P. Carazzetti, Ph. Renaud and H. Shea. 2009 Sens. Actuator A Phys. 154, 275.
- [2] L. Schwaederlé, M.K. Kulsreshath, L.J. Overzet, P. Lefauchaux, T. Tillocher, R. Dussart. 2012 J. Phys. D: Appl. Phys. 45, 065201.
- [3] S.S. Yang, J.K. Lee, S.W. Ko, H.C. Kim, J.W. Shon. 2004 Contrib. Plasma Phys. 44, № 5-6 536.
- [4] G.G. Raju. Gaseous Electronics 2006 Taylor & Francis, Boca Raton.
- [5] H. Grosch, T. Hoder, K.-D. Weltmann and R. Brandenburg. 2010 Eur. Phys. J. D 60, 547.
- [6] D. Staack, B. Farouk, A. Gutsol, A. Fridman. 2008 Plasma Sources Sci. Technol. 17, 025013.
- [7] B.G. Salamov, Y. Öztekin Çiftci and K. Çolakoğlu. 2004 IEEE Trans. Plasma Sci. 32, 2093.
- [8] A.V. Phelps and Z. Lj. Petrović. 1999 Plasma Sources Sci. Technol. 8, R21-R44.
- [9] E. Koç, S. Karaköse and B.G. Salamov. 2013 Phys. Status Solidi A 210, (9) 1806-1816.
- [10] D. Mariotti, J.A. McLaughlin and P. Maguire. 2004 Plasma Sources Sci. Technol. 13, 207.
- [11] B.G. Salamov. 2004 J. Phys. D: Appl. Phys. 37 2496.
- [12] B.G. Salamov, M. Ozer, M. Kasap and Ş. Altındal. 1999 J. Phys. D: Appl. Phys. 32, 682.
- [13] V.I. Orbukh, N.N. Lebedeva, S. Ozturk, Ş. Uğur and B.G. Salamov. 2012 Optoelectron. Adv. Mat. 6(11-12), 947.
- [14] P. J. Bruggeman, F. Iza, R. Brandenburg. 2017 Plasma Sources Sci. Technol. 26, 1-31123002.
- [15] J. Hnilica, V. Kudrle, P. Vasina, J. Schafer and V. Aubrecht. 2012 J. Phys. D: Appl. Phys. 45, 1-9 055201.
- [16] V. I. Kolobov and A. Fiala. 1994 Phy. Rev. E 50, 3018.

HIGH PRESSURE EFFECT ON 3D TOPOLOGICALLY NONTRIVIAL SYSTEMS WITH MAGNETIC IMPURITIES

I.K. KAMILOV¹, L.A. SAYPULAEVA¹, N.V. MELNIKOVA², A.I. RIL³,
S.F. MARENKIN^{3,4}, Sh.M. ALIEV¹

¹*Institute of Physics, DFRC RAS, 367015, Russia, Republic of Dagestan
M. Yaragskogo str. 94, Makhachkala, Russia.*

²*Ural Federal University, Institute of Natural Sciences and Mathematics
Yekaterinburg, Russia 620002*

³*Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry, Russian Academy of Sciences
Moscow 119991*

⁴*National University of Sciences and Technology "MISIS", Moscow 119991
e-mail: l.saypulaeva@gmail.com*

The main results of investigations on the electrical and magnetoresistance (MS) of a composite material consisting of 70 mol. % Dirac half-metal Cd₃As₂ and of 30 mol. % ferromagnetic MnAs are presented at pressures up to 50 GPa in a high-pressure chamber with diamond anvils of the "rounded cone-plane" type, as well as magnetization at hydrostatic pressures up to 6 GPa in a "Toroid" high-pressure chamber, both in the room temperature mode and in the temperature range from 180 to 350 K at atmospheric pressure. A 4:1 methanol-ethanol liquid is used as the pressure transmitting agent. The elemental analysis of Cd₃As₂ composite + 30 mol% MnAs, reveals that most of the volume is Cd₃As₂ phase. The share of MnAs phase inclusions is less than 5%. The presence of a significant non-mixing region of the Cd₃As₂ and MnAs melt phases is the peculiarity of Cd₃As₂+MnAs.

With increasing the pressure, a negative magnetic resistance (MR) is observed in the whole considered baric region. The maximum of the negative MR is manifested in the pressure region of 22-26 GPa. Further increase in pressure up to a maximum pressure produces several extrema on the $\Delta R/R_0(P)$ curve, and the negative MR does not exceed 4%. In the pressure drop mode from 50 GPa, the baric dependence $\Delta R/R_0(P)$ is characterized by inversion of the MR sign: the negative MR is replaced by a positive one at about 40 GPa, and the maximum value of the positive MR ~5.3 % is observed near 20 GPa. Signs of instability of the Cd₃As₂ monoclinic structure due to its partial decomposition during decompression are determined. The prevailing negative MR over a wide pressure range of 16-50 GPa is discussed to be irrespective of the MnAs clusters effect, since the magnetic transformation observed in MnAs occurs at pressures lower than 1 GPa, and the magnetization decreases with further pressure increase up to 5 GPa.

Keywords: electric resistance, clusters, high pressures, magnetoresistance

INTRODUCTION

In recent years, the 3D topologically nontrivial systems with magnetic impurities, Dirac and Weyl semimetals, have become a new focus of condensed state physics. This is not surprising in view of that the elements of the II and V groups of the periodic system form chemical compounds exhibiting very interesting semiconductor properties [1]. A special group is formed by ternary and quaternary alloys, whose properties depend on the properties of the binary compounds presented in their composition. The II₃-V₂ group is the best known among II-V alloys: doping Cd₃As₂, Zn₃As₂ by Mn generates magnetic semiconductors (Cd_{1-x}Mn_x)₃As₂, (Zn_{1-x}Mn_x)₃As₂, (Cd_{1-x-y}Zn_yMn_x)₃As₂ [2, 3].

Today the physical properties of these materials are not fully understood. The goal of the present work is to research the high-pressure effect on a 3D topologically non-trivial system with magnetic impurities on the case of (Cd_{1-x}Mn_x)₃As₂ solid solution.

The electrical and magnetic properties of (Cd_{1-x}Mn_x)₃As₂ composites are largely determined by MnAs nanoclusters. These composites are

characterized by the metallic type of conductivity. It can be noted that the electrical resistivity of a number of composites decreases with growth in the magnetic field. This behavior is observed both at low temperatures and at room temperature, which indicates spin-dependent scattering mechanisms and exchange interaction of unknown nature between magnetic nanoclusters of the composite.

The investigations of Cd₃As₂ show the topological aspect of electrical properties [4 -6]. The valence and conduction bands of Cd₃As₂ are the conical structures intersecting near the Γ point at the Fermi level. The regions where the cone-shaped structures indicate the formation of 3D Dirac points are identified by the angular resolution photoelectron spectroscopy (Fig. 1).

Figure 2 presents the zone structure of α -Cd₃As₂ tetragonal phase which is typical to a Dirac semimetal. The figure shows that the Λ_6 and Λ_7 zones intersect to the left of the Γ point at the Fermi level, which results in the formation of a 3D Dirac cone.

Previously [9], Cd₃As₂ was considered as a narrow-gap semiconductor with electronic conductivity and high charge carrier mobility $\mu = 15000 \text{ cm}^2/(\text{V s})$.

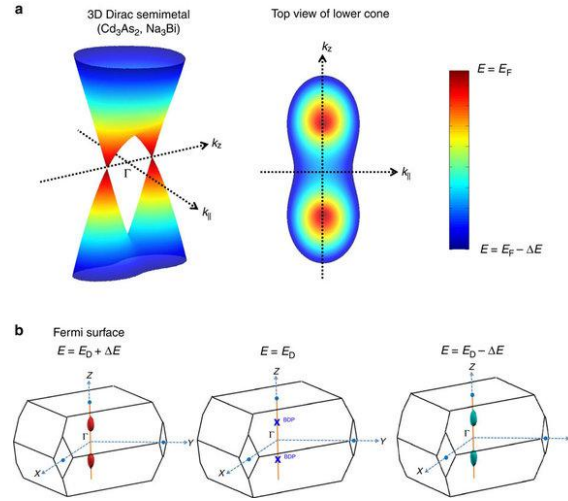


Fig. 1 - (a) Illustration of three-dimensional sputtering of a Dirac half-metal. (b) Scheme of the Fermi surface above the Dirac point, at the Dirac point and below the Dirac point [7]

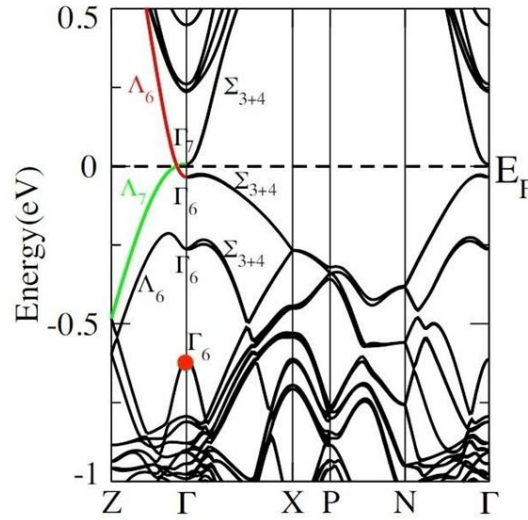


Fig. 2. The zone structure of α -Cd₃As₂ (*I*₄₁/*cd*) [8]

The electron transport properties of Cd₃As₂ reveal unexpected properties [10-12]: despite the high mobility of current carriers, the thermal conductivity of Cd₃As₂ appeared to be lower than the value of 4.17 W/m·K. The reason for this discrepancy is believed to be a large electron-phonon scattering. The thermal conductivity is usually by an order of magnitude higher for common metals or semi-metals with similar electrical conductivity.

Hall effect measurements [5] reveal the high mobility of electrons up to 180 cm²/V·s at room temperatures and to 134 cm²/V·s at 3 K. The carrier density is within the order of 10¹⁹ cm⁻³. The Seebeck coefficient (*S*) shows a negative sign indicating the n-type conductivity: *S* reaches 74.1 μV/K at room temperature, and the temperature dependence of *S*(*T*) is linear over a wide temperature range (2-380 K).

Measurements of electrical resistivity in Cd₃As₂ monocrystals under pressures up to 50.9 GPa proves that after an initial increase in pressure, the low-temperature resistivity begins to decrease at pressures above 6.4 GPa and the superconductivity appears at 8.5 GPa with *T*_c ≈ 2.0 K, which increases with

pressure and reaches a maximum value of 4.0 K at 21.3 GPa [6].

Manganese dissolves in Cd₃As₂ forming a wide range of ternary solid solutions (Cd_{1-x}Mnx)₃As₂ in a certain concentration range [13]. Exceeding the limiting concentration leads to the formation of a eutectic alloy containing, along with the solid solution (Cd_{1-x}Mnx)₃As₂, the nanoscale ferromagnetic inclusions of MnAs with a unit cell of symmetry *P*63/*mmc* and parameters *a* = 3.72 Å and *c* = 5.71 Å. At room temperature, MnAs undergoes a transition from hexagonal NiAs-type structure with *P*63/*mmc* symmetry to orthorhombic MnP-type structure with *Pnma* symmetry when the pressure reaches 0.45 GPa [14]. The high value of the Curie point in MnAs (318 K) makes it a promising material for application in various spin electronics elements functioning in the terahertz range [15-17].

SAMPLES AND EXPERIMENTAL METHOD

The synthesis of (Cd_{1-x}Mnx)₃As₂ crystals was performed by the vacuum-ampoule method from

Cd_3As_2 and MnAs compounds at the manganese arsenide melting temperature [18]. The samples were a composite consisting of nanoscale ferromagnetic MnAs pellets chaotically arranged in the volume of the Cd_3As_2 semiconductor matrix. The obtained samples were analyzed by X-ray diffraction and scanning electron microscopy (SEM). Elemental

analysis of the investigated composites showed that the Cd_3As_2 phase constitutes the major part of the volume. The fraction of MnAs phase inclusions occupies less than 5%. When interpreting the peaks, it was found that the X-ray diffraction pattern contained two main phases: α - Cd_3As_2 - tetragonal and MnAs - magnetic hexagonal (Fig. 3).

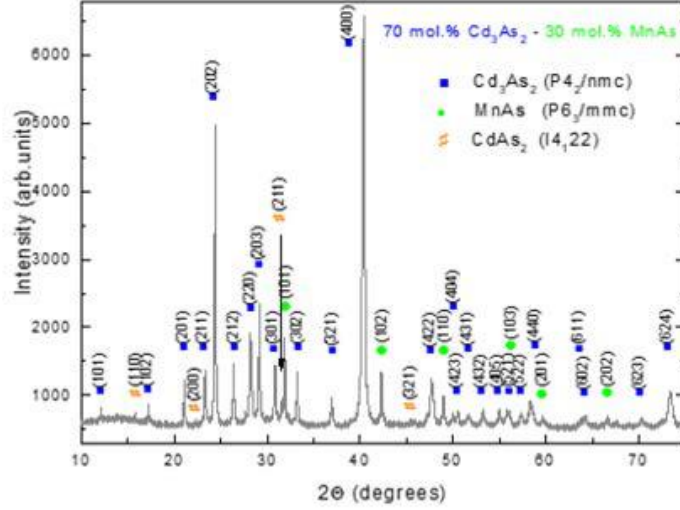


Fig. 3. X-ray diagram of the Cd_3As_2 + 30mol% MnAs sample.

There was also an insignificant amount of $CdAs_2$ phase present. Cd_3As_2 phase and Cd_3As_2 +MnAs eutectic were observed on microstructures. The peculiarity of Cd_3As_2 +MnAs was the existence of a significant non-mixing region of the Cd_3As_2 and MnAs melt phases.

The effect of high pressure on the electrophysical properties of composites was investigated in a high-pressure chamber (HPC) with diamond anvils of the “rounded cone-plane” type and in a high-pressure apparatus of the “Toroid” type. The measurement technique was described in detail in [19-13].

EXPERIMENTAL RESULTS AND DISCUSSION

Figure 4 depicts the pressure P dependence of $(Cd_{1-x}Mnx)_3As_2$ resistance R at two consecutive cycles of measurements (pressure rise and drope) in the room temperature region. The baric interval of 15-25 GPa of the first cycle is dominated by a significant decrease of R with increasing P . The resistivity in this pressure range varies almost linearly with the average rate $dR/dP=-24.9$ Ohm/GPa (Inset to Fig. 4).

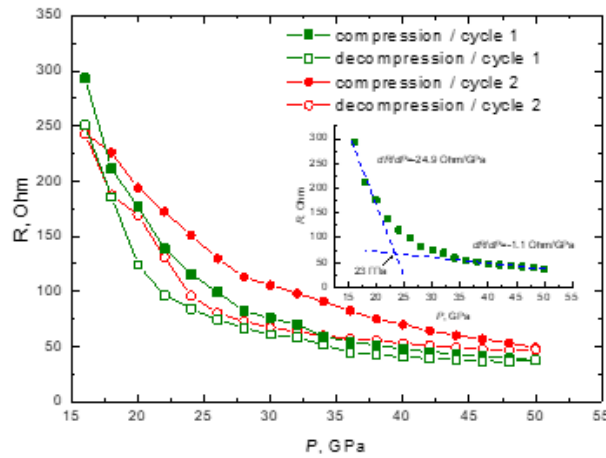


Fig. 4. Dependences of electrical resistivity of Cd_3As_2 + 30 mol% MnAs on pressure at two consecutive cycles of measurements. The inset shows the $R(P)$ dependence of the first cycle at pressure rise. The dashed lines stand for the determination of the dR/dP slopes.

The predominance of R hysteresis in $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mnx})_3\text{As}_2$ in the pressure range of 15-50 GPa seems to be rather interesting, as it may testify to the structural transition occurring in Cd_3As_2 , whose structure above 4.67 GPa is already monoclinic ($P21/c$) [6]. However, based on the X-ray diffraction data given in [6], the monoclinic phase is registered up to 17.8 GPa, while its predominance up to 50 GPa is only hypothetical.

Figures 5 show the field dependences of MR measured at different pressures up to 50 GPa and in magnetic fields up to 1 T at room temperature. The measurements are carried out in the pressure rise and drop modes, which allow us to qualitatively determine the relationship between the observed hysteresis in the $R(P)$ dependence and the MR behavior. The magnitude of the transverse MR is estimated by the formula

$$MR = 100 \cdot \frac{R(B) - R(0)}{R(0)},$$

where $R(B)$ is the electric resistivity in the transverse magnetic field with induction B , $R(0)$ is the electrical resistance in the absence of the magnetic field.

As follows from Fig. 5, a positive MR is observed in the composite at $P=16$ GPa. A similar positive MS in $\text{Cd}_3\text{As}_2 + 30$ mol% MnAs was previously observed under a relatively low pressure of 7.7 GPa, which was attributed to the competition between the influence of the Lorentz force and the

spin-dependent scattering of charge carriers on MnAs clusters [24]. This positive MR appears to extend up to 16 GPa, however, its magnitude gradually decreases. Further growth of P changes the sign of MR and the maximum value of negative MR $\sim 20\%$ is registered at 22 GPa in the 1 T field. It should be noted that in this pressure region there is a sharp change of the dR/dP rate on the $R(P)$ dependence and the cutoff intersection crossing of the approximation lines of low and high pressure regions correspond to the value of ~ 23 GPa (Inset to Fig. 4).

The maximum of the pressure-induced negative MR is realized in the relatively narrow pressure region of 22-26 GPa, and further at $P > 26$ GPa the negative MR does not exceed 4% at 38 GPa. The dynamics of this negative MR change at pressure rise appears ambiguous, since there are several local minima on the $\Delta R/R_0(P)$ dependence. At pressure relief, the field dependence of MR exhibits an inversion of a sign at $P > 40$ GPa (Fig. 5) and a maximum positive MR of $\sim 5.3\%$ is observed around 20 GPa. So, the change of the MR sign at pressure rise and release may indicate that in $\text{Cd}_3\text{As}_2 + 30$ mol% MnAs there is an irreversibility of structural properties due to partial decomposition of the composite after decompression. At the same time, the presence of negative and positive MR maxima is presumably related to the nature of phase transformations in the electronic subsystem of the composite [25].

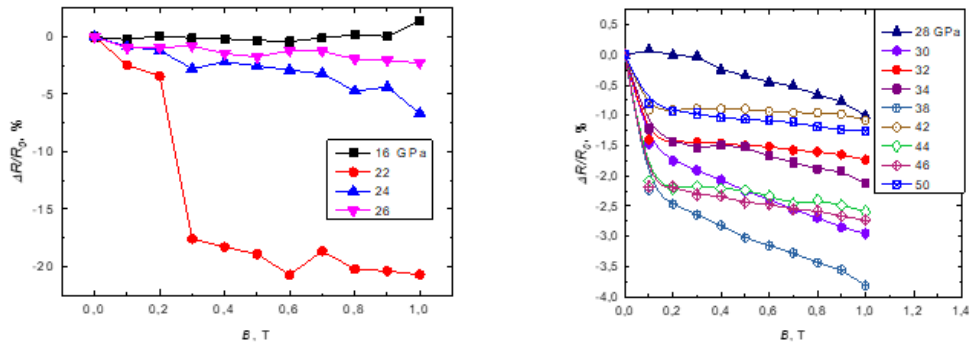


Fig. 5. Dependences of the magnetoresistance of $\text{Cd}_3\text{As}_2+30$ mol% MnAs on the magnetic field induction in the pressure range of 16-26 GPa (upper panel) and 28-50 GPa (lower panel) measured in the pressure rise mode.

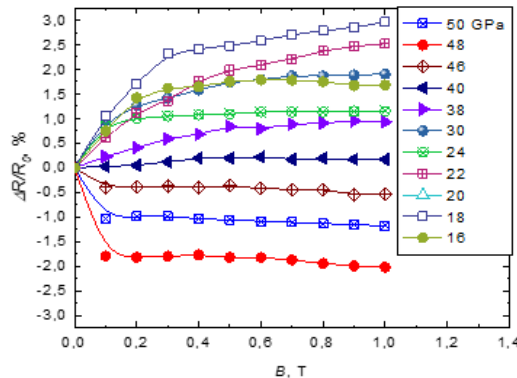


Fig. 6. The dependences of the $\text{Cd}_3\text{As}_2+30$ mol% MnAs magnetoresistance on the magnetic field induction at some fixed pressure values measured in the pressure relief mode.

We further note that the existence of MnAs clusters in the composite structure can somehow have a bearing on the nature of addressed MR. However, their magnetic behavior remains unclear in the considered pressure ranges from 15 to 50 GPa.

This is explained by that the magnetic phase diagram for the MnAs bulk compound is well studied only up to 1.1 GPa at present [26]. According to neutron studies, it is reported that the orthorhombic phase of the MnP type remains stable up to 1.26 GPa, where a spiral structure with the propagation vector $\tau_a = 0.125 \times 2\pi \times a^*$ is further formed [27]. As the study of the MnAs cluster magnetic properties at pressures comparable to the MR measurements (Fig. 5) is extremely difficult, our measurements of the isothermal magnetization are limited to the region up to 5 GPa.

An analogy between bulk MnAs compounds and MnAs clusters is found by investigating the temperature dependence of the magnetization $M(T)$. Fig. 6 shows the dependence of $M(T)$, measured in magnetic fields H up to 3.6 kE at atmospheric

pressure. The qualitative course of the curve is identical: there is a sharp increase in M near $T_C \approx 318$ K upon cooling, which is associated with the magnetic transformation from a nonmagnetic to a ferromagnetic state [26]. Increase in the field up to 3.6 kE initiate a slight shift of the Curie temperature toward high temperatures up to $T_C = 321$ K (defined as dM/dT for M curves in heating mode). This behavior confirms that MnAs nano-inclusions in the Cd_3As_2 matrix exhibit similar magnetic properties as in their bulk counterpart. At the same time, a remarkable feature of the ferromagnetic transition is the absence of the characteristic hysteresis M , which is an evidence of the first order phase transition in bulk MnAs. This magnetic transition occurs with the change of β (orthorhombic) nonmagnetic phase into α (hexagonal) ferromagnetic phase, accompanied with a hysteresis width of about 8-12 K. But, the absence of hysteresis M may be equivalent to the situation occurring in epitaxial layers of MnAs(001)/GaAs(111), in which the coexistence region of $\alpha+\beta$ phases prevails [28].

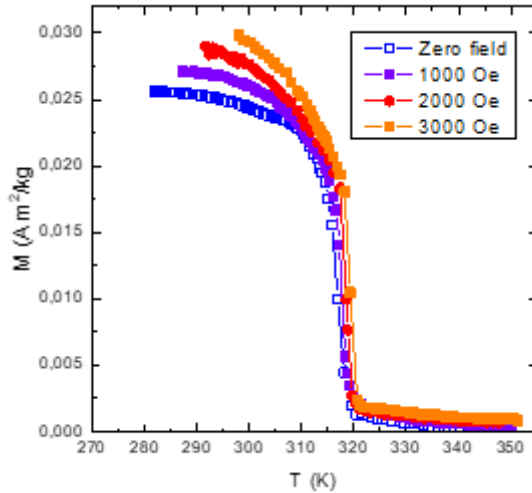


Fig. 7. The dependences of the Cd_3As_2+30 mol% MnAs magnetoresistance on pressure at different values of the transverse magnetic field induction up to $B=1$ T.

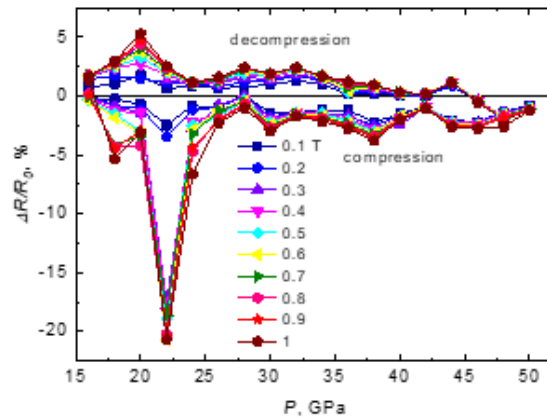


Fig. 8. The temperature dependence of the Cd_3As_2+30 mol% MnAs magnetization in the region of the paramagnetic to ferromagnetic transition measured in magnetic fields up to $H=0 - 3.6$ kE. The curves of successive heating and cooling cycles are shifted relative to each other.

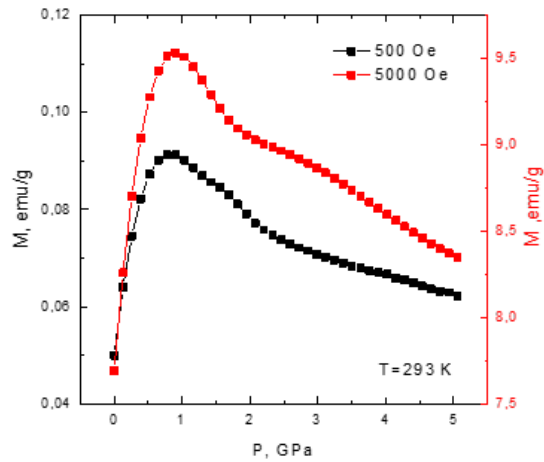


Fig. 9. The baric dependence of the magnetization at $T=293$ K measured under magnetic fields 500 E and 5 kE.

The dependence of isothermal M on P at $T=293$ K is illustrated in Figure 7. At atmospheric pressure ($P=0$ GPa), the values $M=0.05$ Am²/kg and $M=7.69$ Am²/kg are maintained in magnetic fields of 500 E and 5 kE, respectively. The M maxima are observed on the $M(P)$ dependence, which indicate the realization of magnetic transformation occurring in MnAs clusters. The increase of M reaches 80% in the region of maxima at $H=500$ E and 23% at $H=5$ kE from the initial values of M . In addition, the phase transition region shifts toward high pressure from $P=0.77$ GPa to $P=0.9$ GPa with increasing H . Such a prevailing trend indicates the change of the ferromagnetic state of MnAs clusters to the antiferromagnetic ordering.

The antiferromagnetic phase is a consequence of the metamagnetic transition, which can be induced by a simultaneous effect of H and P below T_C in the volume MnAs compound.

Based on observation that the further behavior of $M(P)$ demonstrates a gradual decrease up to 5 GPa (Fig. 7), one can conclude that MnAs clusters under higher pressure conditions are likely to be in a non-magnetic state. For this reason, it can be argued that the appearance of negative MR in the pressure range of 16-50 GPa (Fig. 5) should not be associated with the influence of MnAs clusters. On the other hand, it is worth noting that the Mn impurity has the ability to dissolve in the Cd₃As₂ matrix in an extremely minimal amount. In such a case, the negative MR arises due to the topological phase transition caused by the magnetic impurity and the formation of magnetic polarons, which support spin-dependent scattering in doped Cd₃As₂. For a more detailed analysis of the MR

nature in Cd₃As₂ + 30 mol% MnAs, including the change of sign and predominance of pronounced maxima on the $\Delta R/R_0(P)$ dependence, it is required a clearer understanding of the influence of the Mn impurity on the zone structure and density of states in the Cd₃As₂ monoclinic phase.

CONCLUSION

The resistance and MR feature at high pressure up to 50 GPa, as well as the magnetic properties of MnAs clusters up to 5 GPa are investigated in Cd₃As₂ + 30 mol% MnAs composite. The measurement of R at cyclic P revealed a hysteresis in a wide range of pressures, which is associated with the instability of the monoclinic structure of Cd₃As₂ at $P>16$ GPa with its partial decomposition after pressure relief. This behavior is confirmed by the results of MR measurements at pressure rise and pressure drop, which show a change of the MR sign from negative to positive. The $\Delta R/R_0(P)$ dependence also shows pronounced MR maxima, in particular, at pressure increase the negative MR maximum is $\sim 20\%$ and at pressure relief the positive MR maximum is $\sim 5.3\%$, the origin of which is most likely caused by the influence of magnetic Mn impurity as a result of topological phase transformation. The influence of magnetic MnAs clusters on the MR features in the range of 16-50 GPa is excluded, as according to the data of $M(P)$ dependence the magnetic transition to antiferromagnetic state occurs in the clusters below 1 GPa and up to 5 GPa there is a monotonous decrease of M .

[1] E.K. Arushanov. II₃V₂ Compounds and alloys, Prog. Crystal Growth and Charact. 1992, Vol. 25, pp. 131-201
 [2] T. Schumann, M. Goyal, H. Kim. [et al.]. Molecular beam epitaxy of Cd₃As₂ on a III-V substrate. APL Materials. – 2016. – V. 4. – P. 126110.

[3] S.F. Marenkin, V.M. Trukhan. Phosphides, arsenides of zinc and cadmium. - Minsk, 2010. - C. 224
 [4] Z. Cheng, Z. Tong, L. Sihang. [et al.]. Unexpected low thermal conductivity and large power factor in Dirac semimetal Cd₃As₂. Chin. Phys. B. – 2016. – V. 25, № 1 – P. 017202.

- [5] *S. Borisenko, Q. Gibson, D. Evtushinsky, V. Zabolotnyy, B. Buchner, R.J. Cava.* Experimental Realization of a Three-Dimensional Dirac Semimetal. *Phys. Rev. Lett.* 113, (2014) 027603.
- [6] *H. Lanpo, J. Yating, Z. Sijia [et al.].* Pressure-induced superconductivity in the three-dimensional topological Dirac semimetal Cd_3As_2 . *Quantum Materials.* – 2016. – V. 14. – P. 16014.
- [7] *M. Neupane, S.Y. Xu, R. Sankar, N. Alidoust, G. Bian, C. Liu, I. Belopolski, T.R. Chang, H.T. Jeng, H. Lin, A. Bansil, F. Chou, M.Z. Hasan.* Observation of a three-dimensional topological Dirac semimetal phase in high-mobility Cd_3As_2 . *Nature Communications.* 2014. – T. 5. – № 1. – C. 3786. – DOI: 10.1038/ncomms4786.
- [8] *Z. Wang, H. Weng, Q. Wu, X. Dai, Z. Fang.* Three-dimensional Dirac semimetal and quantum transport in Cd_3As_2 . *Physical Review B.* 2013. – T. 88. – № 12. – C. 125427. – DOI: 10.1103/PhysRevB.88.125427.
- [9] *A.J. Rosenberg, T.C. Harman.* Cd_3As_2 —A Noncubic Semiconductor with Unusually High Electron Mobility // *Journal of Applied Physics.* 1959. – T. 30. – № 10. – C. 1621–1622. – DOI: 10.1063/1.1735019.
- [10] *Z.K. Liu, J. Jiang, B. Zhou, Z.J. Wang, Y. Zhang, H.M. Weng, D. Prabhakaran, S. K. MO, H. Peng, P. Dudin, Y.L. Chen.* A stable three-dimensional topological Dirac semimetal Cd_3As_2 , *Nat. Mater.* 13 (2014) 677–681, <https://doi.org/10.1038/nmat3990>.
- [11] *X. Wan, A.M. Turner, A. Vishwanath.* Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates, *Phys. Rev. B* 83 (2011) 205101, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.205101>.
- [12] *Hong Lu, Xiao Zhang, Yi Bian, Shuang Jia.* Topological phase transition in single crystals of $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$, *Sci. Rep.* 7 (2017) 3148, <https://doi.org/10.1038/s41598-017-03559-2>.
- [13] *A.I. Ril, S.F. Marenkin.* Cadmium Arsenides: Structure, Synthesis of Bulk and Film Crystals, Magnetic and Electrical Properties (Review) / *Russ. J. Inorg. Chem.* 2021. V. 66. № 14. P. 2005. DOI: 10.1134/S0036023621140059.
- [14] *I.F. Gribanov, A. Zavadsky, A. Sivachenko.* P. Low-temperature magnetic transformations in orthorhombic manganese arsenide. / *FTN*, 1979. T. 5. №. 10. C. 1219.
- [15] *C. Spezzani, E. Ferrari, E. Allaria, F. Vidal, A. Ciavardini, R. Delaunay, F. Capotondi, E. Pedersoli, M. Coreno, C. Svetina, L. Raimondi.* Magnetization and microstructure dynamics in $\text{Fe}/\text{MnAs}/\text{GaAs}$ (001): Fe magnetization reversal by a femtosecond laser pulse. / *Phys. Rev. Lett.* 2014. V.113. № 24. P. 247202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.247202.
- [16] *J. Hubmann, B. Bauer, H.S. Körner, S. Furthmeier, M. Buchner, G. Bayreuther, F. Dirnberger, D. Schuh, C.H. Back, J. Zweck, E. Reiger.* Epitaxial growth of room-temperature ferromagnetic MnAs segments on GaAs nanowires via sequential crystallization. *Nano Lett.* 2016. V. 16. № 2. P.900. DOI: 10.1021/acs.nanolett.5b03658.
- [17] *V.M. Novotortsev, S.F. Marenkin, I.V. Fedorchenko, A.V. Kochura.* Physical and chemical bases of synthesis of new ferromagnetics from chalcopyrite $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{IV}}\text{C}^{\text{V}}_2$. / *Inorganic chemistry Journal.* 2010. T. 55. № 11. C. 1868-1880. DOI: 10.1134/S0036023610110136
- [18] *A.I. Ril, A.V. Kochura, S.F. Marenkin.* Proceedings of South-West State University. Series: Technics and technologies 7, 120 (2017).
- [19] *L.F. Vereshchagin, E.N. Yakovlev, B.V. Vinogradov, G.N. Stepanov, K.Kh. Bibaev, T.I. Alaeva, V.P. Sakun.* High Temp.–High Press. 6, 499 (1974).
- [20] *A.N. Babushkin, G.I. Pilipenko, F.F. Gavrilov.* *J. Phys.: Condens. Matter.* 5, 8659 (1993).
- [21] *A.N. Babushkin.* High Press. Res. 6, 349 (1992).
- [22] *L.G. Khvostantsev, L.P. Vereshchagin, A.P. Novikov,* High Temp.-High Pressure, 9(6), 637 (1977).
- [23] *A.Yu. Mollaev, L.A. Saipulaeva, R.K. Arslanov, S.F. Marenkin.* *Inorganic Materials*, 37(4), 405 (2001)].
- [24] *A.G. Alibekov, A.Yu. Mollaev, L.A. Saipullaeva, S.F. Marenkin, I.V. Fedorchenko, A.I. Ril.* Hall effect and magnetoresistance in the $\text{Cd}_3\text{As}_2 + \text{MnAs}$ (30%) composite at high pressure // *Journal of Inorganic Chemistry*, 2017, Vol. 62, № 1, pp. 1-5.
- [25] *N.V. Melnikova, A.V. Tebenkov, G.V. Sukhanova, A.N. Babushkin, L.A. Saipulaeva, V.S. Zakhvalinsky, S.F. Gabibov, A. G. Alibekov, A. Yu. Mollaev.* Thermoelectric properties of ferromagnetic semiconductor based on Dirac semimetal Cd_3As_2 at high pressure // *Solid State Physics*, 2020, Vol. 62, Iss. 6, 03,05,11.
- [26] *N. Menyuk, J.A. Kafalas, K. Dwight, and J.B. Goodenough.* *Phys. Rev.* 177, 942 (1969).
- [27] *F. Andresen, H. Fjellvåg, B. Lebech.* 43(2), 158-160 (1984).
- [28] *N. Mattoso, M. Eddrief, J. Valada, A. Ouerghi, D. Demaille, V. H. Etgens, and Y. Garreau.* *Phys. Rev. B* 70, 115324 (2004).

DETERMINATION OF THE MAGNETIC ANISOTROPY CONSTANT IN MICROPARTICLES OF POWDER-BASED PERMANENT MAGNETS BY MOSSBAUER SPECTROSCOPY

Sh.M. ALIEV, Zh.G. IBAEV

*Institute of Physics Dagestan Scientific Center, Russian Academy of Sciences,
Makhachkala. Dagestan. Russia*

e-mail: ibaev77@mail.ru, Tel.: +79285494601

A new Mossbauer technique for determining the uniaxial magnetic anisotropy constant in micro-particles of powder-based permanent magnets has been developed and experimentally verified.

The technology of anisotropic powder-based permanent magnets includes alignment of the monodomain uniaxial panicles of a magnetically hard material in a magnetic field, followed by pressing the material in this oriented state [1]. As a result, the material acquires an axial magnetic texture whose degree of perfection is characterized by the texture scattering angle θ , or the relative remanent magnetization $\frac{M_r}{M_s}$ (M_r , and M_s , being the remanent and saturation magnetization, respectively).

Previously [2], we developed a method based on the Mossbauer spectroscopy for determining θ_t and $\frac{M_r}{M_s}$. Using the results of that study, we propose a new technique for measuring the uniaxial magnetic anisotropy constant K of the microparticles of powder-based permanent magnets. The K value determines the coercive force and the specific energy of a permanent magnet [1].

The internal energy per unit volume of a permanent magnet in the external magnetic field H is [1]

$$E_U = \frac{1}{2}HM - \frac{1}{2}NM^2, \quad (1)$$

where M and N are the magnetization and demagnetization factors of the given magnet, respectively. Rotation of the magnetization vectors of panicles relative to their easy axes under the action of the field H is hindered by the magnetic anisotropy energy [1]

$$E_A = K\sin^2\varphi, \quad (2)$$

where φ is a certain average angle of deviation of the magnetization vectors from easy axes in the field H . The balance of E_U and E_A values yields

$$K = \frac{HM - NM^2}{2\sin^2\varphi}, \quad (3)$$

Based on the conclusions derived in [2] and the relation obtained in that study.

$$\cos^3\theta_t + \frac{9k-12}{3k+4}\cos\theta_t + \frac{8-12k}{3k+4} = 0, \quad (4)$$

we can determine the magnetic texture scattering angle θ_t , using the parameter k determined as the ratio of areas under the second and first (or fifth and sixth) lines of the ^{57}Fe Mössbauer spectrum ($k = S_{2(5)}/S_{1(6)}$). The sample for Mössbauer measurements represents a thin plate cut from a magnet in the plane perpendicular to the axis of texture.

Once the texture scattering angle θ_t is known, it is possible to determine the relative remanent magnetization as [2]

$$\frac{M_r}{M_s} = \frac{1 + \cos\theta_t}{2}, \quad (5)$$

The sample of a textured magnetic material can be formally represented by a single crystal plate with the magnetization vector M_s , making an angle $\varphi_0 = \arccos(M_r/M_s)$ with the normal to the sample surface (Fig. 1a). Using this approximation, it is possible to reduce the angles θ_t , between the axis of texture and easy axes to an

average angle φ_0 , which simplifies solution of the problem. By the same token, the relative magnetization of a magnet in the field H applied along the texture axis (Fig. 1b) can be expressed as

$$\frac{M_r}{M_s} = \frac{1 + \cos\theta_t}{2} = \cos\varphi_1, \quad (6)$$

Using relations (3), (5) and (6) and taking into account $\varphi = \varphi_0 - \varphi_1$ (Fig. 1), we finally obtain

$$K = \frac{M_s \cos\varphi_1 (H - M_s \cos\varphi_1)}{2\sin^2(\varphi_0 - \varphi_1)}, \quad (7)$$

The proposed method was verified on a 16BA-190 grade magnet based on barium ferrite $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ [3]. The sample had the shape of a 70- μm -thick plate with a diameter of 15 mm, cut from the magnet along the plane perpendicular to the axis of texture. The measurements in a magnetic field were performed using a water-cooled solenoid. The source of γ -quanta was ^{57}Co in a chromium matrix, with a beam divergence angle not exceeding 5° .

Figure 2 shows the Mossbauer spectra of the sample measured with and without applied magnetic field. The spectra exhibit a superposition of five Zeeman

man sextets related to iron ions in five magnetic sublattices of barium ferrite [41]. From these spectra, we have obtained $\theta_t = 40^\circ$, $M_r/M_s = 0.88$, and $\varphi_0 = 28^\circ$. In a magnetic field with $H = 2,1$ kOe, the corresponding values are $\theta = 19^\circ$, $M_r/M_s = 0.97$, and $\varphi_1 = 12^\circ$. For the given magnetic material, $4\pi M_r = 3000$ G [3] and, taking into account the relative remanent

magnetization. $M_s = 270$ G. Substituting these data into (7) yields $K = 3.3 \times 10^6$ erg/cm³. This value coincides with the values of the anisotropy constant obtained by the torsional pendulum and the ferromagnetic resonance techniques for single crystal ferrite BaFe₁₂O₁₉ [5].

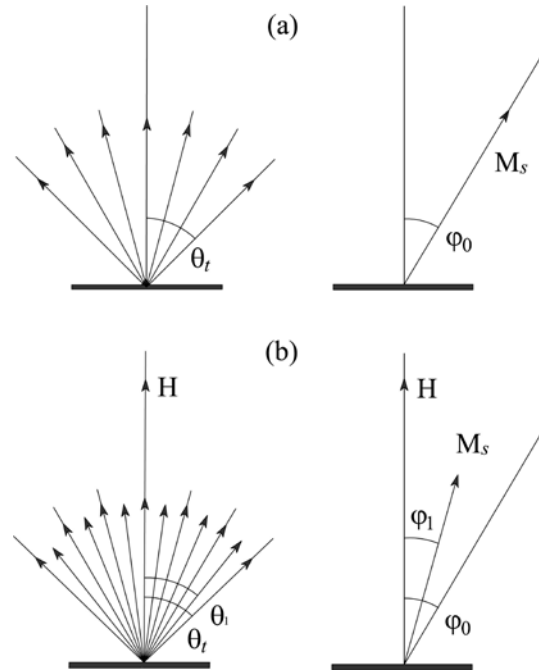


Fig. 1. Distribution of the particle magnetization vector directions relative to the texture axis in a powder-based permanent magnet (left diagrams) and in a single crystal magnet with the easy axis making an angle φ_0 with the normal to the sample plane: (a) in the remanent magnetization state (demagnetizing field assumed equal to zero); (b) in a magnetizing field H applied along the texture axis.

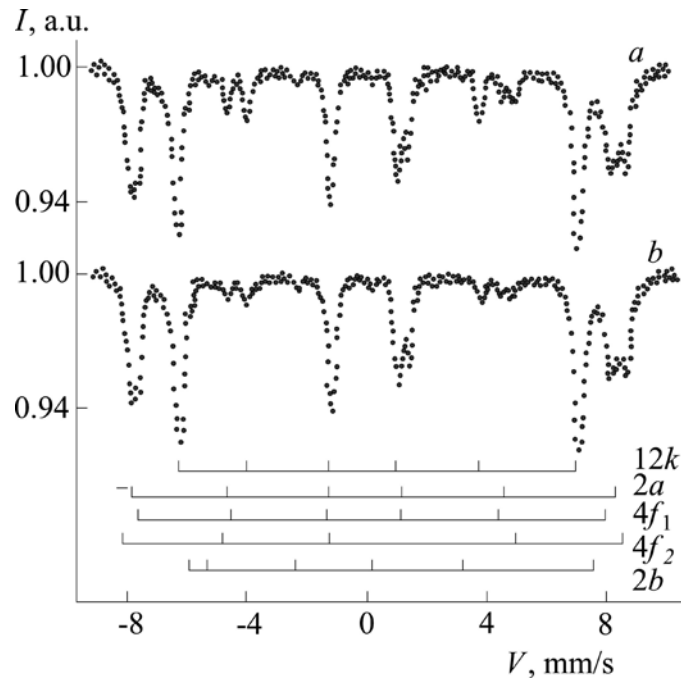


Fig. 2. ⁵⁷Fe Mössbauer spectra of a 16BA-190 permanent magnet measured (a) without applied magnetic field and (b) in a field of $H = 2.1$ kOe parallel to the texture axis. The direction of the beam of γ -quanta coincides with the axis of texture.

An advantage of the method described above is the possibility to perform measurements on the commercial samples, which is very important for testing permanent magnets in order to control and optimize their technical characteristics. Note that the proposed technique has nothing preventing its use for determining the uniaxial anisotropy constants of magnetically hard materials of some other systems

(Fe-Co-Ni-Al-Cu, Fe-Co-Cr, etc.) widely used in permanent magnet technology [1].

Acknowledgments. The authors are grateful to K.M. Aliev and Sh.M. Ismailov for fruitful discussions.

This study was supported by the Russian Foundation for Basic Research (project no. 02-02-17817) and by programs of the Ministry of Industry, Science and Technology of the Russian Federation.

-
- [1] *V.V. Sergeev and T.I. Bulygina. Magnetically Hard Materials* (Energiya, Moscow, 1980).
- [2] *Sh.M. Aliev and I.K. Kamilov. Pis'ma Zh. Tekh. Fiz.* 20 (5), 9 (1994) [Tech. Phys. Lett. 20. 178 (1994)1].
- [3] *A.A. Preobrazhenskii and E.G. Bishard. Magnetic Materials and Elements* (Vysshaya Shkola, Moscow, 1986).
- [4] *P.P. Kirichok, O.F. Verezhak, M.B. Voronina, et al., Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Fiz., № 1,93* (1982).
- [5] *J. Smit and H. P. J. Wijn. Ferrites* (Wiley, New York, 1959; Inostrannaya Literatura, Moscow, 1962).

THERMOELECTRICAL PROPERTIES OF Mn-DOPED n-Cd₃As₂I.K. KAMILOV¹, L.A. SAIPULAEVA¹, N.V. MELNIKOVA², A.I. RIL³,
S.F. MARENKIN^{3,4}¹*Institute of Physics, DFRC RAS, 367015, Russia, Republic of Dagestan
M. Yaragskii Str. 94, Makhachkala, Russia.*²*Ural Federal University, Institute of Natural Sciences and Mathematics
Yekaterinburg, Russia*³*Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry, Russian Academy of Sciences
Moscow, Russia*⁴*National University of Sciences and Technology "MISIS", Moscow
e-mail: l.saypulaeva@gmail.com*

The paper reports the findings on the baric dependences of the thermoelectromotive force (thermo-emf) of the Cd₃As₂ + *n* mol% MnAs granular structures, *n*=10, 20, 30 and 44.7, where peculiarities in the thermo-emf behavior (extrema, inflection points on the S(P) curves or pressure hysteresis) are observed. The peaks are observed in Cd₃As₂ + *n* mol% MnAs in the pressure range P= (28-35) GPa for the cases *n*=10 and *n*=20; in Cd₃As₂ + 30 mol. % MnAs at P= (20-35) GPa; in Cd₃As₂ + 44.7 mol. % MnAs at P=(30-35) GPa. At pressures higher than 40 GPa, the thermo-emf changes weakly or practically does not vary both at increasing and subsequent decreasing pressures.

Keywords: thermoelectromotive force, electric resistance, clusters, high pressures, Seebeck coefficient, relaxation time.

INTRODUCTION

The Dirac Cd₃As₂ semimetal has drawn the attention of researchers with its intriguing properties: nontrivial zone structure [1], unusually high electron mobility, much higher than 10⁴ cm²/(B·s) at room temperature and 10⁶ cm²/(B·s) at low temperatures [2]. Despite its high mobility, the Cd₃As₂ thermal conductivity is found to be lower than 4.17 W/m·K [3]. The temperature dependence of the electrical resistivity in typical monocrystal Cd₃As₂ reveals a behavior of a semimetal with saturation at low temperatures and metallic type of the conductivity. The study of Seebeck coefficient (S) in [3] shows the negative sign of S indicating electronic type of the conductivity. The S value achieves 74.1 μV/K at room temperature. The temperature dependence of the Seebeck coefficient S(T) is linear over a wide temperature range (2-380 K) [3]. The characteristics of electrical resistivity and thermo-emf of Cd₃As₂ thin films with 700 nm in thick investigated in [4] are slightly different from the corresponding characteristics for bulk samples. When temperature grows, the specific electrical resistivity first increases and then begins to fall at T = 30K. The temperature dependence of the thermo-emf (S) in [4] confirms the thermal activation process. At low temperatures, the positive sign of S specifies that holes

are the dominant carriers, while at T>57 K, the sign of S becomes negative indicating that thermally activated electrons become the dominant carriers.

Cd₃As₂ containing MnAs magnetic granules are attractive for spintronics, since these structures consist of alternating magnetic and nonmagnetic nanodomains and are distinguished by highly mobile electrons. The fundamental interest in the study of such structures is determined by a significant role of magnetic exchange interactions in them along with the known and widely studied interactions in semiconductor structures.

This work presents a study of the thermoelectric properties of Cd₃As₂ + *n* mol% MnAs, *n*=10, 20, 30, and 44.7, in particular, the behavior of the Seebeck coefficient versus pressure. Previously, the magnetization, the electrical resistivity, the Hall coefficient and their temperature dependences were researched in structures of similar composition [5-7].

The aim of the work is to evaluate the effect of pressure on the thermoelectric properties of Cd₃As₂ + *n* mol% MnAs, *n*=10, 20, 30, and 44.7.

TECHNIQUE OF THERMO-EMF RESEARCH

Bulk samples of Cd₃As₂ - MnAs were obtained at the N.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry, Russian Academy of Sciences [8].

Table 1.

Composition of synthesized samples of Cd₃As₂ - MnAs system [8]

№ of sample	Content of MnAs, mole %	Elemental composition of samples according to EDRS results, at.%		
		Cd	As	Mn
1	10	58.7	39.9	1.4
2	20	51.3	41.4	7.3
3	30	50.3	41.5	8.2
4	44.7	48.6	40.0	11.4

The composition of some samples is given in Table 1 [8].

Pressures up to 50 GPa were created in high-pressure chambers (HPC) with anvils made of artificial diamonds of the “carbonado” type, which are good conductors and allow one to research the electrical properties of samples placed in HPC.

The mechanism of generating pressures up to 50 GPa, technical characteristics and calibration of HPCs were described in detail in [9-11].

The principle scheme of thermo-emf measurements in a high-pressure chamber with anvils of the “rounded cone-plane” type was detailed in [12]. All measurements were carried out at room

temperature. The temperature gradient across the sample did not exceed 1 K.

RESULTS AND DISCUSSIONS

Diffraction patterns of $\text{Cd}_3\text{As}_2 + n \text{ mol } \% \text{ MnAs}$ granular structures $n=10, 20, 30$ and 44.7 are depicted in Fig. 1. The main phases are Cd_3As_2 and MnAs , and also it can be mentioned the existence of CdAs_2 phase in residual amounts.

Electron microscopic analysis of $\text{Cd}_3\text{As}_2 + n \text{ mol } \% \text{ MnAs}$ allowed to detect the presence of MnAs particles from 5 to 110 nm in $\text{Cd}_3\text{As}_2 + 44.7 \text{ mol } \% \text{ MnAs}$ (Figure 2 d).

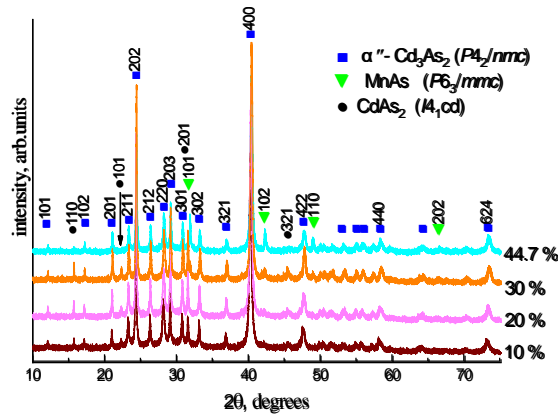


Fig. 1. X-ray patterns of $\text{Cd}_3\text{As}_2+n \text{ mol}\% \text{ MnAs}$ samples.

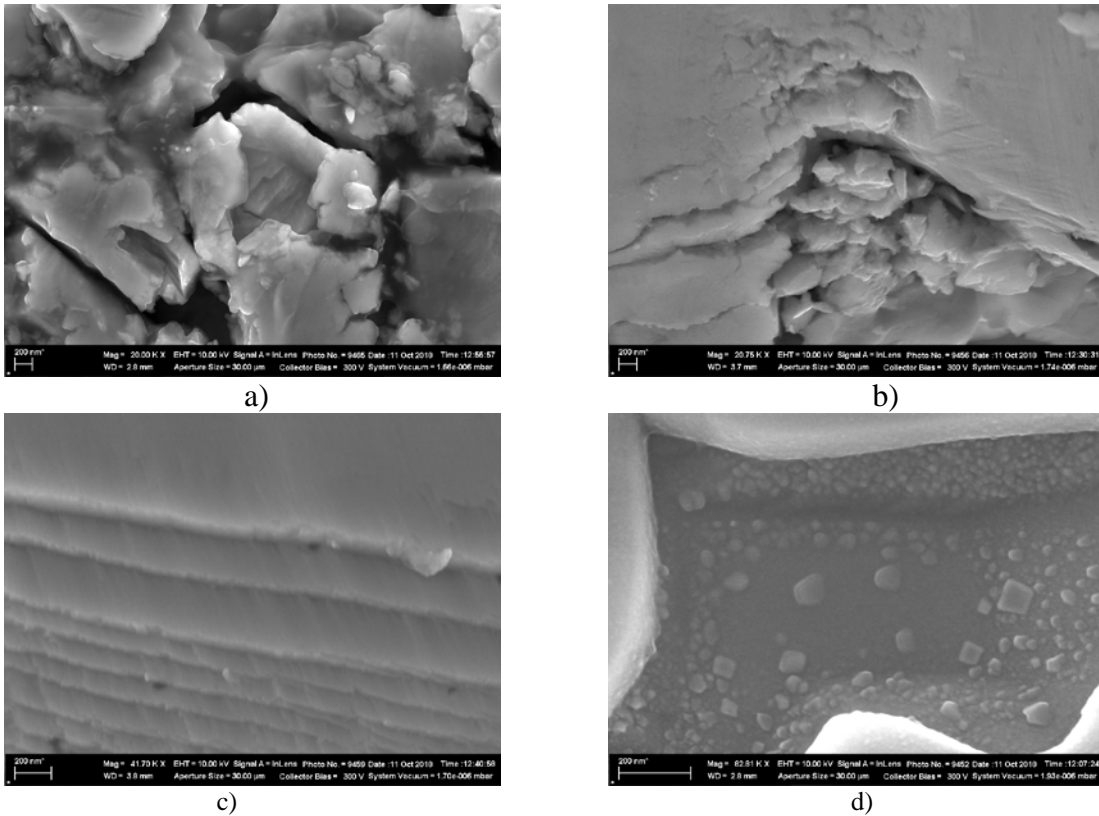


Fig. 2. SEM images of splittings of $\text{Cd}_3\text{As}_2+n \text{ mol}\% \text{ MnAs}$ samples a) $n=10$, b) $n=20$, c) $n=30$, d) $n=44.7$

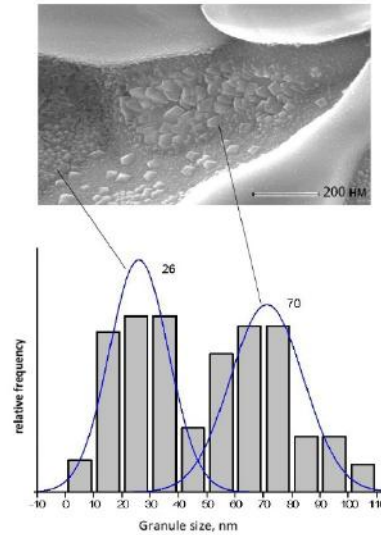


Fig. 3. Size distribution of MnAs nanoclusters in the Cd₃As₂+44.7 mol%MnAs composite and one example of the SEM images of a sample spall/chip.

At $n < 44.7$, the granules failed to be visualized in electron microscopic investigations (Figure 2 a, b, c), probably because of their small size. The analysis of MnAs nanocluster sizes in the granulated Cd₃As₂ + 44.7 mol % MnAs revealed a “two-humped” (bimodal) particle size distribution: characteristic diameters of MnAs nanoclusters are 20-30 nm and 50-90 nm (Figure 3).

It is most likely that particles larger than 50 nm can be located in the near-surface regions rather than in the material volume, as the opposite would lead to a significant increase in the deformation energies of both the matrix itself and the nanoclusters.

Proceeding from this, one can expect that the bulk physical properties of the granulated Cd₃As₂+44.7 mol % MnAs may be determined by the properties of MnAs nanoclusters with 20-30 nm in size. Previously, the nanocluster sizes of the order 30-50 nm was reported for Cd₃As₂+80 mol % MnAs, and their size was estimated with the Debye-Scherrer formula, using the obtained X-ray diffraction patterns and taking into account the small value of the coercivity (less than 20 E) estimated from the magnetic field dependences [13]. Applying the method of magnetic force microscopy, the authors [8] succeeded in determining the presence of magnetic inclusions for Cd₃As₂+ n mol % MnAs samples with MnAs content above 10 mol%, and the concentration and size of magnetic impurity inclusions grew as the Mn content increased. For instance, the average size of MnAs granules in the Cd₃As₂ + 70 mol % MnAs material was 50 nm.

Thus, the materials Cd₃As₂ + n mol % MnAs are granulated structures consisting of nanosize ferromagnetic MnAs granules (whose sizes decrease with decreasing n , which is coincided with the conclusions of work [8]) chaotically located in the volume of the Cd₃As₂ semiconductor matrix.

Investigations on the baric dependences of the Seebeck coefficient for Cd₃As₂ + n mol% MnAs composites are carried out by the following scheme: we gradually increase the pressures from ~ 4 GPa to the maximum ~ 50 GPa at certain baric intervals, keeping

the sample for some time at each value of the increasing pressure before taking the measurement, and then at the subsequent gradual decrease in pressure to the initial one. Data on the transport properties of granulated structures at pressures up to 50 GPa clarified that the main carriers at high pressures up to 50 GPa are holes in Cd₃As₂+ n mol%MnAs samples ($n = 10, 20, 30$) in the material with $n=44.7$ are electrons. The Seebeck coefficient value and its sign for the structure with $n=44.7$ are typical for the investigated material, which is a semiconductor matrix (Cd₃As₂ is an n-type narrow-gap semiconductor) with ferromagnetic MnAs granules. The measurement results are summarized in Figure 4. For materials with a lower content of MnAs granules, hole carriers are predominant under pressure exceeding 3 GPa. On the coexistence of hole and electron carriers and the asymmetry in their mobility (associated with the zone structure) were reported by the authors [14, 15] when exploring the properties of Cd₃As₂ thin (200-700 nm thick) monocrystal films and by the authors [1] when conducting theoretical studies of the zone structure of Cd₃As₂ crystals. The effect of the predominance of hole carriers on the surface and electron carriers in the material volume was discussed in [15] when studying the transport properties of Cd₃As₂ thin films under certain configurations of magnetic and electric fields. The issue on the observed effect of the hole carrier predominance over electronic carriers in a number of investigated composites, the occurrence of which is most basically caused by processes in the Cd₃As₂ matrix and considering that the sample studied under the pressures up to 50 GPa is 10-30 μ m in thickness, requires further experimental and theoretical investigations. All materials manifest peculiarities in the thermo-emf behavior (extrema, inflection points on the S(P) curves or pressure hysteresis) in the range of 28-35 GPa for $n=10$ and $n=20$, in the interval of 20-35 GPa for $n=30$, and in the interval of 30-35 GPa for $n=44.7$. The thermal-emf changes slightly or practically remains the same, when the pressure exceeds 40 GPa, both at increasing and subsequent decreasing pressures.

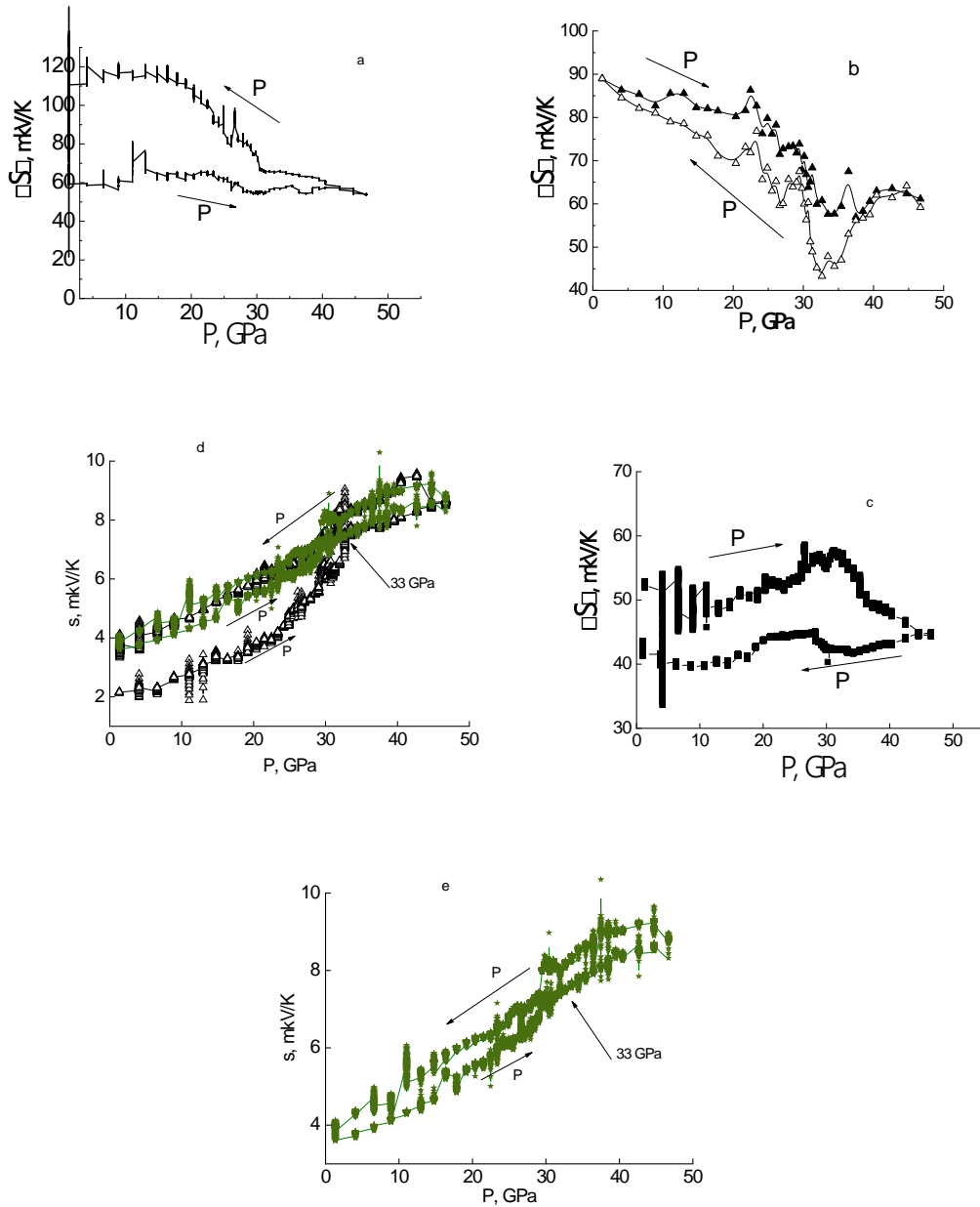


Fig. 4. Dependences of the Seebeck coefficient on monotonically increasing and decreasing pressure of composites a) $\text{Cd}_3\text{As}_2 + 10\%$ mol. MnAs, b) $\text{Cd}_3\text{As}_2 + 20\%$ mol. MnAs, c) $\text{Cd}_3\text{As}_2 + 30\%$ mol. MnAs; d, e) $\text{Cd}_3\text{As}_2 + 44.7\%$ mol. MnAs.

Note that Figure 4. (c) depicts features as inflection points in the pressure range of 20-35 GPa. The samples with other amounts of MnAs (see Figure 4. a, b) also show similar changes in this pressure range. This behavior can be explained by a structural or electronic phase transition occurring in this pressure range.

When high hydrostatic pressure is applied and the system is placed in an electric field, the relaxation of the nonequilibrium system and a gradual transition to the equilibrium state will be observed. Relaxation processes of thermo-emf are well described (correlation coefficient ~ 0.97) by the exponential dependence (see Figure 5)

$$S = S_0 + A \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), \quad (1)$$

where τ is the constant equal to the relaxation time, t is the time.

The experimental results show that an increase in relaxation time is registered in the range of 30-33 GPa in $\text{Cd}_3\text{As}_2 + n$ mol% MnAs composites, which is associated with a possible structural or electronic phase transition. As an example, Fig. 5 shows the $S(t)$ dependences for the composite $\text{Cd}_3\text{As}_2 + 30\%$ mol. MnAs. The negative sign of the thermo-emf (Fig. 5) corresponds to hole carriers at the appropriate connection scheme of the devices to the employed setup described in [12].

The relaxation time of a thermo-emf constant value in the pressure range from 4 to 30 GPa is extremely short (a few seconds). And then, with further increase in pressure, it grows and remains at the level of 14-32 sec. up to approximately 42 GPa, then reduces to small again.

In the case of Cd₃As₂ + 44.7% mol. MnAs, the maximum values of the electrical resistance relaxation time are seen in the range of 30-33 GPa (see Figure 6).

When estimating the relaxation times of thermo-emf under pressure, the time dependences of thermo-

emf at fixed pressure are better approximated by the first order exponent $S(t)=Ae^{-t/\tau}$. When attempting to approximate $S(t)$ by a double exponent, the two times coincide. It can be assumed that the shorter time $\tau_{\min}=\min\{\tau_1,\tau_2\}$, estimated from the time dependences of electrical resistance $R(t)=A_1e^{-t/\tau_1}+A_2e^{-t/\tau_2}$, corresponds to relaxation processes associated with changes in the width of the forbidden band and carrier concentration, while the longer time is associated with relaxation processes of the crystal lattice.

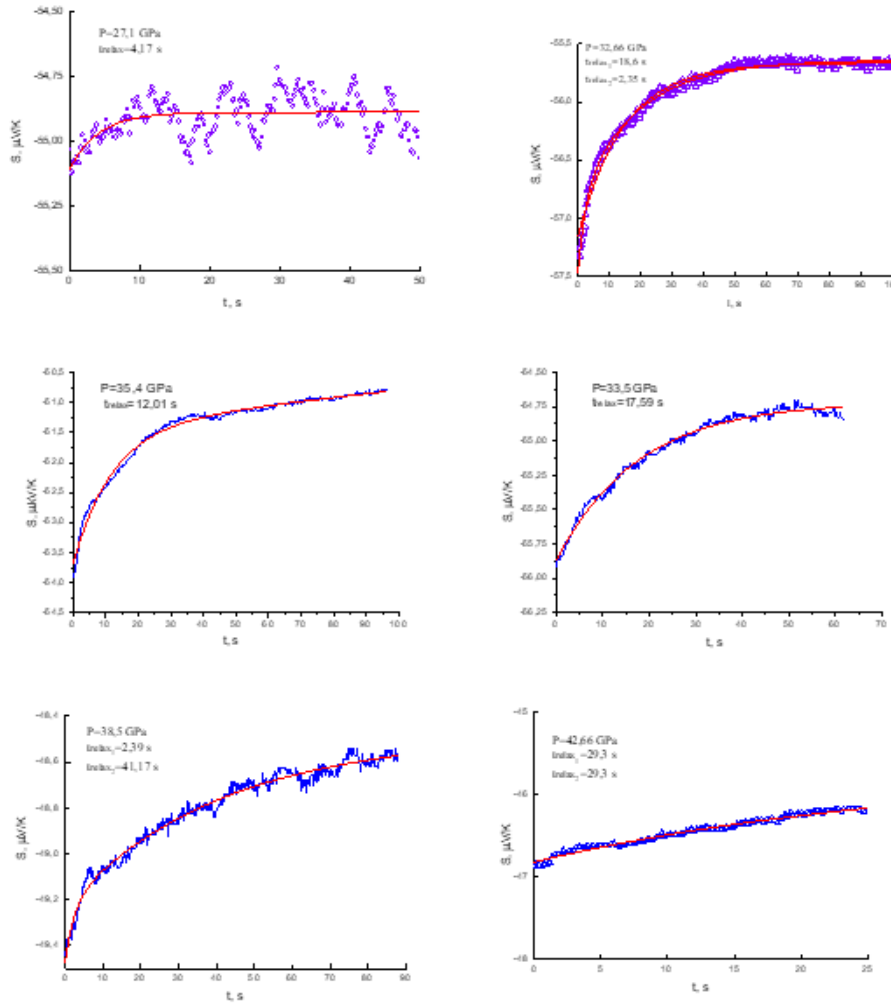


Fig. 5. Dependences of the Seebeck coefficient on the pressure holding time at the given pressure values for the Cd₃As₂ + 30% mol. MnAs composite.

This assumption is confirmed by the following: the change of thermo-emf with time, when holding the sample under a certain pressure, is characterized by a single relaxation time; at pressures above 23 GPa it is close, and at pressures 33 GPa and above it practically coincides (5-8 sec) with the smallest τ_{\min} of the two estimated times from the approximation of the relaxation curve for the electrical resistance (Figure 6. b). The Cd₃As₂ + 44.7 mol. % MnAs structure, as mentioned above, is characterized by the electronic type of carriers, and the relaxation of the resistivity at high pressure is associated with charge transfer mechanisms such as electron tunneling between

ferromagnetic granules through the semiconductor barrier and possibly with hopping conduction by localized states.

Thus, summarizing the results of the study for all Cd₃As₂ + n mol% MnAs composites, we can conclude that features of thermal-emf dependences on the pressure are observed in the range of 28-35 GPa, and a significant increase in the relaxation time of the electrical resistivity and in a number of composites the relaxation time of the thermal-emf, associated with a possible structural or electronic phase transition, is found in the range of 30-33 GPa.

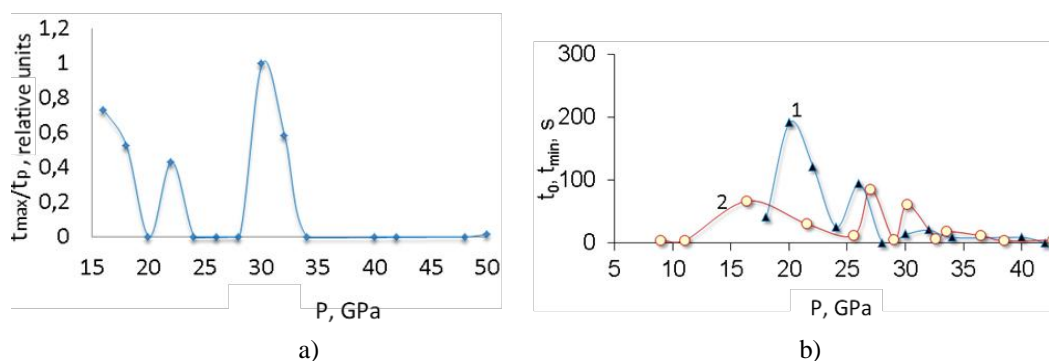


Fig. 6. a) Baric dependence of the relative value of the electrical resistance relaxation time t_{max}/t_p , where t_{max} is estimated from the approximation of the electrical resistance dependence on the time $R(t)=A_1e^{-t/t_1}+A_2e^{-t/t_2}$ at each fixed pressure as $t_{max}=\max\{t_1,t_2\}$ and t_p is the largest of the experimentally estimated t_{max} at 31 GPa; b) Baric dependences of the electrical resistance relaxation time $t_{min}=\min\{t_1,t_2\}$, estimated from time dependences of electrical resistance $R(t)=A_1e^{-t/t_1}+A_2e^{-t/t_2}$ (curve 1), and the thermo-emf relaxation time t_0 , estimated from time dependences of thermo-emf $S(t)=Ae^{-t/t_0}$ (curve 2) for Cd₃As₂+ 44.7 mol. % MnAs composite .

CONCLUSION

The specific features of the pressure-dependent behavior of the Seebeck coefficient are found for all considered Cd₃As₂ + n mol. % MnAs composites in the range of 28-35 GPa. The data of relaxation processes at pressures up to 50 GPa prove that in the interval of 32-42 GPa in Cd₃As₂ + n mol.% MnAs composites there is an increase in times of the relaxation, thermal-emf, and electrical resistance associated with a possible structural or electronic phase transition.

In view of the fact that the peculiarities of the pressure dependences of the relaxation, electrical resistivity, and thermo-emf times are primarily caused by changes in the characteristics of the electron subsystem of Cd₃As₂, and the fact that the monoclinic crystalline phase of Cd₃As₂ is stable up to 50 GPa [16], as well as the fact that the distance apart the ferromagnetic nanogranules, between which electrons are tunneling in the composite, decreases with increase in pressure, we can conclude that the most probable transformations in the range of 30-35 GPa are the transformations in the electronic subsystem.

- [1] A.C. Mosca, O. Pulci, F. Bechstedt. Electronic and optical properties of topological semimetal Cd₃As₂. Scientific Reports. – 2017. – V. 7. – P. 45500.
- [2] Y.Y. Shuo, H. Yang, D. Elena [et al.]. Symmetry demanded topological nodal-line materials. Nature materials. – 2015. – V. 14. – P. 280.
- [3] Z. Cheng, Z. Tong, L. Sihang. [et al.]. Unexpected low thermal conductivity and large power factor in Dirac semimetal Cd₃As₂// Chin. Phys. B. – 2016. – V. 25, № 1. – P. 017202.
- [4] J. Zhenzhao, L. Caizhen, L. Xinqi [et al.]. Thermoelectric signature of the chiral anomaly in Cd₃As₂. Nature communications. – 2016. – V. 7. – P.13013.
- [5] L.A. Saypulaeva. Galvanomagnetic Properties of Cd₃As₂- MnAs (MnAs - 20%) System in Transverse Magnetic Field at Hydrostatic Pressure up to 9 GPa / L.A. Saypulaeva, S. B. Abdulvagidov, M.M. Gadzhialiev, A.G. Alibekov, N.S. Abakarova, N.V. Melnikova, V.S. Zakhvalinsky, A.I. Ril', S.V. Marenkin. Nano Hybrids and Composites.- 2020.- V.28.-P.3-8.
- [6] L.A. Saypulaeva. Synthesis and study of electrical properties of cadmium diarsenide with MnAs nanogranules / L.A.Saypulaeva, M.M. Gadzhialiev, Z.Sh. Pirmagomedov, T.N. Efendieva, A.G. Alibekov, Sh.B. Abdulvagidov, N.V. Melnikova, V.S. Zakhvalinsky, S.F. Marenkin. Journal of Technical Physics - 2020. T.90, № 7. - C.1128-1131.
- [7] L.A. Saipulaeva. Spin-polarized electric current in Cd₃As₂ + 44.7 mol% MnAs / L.A. Saipulaeva, Z.Sh. Pirmagomedov, M.M. Gadzhialiev, A.G. Alibekov, N.V. Melnikova, V.S. Zakhvalinsky, A.I. Ril', S.F. Marenkin. Proceedings of the XI International Scientific Conference "Fullerenes and Nanostructures in Condensed Matters", September 28-30, 2020, Minsk.
- [8] A.I. Ril, A.V. Kochura, S.F. Marenkin et al. Microstructure of crystals of Cd₃As₂-MnAs system. Proceedings of South-West State University. Series: Technics and technologies. - 2017. - T.7, № 2(23). - C. 120-134.
- [9] L.F. Vereshchagin, E.N. Yakovlev, B.V. Vinogradov, G.N. Stepanov, K.Kh. Bibaev, T.I. Alaeva, V.P. Sakun. High Temperatur. –High Press. 6, 499 (1974).
- [10] A.N. Babushkin, G.I. Pilipenko, F.F. Gavrillov. J. Phys.: Condens. Matter. 5, 8659 (1993).
- [11] A.N. Babushkin. High Press. Res. 6, 349 (1992).
- [12] A.N. Babushkin. Electrical conductivity and thermo-emf of alkali metal halides and other materials at 20-50 GPA: Dissertation for the Doctor's of Physical and Mathematical Sciences

- degree : 01.04.10 / S.M. Kirov Ural Polytechnic Institute. - Ekaterinburg, 1992. - 316 c.
- [13] *S.F. Marenkin, V.M. Trukhan, I.V. Fedorchenko* et al. Magnetic and electrical properties of Cd₃As₂ + MnAs composite. *Journal of Inorganic Chemistry*. - 2014. - T. 59, № 4. - C. 511-516.
- [14] *L. Cai-Zhen, L. Jin-Guang, W. Li-Xian* [et al.]. Two-carrier transport induced Hall anomaly and large tunable magnetoresistance in Dirac semimetal Cd₃As₂ nanoplates. *ACS Nano*. – 2016. – V. 10. –P. 6020–6028.
- [15] *L. Galletti, T. Schumann, O.F. Shoron* [et al.]. Two-dimensional Dirac fermions in thin films of Cd₃As₂. *Phys. Rev. B*. – 2018. – V.97. – P. 115132.
- [16] *N.D. Zhigadlo*. High-pressure growth and characterization of bulk MnAs single crystals. *Journal of Crystal Growth*. – 2017. – V. 480. – P. 148-153.

ELASTIC PROPERTIES OF Ni-Cu-Zn FERRITE NANOPOWDERS

I.F. YUSIBOVA¹, Sh.N. ALIYEVA^{1,2}¹*Institute of Physics of the Ministry of Science and Education, H. Javid ave. 131,
AZ-1073, Baku, Azerbaijan*²*Azerbaijan State University of Oil and Industry, AZ-1010, Azadlig ave. 20, Baku, Azerbaijan,
yusibova78@mail.ru*

Cu-substituted Ni-Zn ferrites were synthesized by thermal method. X-ray phase and IR spectra of the $\text{Ni}_{0.4}\text{Cu}_x\text{Zn}_{0.6-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($x=0-0.6$) ferrites were studied and it was determined that all obtained samples are spinel ferrites with a single-phase cubic structure. The coefficients of elasticity were calculated using the parameters obtained from the analyzes and the dependence of these coefficients on the concentration of Cu ion was determined.

Keywords: ferrites, thermal method, X-ray phase, IR spectroscopy, sublattice, elastic properties.

PACS: 4120Gz, 42.72Ai

INTRODUCTION

In recent years, there has been an increased interest in the study of nanoferrites with a spinel structure, which have a wide range of practical applications due to their unique physical properties. The physical properties such as mechanical hardness, chemical stability, high saturation magnetization, massive magnetic resistance, semiconductor-dielectric transition, high dielectric permeability have expanded their applications in spintronic, memory devices, computer components, magnetic receivers, magnetic recording devices, gas detectors, transformer casings, in biomedicine and other fields. Ferrite spinels with the general formula $(\text{A}^{2+})[\text{B}^{3+}]\text{O}_4^{2-}$ have a surface-centered cubic structure [1,2]. There are three types of them: normal, transformed and mixed. A^{2+} and B^{3+} are divalent and trivalent metal cations located in tetrahedral (A) and octahedral (B) sublattices. Divalent cations can occupy both sublattices. When this cation resides in the tetrahedral sublattice, normal spinel is formed, and when it resides in both sublattices, inverted spinel is formed. Recently, the most relevant issue of practical application is the management of physical, chemical and electromagnetic properties of the synthesized material [3,4]. As a rule, the physical, chemical, structural and electromagnetic properties of the material are strongly dependent on the replacement of the composition, synthesis process. In the literature analysis [1-7], the absence of a detailed description of the changes in Ni-Zn ferrite materials shows that the study of these materials is still relevant.

It is also important to study the mechanical properties of ferrite materials. Because determining the mechanical properties of ferrites, for example, elasticity coefficients and Debye temperature, allows determining the nature of bonding forces. Usually, the method of transmission of ultrasonic pulses is used to determine the coefficients of elasticity [8, 9, 16]. However, this method has a number of shortcomings. First of all, a large amount of material is required. It is known that for the investigation of each material's structure we use X-ray and IR spectral analysis. We can

determine the elasticity properties of our material by the using obtained results,. There are two methods for determining the elastic properties of crystals: determination of elastic properties through the coefficient of elastic stiffness (C_{ij}) and the coefficient of elastic strain (S_{ij}). A total of thirty-six elasticity coefficients are available. For crystals with a homogeneous cubic structure, it is sufficient to determine three elasticity constants (C_{11} , C_{12} , C_{44}).

In this article, the elasticity properties of $\text{Ni}_{0.4}\text{Cu}_x\text{Zn}_{0.6-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($x=0-0.6$) nanoferrite powders synthesized by the thermal method were studied by the Waldron method. Thus, the elasticity coefficients were calculated based on the parameters obtained from the X-ray phase and IR spectral analyses, and the dependence of the obtained parameters on the Cu ion concentration was presented.

1. MATERIALS AND METHODS

The properties of ferrite materials depend on its chemical composition and synthesis method. Information about synthesis technology is published in [8,9,11] works. Oxide-based $\text{Ni}_{0.4}\text{Cu}_x\text{Zn}_{0.6-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($x=0-0.6$) nanoferrite powders with different concentrations were synthesized by thermal method. NiO, CuO, ZnO and Fe_2O_3 oxides with a purity of 99% were used as raw materials. The quality of the synthesized ferrite powders was evaluated by XRDD8 ADVANCE (Bruker, Germany) X-ray diffractometer. The dimensions of the crystal were calculated based on Scherrer's formula [12]. IR spectra were obtained using a Fourier Vertex70 spectrometer (Bruker, Germany).

2. DISCUSSION OF OBTAINED RESULTS.

2.1 X-ray phase analysis

X-ray diffraction spectra of $\text{Ni}_{0.4}\text{Cu}_x\text{Zn}_{0.6-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($x=0-0.6$) ferrite nanopowders are given in [12-15]. From the received spectra, the (111), (220), (311), (222), (400), (422), (511) and (440) maxima characteristic of the cubic spinel structure were observed in each of the studied ferrite samples. This

ELASTIC PROPERTIES OF Ni-Cu-Zn FERRITE NANOPOWDERS

shows that $Ni_{0.4}Cu_xZn_{0.6-x}Fe_2O_4$ ($x=0-0.6$) nanoferrites are ferrites with $Fd\bar{3}mO^7_h$ spatial symmetry structure. The strongest reflection maximum was recorded on the (311) plane [14]. The lattice parameter, lattice volume and X-ray density porosity parameter of the samples were calculated in the diffraction spectra. The obtained results are presented in table 1. As a result of

substitution in Ni – Zn ferrite, we can explain the reduction of the lattice parameter by the fact that the ionic radius of the substituted Cu^{2+} (0.72 Å) ion is smaller than the ionic radius of the Zn^{2+} (0.82 Å) ion [1]. We can see that other parameters also decrease depending on the concentration of Cu^{2+} ion.

Table 1
Lattice parameter (a), lattice volume (V), volume density (ρ_{bulk}), X-ray density (ρ_{X-ray}), porosity P (%), jump of $Ni_{0.4}Cu_xZn_{0.6-x}Fe_2O_4$ ($x=0-0.6$) ferrites with different concentrations length (L_A, L_B).

X	a (Å)	V(Å ³)	ρ_{bulk} (g/cm ³)	ρ_{X-ray} (g/cm ³)	P (%)	L_A (Å)	L_B (Å)
0.0	8.396	591.860	2.55	5.35	52.34	3.635	2.964
0.24	8.384	589.323	2.57	5.37	52.14	3.630	2.960
0.3	8.364	585.116	2.60	5.4	51.85	3.621	2.952
0.36	8.353	582.811	2.61	5.42	51.85	3.617	2.949
0.42	8.347	581.556	2.63	5.43	51.56	3.614	2.946
0.6	8.342	580.511	2.64	5.43	51.38	3.612	2.944

2.2 IR spectra

Description and interpretation of IR spectra are given in [18]. As we know, two absorption bands corresponding to the M-O connection of metal ions of tetrahedral and octahedral sublattices should be observed in the IR-spectra of ferrite nanopowders. Both

bands are observed in the spectra of our samples. It is known the frequencies of the oscillations are related to the force constants, and using these relationships, we were able to calculate the Debye temperature at different concentrations according to the Waldron model. The results are given in table 2 [17, 18, 19].

Table 2
Absorption frequencies (ν_1, ν_2), force constants (k_T and k_0) of IR spectra of $Ni_{0.4}Cu_xZn_{0.6-x}Fe_2O_4$ ($x=0-0.6$) ferrites with different concentrations and Debye temperature calculated according to the Waldron model.

X	ν_1 (cm ⁻¹)	ν_2 (cm ⁻¹)	ν_{mean} (cm ⁻¹)	$k_T \cdot 10^5$	$k_0 \cdot 10^5$	$k_{mean} \cdot 10^5$	$\nu_1 - \nu_2$ (cm ⁻¹)	θ_{DW} (K)
0	563.74	476.43	520.09	2.33	1.66	2	87.31	748
0.24	554.10	475.33	514.75	2.25	1.66	1.96	78.77	740
0.3	570.06	485.86	527.96	2.38	1.73	2.06	84.2	759
0.36	552.12	481.87	517.025	2.24	1.7	1.97	70.31	743
0.42	571.96	471.20	521.58	2.4	1.63	2.02	100.76	750
0.6	587.00	481.62	534.31	2.53	1.7	2.12	105.38	768

3.3 Elastic properties

We can determine the elasticity parameters of $Ni_{0.4}Cu_xZn_{0.6-x}Fe_2O_4$ ($x=0-0.6$) nanoferrite powders with different concentrations by means of IR-spectral analysis [19,20]. C_{11} and C_{12} hardness coefficients calculated according to different concentrations of

$Ni_{0.4}Cu_xZn_{0.6-x}Fe_2O_4$ ($x=0-0.6$) nanoferrite powders are given in table 4. According to the table, the value of these parameters varies depending on the relationship between Cu^{2+} , Zn^{2+} , Fe^{3+} cations and O^{2-} anion. Based on C_{11} and C_{12} coefficients, Young's modulus (Y), stiffness modulus (n) and bulk density modulus (B) were calculated and listed in table 3.

Table 3
Hardness coefficients (C_{11} and C_{12}), Poisson's ratio (σ), elastic wave velocities (ν_1, ν_s, ν_m), Young's modulus (Y), volume compression of $Ni_{0.4}Cu_xZn_{0.6-x}Fe_2O_4$ ($x=0-0.6$) ferrites at different concentrations modulus (B), stiffness modulus (n) [20-22].

x	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	σ	ν_1 (m/s)	ν_s (m/s)	ν_m (m/s)	Y (GPa)	B (GPa)	n (GPa)
0	238	41	0.147	6670	4301	5486	226	107	99
0.24	234	41	0.148	6602	4250	5426	222	105	97
0.3	246	43	0.149	6750	4324	5537	233	111	101
0.36	236	41	0.149	6598	4231	5415	224	106	97
0.42	242	43	0.150	6676	3742	5209	229	109	76
0.6	254	45	0.150	6839	3838	5339	240	115	80

As the concentration of Cu^{+2} ion increases, the same trend is observed. The sharpest increase is observed at $x=0.3$ and 0.6 values. Also, longitudinal and transverse wave velocities (v_l , v_s) and average velocity (v_m) were calculated depending on Cu ion concentration [19].

RESULTS

In this study, $\text{Ni}_{0.4}\text{Cu}_x\text{Zn}_{0.6-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($x=0-0.6$) nano ferrite powders were synthesized by thermal method. X-ray spectra show that ferrite structures with pure, single-phase spinel structure were obtained. It was

determined that the lattice parameter decreases as the Cu^{+2} ion concentration increases. This is explained by the small radius of the replaced ion. IR spectra confirm the results of X-ray structural analysis. Spectral lines ($478-600\text{ cm}^{-1}$) characteristic of spinel ferrites are observed in the IR spectra of all samples. According to the results obtained based on these two methods, the longitudinal, transverse and average speed of the elastic wave propagating in the crystal lattices of these samples (v_l , v_s , v_m), volume compression modulus (B), strength modulus (n), Young's modulus (Y), Poisson's ratio (σ) and Debye temperature (θ_{Dw}) were calculated.

-
- [1] M.F. Huq, D.K. Saha, R. Ahmed and Z.H. Mahmood. Ni-Cu-Zn Ferrite Research: A Brief Review. J.Sci.Res., 2013, 5(2),215-233.
- [2] Y. Wu, X. Yang, X. Yi, Y. Liu, Y. Chen, G. Liu, and R. Li. 2015. Magnetic nanoparticles for biomedicine applications, J. Nanotechnol. Nanomed. Nanobiotechnol., 2, 003
- [3] S. Hazra, N.N. Ghosh. Preparation of nanoferrites and their applications, J. Nanosci. Nanotechnol. 14 (2014) 1983–2000.
- [4] Swapnil Jadhav, Sandeep B. Somvanshi, Mangesh V. Khedkar, Supriya R. Patade, K.M. Jadhav. Magneto-structural and photocatalytic behavior of mixed Ni–Zn nano-spinel ferrites: visible light-enabled active photodegradation of rhodamine B. J. Mater. Sci. Mater. Electron.
- [5] J. Smit, H.P.J. Wiji. Ferrites, Philips Technical Library, Eindhoven, The Netherlands, 1959, pp. 268–283.
- [6] E. Oumezzine, S. Hcini, M. Baazaoui, E.K. Hlil, M. Oumezzine. Powder Tech. 278, 189–195 (2015)
- [7] T.R. Mehdiyev, A.M. Hashimov, Sh.N. Aliyeva, I.F. Yusibova, A.V. Agashkov, B.A. Bushuk, Luminescent and optical properties of (Ni, Zn) ferrites, IJTPE Journal. 13 (1) (2021) 81-90.
- [8] Sh.N. Aliyeva, T.R. Mehdiyev, S.H. Jabarov, Kh.N. Ahmadova, I.F. Yusibova, Temperature dependences of the total spin moment in nanopowders of $\text{Ni}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($x=0.0; 0.25; 0.5; 0.75; 1.0$) ferros spinels. J.Supercond Magn.36,(2023)367-371. <https://doi.org/10.1007/s10948-022-06458-4>
- [9] M.S. Anwar, Faheem Ahmed, Bon Heun Koo. Acta Mater., 71 (2014), p. 100.
- [10] Z. Yue, L. Li, J. Zhou, H. Zhang, Z. Gui. Mater. Sci. Eng. B, 64 (1999), p. 68.
- [11] Yüksel Köseoğlu, Furkan Alan, Muhammed Tan, Resul Yilgin, Mustafa Öztürk. Ceram. Int., 38 (2012), p. 3625
- [12] I.F. Yusibova. Synthesis and physical properties of Cu-substituted Ni-Zn ferrites, AJP Fizika 25 (2) (2019) 42-45.
- [13] Sh.N. Aliyeva, S. Babayev and T.R. Mehdiyev, “Raman spectra of $\text{Ni}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ nanopowders”, J. Raman Spectrosc., vol. 49, pp. 271–278, 2018.
- [14] I.F. Yusibova. Cu əvəzləməli Ni-Zn ferritlərinin struktur xüsusiyyətləri, AJP Fizika, Vol. XXVI, № 2 Section: Az, 2020, s. 44-49.
- [15] İ.F. Yusibova. $\text{Ni}_{0.4}\text{Zn}_{0.3}\text{Cu}_{0.3}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ferritinin qurluş və fiziki xassələri Azerbaijan Journal of Physics, vol. XXVII, № 3, Section: Az Oktober 2021, S. 53-56
- [16] Г.В. Фетусов. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. под редакцией Л.А. Асланова, М, ФИЗМАТЛИТ, 2007, 672с.
- [17] R.D. Waldron. Phys.Rev., 1955, 99, 1727
- [18] I.F. Yusibova, Sh.N. Aliyeva. IR analysis of copper doped Ni-Zn nanoferrites, AJP Fizika 29 (4) (2023) 33-34.
- [19] İ.F. Yusibova, Ş.N. Əliyeva. $\text{Ni}_{0.4}\text{Cu}_x\text{Zn}_{0.6-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ferrit nanatozlarının elastiklik xassələri, AJP Fizika 30 (3) (2024) 28-31
- [20] K.B. Modi, U.N. Trivedi, P.U. Sharma, V.K. Lakhani, M.C. Chhantbar and H.H. Joshi. Indian Journal of Pure and Applied Physics 2006, v 44, pp 165-168
- [21] N. Sharifa, M.K. Subrin, M. A. Matin, M. N. I. Khan, A. K. M. Akther. Hossain Md. D. Rahaman Journal of Materials Science: Materials in Electronics 2019, v 30, pp10722-10741 <https://doi.org/10.1007/s10854-019-01417-7>
- [22] Ch. Srinivasa, M. Deeptya, S.A.V. Prasada, G. Prasada, E. Ranjith Kumarb, Sher Singh Meenac, Naidu V. Seetalad, Darnel D. Willamsd, D.L. Sastrye. Study of structural, vibrational, elastic and magnetic properties of uniaxial anisotropic Ni-Zn nanoferrites in the context of cation distribution and magnetocrystalline anisotropy, Journal of Alloys and Compounds, v 873, 2021.

**PHASE TRANSITIONS AND THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF
Ni_{50.2}Mn_{39.8}In₁₀ GEISSLER ALLOY**

**I.K. KAMILOV*, A.B. BATDALOV*, L.N. KHANOV*, A.A. MUKHUCHEV*,
A.V. MASHIROV**, A.M. ALIYEV***

**Institute of Physics named after Kh.I. Amirkhanov, DFIC RAS, Makhachkala, Russia*

***Institute of radio engineering and electronics named after V.A. Kotelnikov,*

ДФИИЭ RAS, Moscow, Russia

e-mail: ab.batdalov@gmail.com, e-mail: hanov82@mail.ru

e-mail: mukhuch87@mail.ru, e-mail: a.v.mashirov@mail.ru, e-mail: lowtemp@mail.ru

The results of measurements of heat conduction (K), heat capacity (C_p), electrical resistance (ρ) and data of differentially scanning calorimetry (DSC) of Ni_{50.2}Mn_{39.8}In₁₀ Geissler alloy in T=25 – 350 K interval are given. The anomalies evidencing on the phase transitions of I and II orders with $T_C=321$ K, $M_S=296$ K are observed on curves of DSC and $C_p(T)$. The strong increase of heat conduction at transition martensite – austenite $\Delta K=3.2$ Wt/m²*K caused by the increase of electron contribution because of the electron mobility increase at transition in high-symmetry phase, is revealed. The lattice heat conduction changes insignificantly at the transition that shows on the insensibility of phonons to structural disorder.

Keywords: Geissler alloys, heat conduction, heat capacity, phase transitions, electrical resistance.

INTRODUCTION

The physical properties of functional materials on the base, of which the innovation technologies can be formed, are always in the focus of attention of researchers. Ni-Mn-In Geissler alloys are also related to such type materials, in which magnetic structural phase transitions (MSPT) and big values of magnetocaloric effect (MCE) are observed, that presents the definite applied interest for technology of magnetic cooling. Meanwhile, Geissler alloys can be used as model objects for the study of interference mechanism of electron, phonon and magnetic subsystems of magnetic alloys. The alloys of Ni-Mn-In series attract one's attention also by the fact that in them the interesting combination of magnetic and structural phase transitions [1,2] is observed, and that the insignificant changes in relation of components lead to drastic changes of their physical properties that shows the extreme sensibility of the properties to elemental composition change [3].

The possibility of practical use of such materials in innovative technologies, in particular, in technology of magnetic cooling as the working substance is the important factor stimulating the experimental and theoretical investigations of materials with MSPT and phenomena connected with them. The efficiency of refrigerating machine work based on MSC directly depends on heat removal velocity and working refrigerator substance, i.e. from alloy heat conduction. This shows on necessity of investigation of heat conduction of refrigerating machine working substance. Note, the heat conduction measurement is the reliable and checked method of definition of acting scattering mechanisms of solid state heat carriers, but this is the fundamental problem of solid state physics.

The magnetic, electric and magnetocaloric properties of different compositions of Ni-Mn-In

system, investigated by us, have investigated enough. The researchers pay significantly less time to study of heat-conducting properties of Ni-Mn-In alloys, in spite of the fact that heat conduction is the important technical parameter of solid state.

We know the several works where their heat conduction is investigated [4 – 10]. Thus, in work [4] dedicated to the study of heat conduction and thermal e.m.f. of Ni₅₀Mn₃₄In₁₆ alloy, the $\rho(T)$. (T) strong anomalies near magnetic and structural phase transitions, which are explained by the changes in the alloy electron subsystem taking under consideration the scattering of heat carriers on boundaries of twinning, are revealed. The heat conduction anomalies of Ni-Mn-Ga alloy observed near phase transitions the authors [10] are connected with changes in alloy phonon subsystem. The strong increase of heat conduction of Ni-Mn-Sn [7] and Ni-Mn-In [9] alloys observed at transition martensite – austenite authors explain by the influence of heat conduction electron component. As it is seen from above mentioned, the necessary investigations for making things clear in behavior of Geissler alloy heat conduction near phase transition temperatures are needed.

The given work is dedicated to investigation of heat conduction of Ni_{50.2}Ni_{39.8}In₁₀ alloy in wide temperature interval from 25K up to 350K. The electric resistance and heat capacity, necessary for interpretation of obtained results are measured parallel. The data of differentially scanning calorimetry (DSC) are used for the study of phase results.

THE SAMPLE AND EXPERIMENT TECHNIQUE

The investigated sample is obtained by the method of arc-heated melting in argon atmosphere and

it presents itself the rectangular plate by sizes $8.9 \times 3.3 \times 0.89 \text{ mm}^3$. The homogenizing is carried out at $T = 900 \text{ }^\circ\text{C}$ during 48 hours in vacuum. The measurement of electric resistance is carried out by four-contact method and the measurement of the heat capacity is carried out by method of a.c. - calorimetry. The low-temperature measurements of heat conduction are carried out in cryostat of closed type CFSG-310. The temperature regulation in heat conduction measurement process, are carried out automatic mode on the program developed in laboratory. At heat conduction measurement the sample is put in radiation shield for the decrease of heat loss on radiation. The sample average temperature approximately corresponds to shield one. In measurement process the vacuum in the system is supported not more than 10^{-4} mm. Hg . The cuprum-constantan and chromel-constantan thermocouples are used as the temperature gauges. In the figure for $K(T)$ the data only for $T > 25 \text{ K}$, where one can measure the

temperature, are given, because of the fact that the thermocouples don't have the necessary sensibility for detail measurement of temperature gradient at helium temperatures. The temperature drop on the sample is from $\Delta T \approx 3 \div 4 \text{ K}$ in interval of low temperatures and up to $5 \div 6 \text{ K}$ in the interval of high ones. The error at measurement of heat conduction isn't more than 5%.

RESULTS AND DISCUSSION

The results of carried investigations are given in fig.1 – 4. At decrease of the temperature in austenite paramagnetic (PM) phase at $T_C \approx 321 \text{ K}$ the magnetic phase transition PM – FM, which strongly goes to magnetic structural phase transition ferromagnetic (FM) (austenite) – anti-ferromagnetic (martensite) at $M_S = 296 \text{ K}$ takes place (Fig.1).

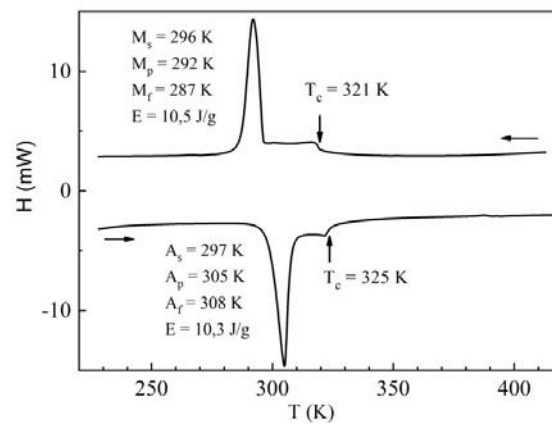


Fig.1. Data of DSC analysis in the mode of heating and cooling.

It is necessary to note that the question on magnetic state of martensite in Ni-Mn-In alloy is the debatable one [11-13].

The closeness of magnetic and structural phase transitions ($T_C = 321 \text{ K}$, $M_S = 296 \text{ K}$) supposes that in the given temperature interval the system is in structurally heterogeneous state (co-existence of martensite and austenite). The hysteresis observable in Fig.1 shows on magnetic structural nature of phase transition of I order. The strong peaks caused by latent heat of phase transition and temperature hysteresis $\Delta T = 13 \text{ K}$ character for phase transitions of I order are also visible in the Fig. 1. The insignificant anomalies near magnetic phase transition and difference in T_C values in the heating and cooling modes attract one's attention that is probably connected with phase heterogeneity. The results of heat capacity measurements given in Fig.2, are the illustration of above mentioned. It is seen that at T decrease in austenite phase λ -formed maximum character for phase transitions of II order, is observed. At further T decrease the strong increase C_P , relating to phase transitions of I order is observed. The difference in value ΔC_P at heating and cooling presents the most interest: peak ΔC_P at cooling increases multiply the

peak ΔC_P at heating that is probably connected with influence of latent heat of phase transition relating to structural transitions [14]. The further trend of $\Delta C_P(T)$ has the general form for solid state.

Before the discussion of results of heat conduction measurements, let's pay attention on the dependence of electric resistance on temperature which we measure, for estimation of electron component of heat conduction (Fig.3). As it is seen from the figure, the electric resistance in paramagnetic austenite phase slowly decreases with the temperature decrease, having the small anomaly near magnetic phase transition paramagnetic-ferromagnetic. The discontinuous increase of electric resistance more than in two times in very narrow temperature interval takes place near MSPT high-symmetry austenite (ferromagnetic) – low-symmetry tetragonal martensite (anti-ferromagnetic), that shows on high quality of the sample.

For analysis of $\rho(T)$ behavior we usually use the following expression:

$$\rho(T) = \frac{m^*}{e^2 \tau n},$$

where m^* is electron effective mass, τ is relaxation time, n is electron concentration.

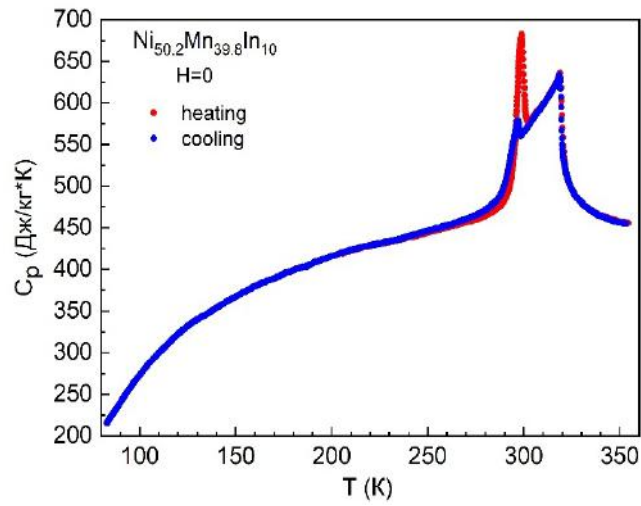


Fig.2. $C_p(T)$ diagram in heating and cooling modes.

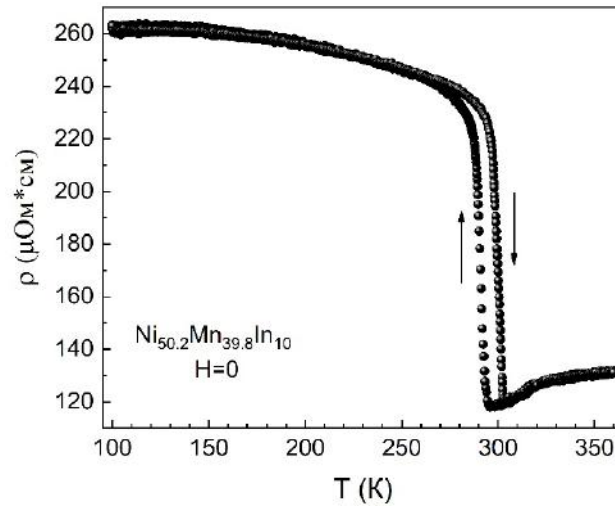


Fig.3. Temperature dependence of electric resistance.

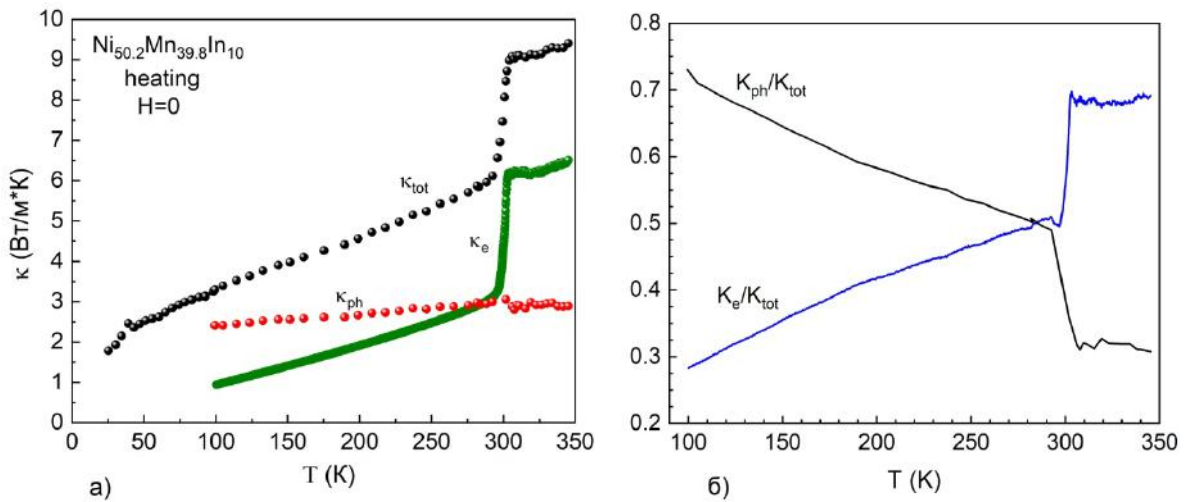


Fig.4. a) Temperature dependence of general (K_{tot}), electron (K_e) and phonon (K_{ph}) components of heat conduction; b) temperature dependence of the relative parts of electron and phonon components of heat conduction.

ρ increase, as it is seen from the expression for $\rho(T)$, can be the sequence of both the decrease of current carrier concentration and the increase of the electron scattering velocity τ_e^{-1} at transition in less symmetrical phase. The results of normal Hall coefficient investigation shows [9] that R_0 weakly changes at transition martensite – austenite that shows on the non-participation of n change to observable anomaly trend of $\rho(T)$. Therefore, the increase of electric resistance at transition in martensite phase is connected with the decrease of electron mobility at sample transition in strongly distorted tetragonal martensite phase as a result of increase of electron collision frequency τ_e^{-1} on structural defects.

Let's discuss the results of heat conduction measurements which are given in Fig.4.

In general case the heat conduction of magnetic materials can be presented as the sum of three summands:

$$K_{tot} = K_e + K_{ph} + K_m,$$

where K_e , K_{ph} and K_m are electron, phonon and magnetic components of heat conduction, correspondingly. As usual, the magnetic component is ignored because of its relative smallness [15]. That's why one can consider that both conduction electrons and phonons can be reliable for observable trend $K_{tot}(T)$. Generally, K_e dominates in metals, K_{ph} dominates in dielectrics, but K_e and K_{ph} are values of one order in multi-component alloys [16]. It is necessary to note the two peculiarities in the behavior of measured value $K_{tot}(T)$. This is absence of low-temperature maximum, character for crystalline solid states and discontinuous increase near phase transition martensite – austenite. Considering the last anomaly, we can say the following. It is obvious that it can be connected with both increase of electron component and changes in phonon subsystem. For dividing of K_e and K_{ph} we use Wiedemann-Franz law $K_e=L\sigma T$, where L is Lorenz number, σ is electric conduction which is equal to $1/\rho$. However L is value depending on temperature, which is equal to $L_0 - 2.44 \cdot 10^8 \text{ Vt}^2/\text{K}^2$ only in interval elastic electron collisions when relaxation times by energies and impulses are equal between each other, i.e. when one can introduce the unique relaxation time. $L=L_0$ in low temperature interval when electrons scatter on impurities and at high $T>\Theta$ (Θ is Debye temperature) when elastic electron-phonon interactions dominate. $L=f(T)$ in temperature intermediate region. However, the assumption for strong deluted metallic alloys is confirmed that the elastic electron-defect interactions (defects in the given case are: impurities, structural heterogeneities and boundaries) and use of Wiedemann-Franz law $K_e=L_0\sigma T$ in order to mark out K_e , is approved. Generally, the existing practices of K_e estimation for alloys takes under consideration this assumption [5, 7, 8, 10, 17], though the question about rightness of Wiedemann –Franz law in direct region of the transition requires more detail investigation.

The experimental curve $K_{tot}(T)$, electron component, estimated from $K_e=L_0\sigma T$ and phonon contribution K_{ph} , obtained as their difference $K_{ph}=K_{tot}-K_e$ are given in Fig.4.

The data graphic analysis given in Fig.4 shows that the difference $K_{tot}(aust.) - K_{tot}(mart.)$ approximately coincides with data $K_e(aust.) - K_e(mart.)$ and $\approx 3.2 \text{ Vt/m}^*K$ and from this point of view whole increase of heat conduction is connected with electron component at MSPT.

K_{ph} weak dependence on temperature and the absence of strong anomalies near phase transitions evidence on insensibility of phonon scattering to structural defects appearing at austenite-martensite transition. The relation of contributions of electrons and phonons in general heat conduction strongly changes on the dependence on temperature (Fig.4b). As it is seen from the figure, at low temperatures the phonon contribution dominates under electron ones. The opposite case takes place when temperature is higher than transition ones.

Analysis of reference on heat conduction of Geissler alloys unambiguously indicates the presence of an anomaly near the MSPT temperature in the form of strong increase of heat conduction. However, there are different interpretations of this phenomenon. In one case, this anomaly is associated with an increase in the phonon contribution [10], in another case is connected with an increase in the electron contribution at phase transition [7, 9], in the third case [5] it is assumed that both electron and phonon subsystems simultaneously take part in this process.

The differences in the technology of sample obtaining are the one of the possible reasons for the observable discrepancies. In one case it is the well-known method of electric arc melting [7, 9], in the other case it is the method of mechanical alloying [18]. The samples obtained by different methods may have different microstructure and different response to external influence.

CONCLUSION

Based on the measurements of heat conduction, heat capacity, magnetization and electric resistance of $\text{Ni}_{50.2}\text{Ni}_{39.8}\text{In}_{10}$ sample, the following conclusions can be done. Magnetic and magneto-structural phase transitions with closely located transition temperatures ($\text{TC}=321 \text{ K}$, $\text{MS}=296 \text{ K}$) are observed in this composition. The heat capacity jump ΔC_p at heating near MSPT significantly exceeds the value of the jump at cooling, which is a consequence of the influence of the latent heat of the phase transition.

Anomalous increase of electrical resistance at the transition austenite - martensite is caused by the decrease in the mobility of conduction electrons. The strong increase of heat conduction at the martensite-austenite transition, achieving 50 %, is caused by the increase in the contribution of the electronic component. The weak temperature dependence of phonon heat conduction shows on the insensibility of phonons to structural disorder.

- [1] V.D. Buchelnikov, S.V. Taskayev, M.A. Zagrebin, P. Eitel. JETP letters 85, 689 (2007).
- [2] V.V. Khovaylo, T. Kanomata, T. Tanaka, M. Nakashima, Y. Amako, R. Kainuma, R.Y. Umetsu, H. Morito, and H. Miki. Phys. Rev. B 80, 144409 (2009).
- [3] A.N. Vasilyev, V.D. Buchelnikov, T. Takagi, V.V. Khovaylo, E.I. Estrin. SPS 173, 578 (2003).
- [4] L.S.S. Chandra, M.K. Chattopadhyay, V.K. Sharma, S.B. Roy, S.K. Pandey. Phys. Rev. B 81, 195105 (2010).
- [5] A.G. Gamzatov, A.B. Batdalov, Sh.K. Khizriyev. Solid state physics 64, 2094 (2022).
- [6] A.G. Gamzatov, A.B. Batdalov, A.M. Aliev, Sh.K. Khizriev, V.V. Khovaylo, A. Ghotbi Varzaneh, P. Kameli, I. Abdolhosseini, Sarsari, S. Jannati. Intermetallics 143, 107491 (2022).
- [7] J. Ka'stil, J. Kamar'ad, M. M'i'sek, J. Hejtm'aneč, Z. Arnold. J. Magn. Magn. Mater. 466, 260 (2018).
- [8] A.B. Batdalov, A.M. Aliev, L.N. Khanov, V.D. Buchel'nikov, V.V. Sokolovskii, V.V. Koledov, V.G. Shavrov, A.V. Mashirov, E.T. Dil'mieva. JETP 122, 874 (2016).
- [9] Q. Zheng, G. Zhu, Z. Diao, D. Banerjee and D.G. Cahill. Adv. Eng. Mater. 1801342 (2019).
- [10] Y.K. Kuo, K.M. Sivakumar, H.C. Chen, J.H. Su, C.S. Sue. Phys. Rev. B 72, 054116 (2005).
- [11] Y.V. Kaletina, E.G. Gerasimov. Solid state physics 56, 1583 (2014).
- [12] V.N. Prudnikov, A.P. Kazakov, I.S. Titov, Y.N. Kovarski, N.S. Perov, A.B. Granovskii, I. Dubenko, A. Pathak, N. Ali, J. Gonzales. SSP 53, 460 (2011).
- [13] A.K. Pathak, B.R. Gautam, I. Dubenko, M. Khan, Sh. Stadler and N. Ali. J. Appl. Phys. 103, 07F315 (2008).
- [14] S.M. Podgornykh, E.G. Gerasimov, N.V. Mushnikov, T. Kanomata. J. Phys.: Conf. Ser. 266, 012004 (2011).
- [15] J.L. Cohn, J.J. Neumeier, C.P. Popoviciu, K.J. McClellan, Th. Leventouri. Phys. Rev. B 56, R8495 (1997).
- [16] R. Berman. The heat conduction of solid states. World, Moscow. 296 c. (1979).
- [17] S. Fujieda, Y. Hasegawa, A. Fujita and K. Fukamuchi. Journal of Applied Physics 95, 2429 (2004).
- [18] A. Ghotbi Varzaneh, P. Kameli, V.R. Zahedi, F. Karimzadeh and H. Salamati. Met. Mater. Int. 21, 758-764 (2015).

**GAMMA-RESONANCE STUDIES OF ROCKS NEAR THE EAST
(Kingdom Saudi Arabia, Turkey)****MAGOMED MAGOMEDOVICH GUSEYNOV,
IBRAGIMKHAN KAMILOVICH KAMILOV***Institute of Physics named after Kh.I. Amirkhanov - a separate division of the Dagestan
Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Makhachkala,
RussMakhachkala, Russia. E-mail: gusmagn@yandex.ru*

Gamma-resonance studies of the spectra of ^{57}Fe nuclei in rocks of Saudi Arabia and Turkey have been carried out. The presence, phase composition and physico-chemical state of iron atoms in all studied rock samples are shown.

INTRODUCTION

Rock is any mass or aggregate of one or more mineral species or organic matter that are products of natural processes, formed in different ways and at different times in the history of our planet. According to the geological conditions of formation, all rocks are divided into igneous, sedimentary and metamorphic. Igneous rocks are the result of the solidification of natural magma melt, and make up about 65% of the volume of the earth's crust. Depending on the depth of solidification of the melt, they are classified as volcanic and plutonic. Volcanic (effusive) rocks are localized in the earth's crust or on its surface; hypabyssal rocks are formed as a result of the solidification of lava at a shallow depth from the earth's surface. Plutonic (intrusive) rocks are formed as a result of the solidification of magma in the thickness of the earth's crust and upper mantle at various depths. Sedimentary rocks were formed under conditions of low temperatures and pressures as a result of accumulation, transfer and deposition of mineral or organic substances on the surface of the planet. Metamorphic rocks were formed as a result of various natural effects on sedimentary and igneous rocks. They make up 27.4% of the total volume of the earth's crust. It follows that part of the Earth's upper mantle (lithosphere) and the earth's crust consist of formations and rocks of different geology [1].

It is known that up to 1 billion tons of space objects ranging in size from fractions of a millimeter to tens of tons fall on planet Earth every year [2]. According to thermomagnetic measurements, cosmic dust containing particles of metallic iron and nickel is found directly in dusty cosmic clouds, in the atmosphere, in ice and snow, and in precipitation [3-6]. The discoveries of modern astrophysics also indicate the cosmic origin of iron in the planets of the Solar system. Cosmic dust can be detected anywhere in the universe, although its concentration varies markedly from place to place [7, 8].

There are several ways of dust formation in space: - destruction of celestial bodies as a result of collisions of asteroids and larger objects; - explosions of stars, as a result of which their particles scatter through space and create giant clouds of dust; - remnants of formed

star systems and planets; - during the formation of a new star. According to its location in the universe, cosmic dust is divided into intergalactic, galactic, interstellar, interplanetary, near-planetary, asteroid, cometary, Kuiper belt dust, etc. Cosmic dust also includes micrometeorites, particles of interplanetary dust that, due to their small mass, do not heat up when passing through the atmosphere and reach the Earth's surface unchanged, which makes the problem of studying cosmic dust very important for understanding the origin of the Solar System. A strong argument in favor of the cosmic origin of iron is the impossibility of iron formation in the bowels of the Solar System and, especially, the Earth, since its formation requires temperatures of tens of millions of degrees, which are reached only in the bowels of giant stars. The composition, structure and conditions of occurrence of rocks depend on the geological processes that form them, occurring inside the earth's crust or on its surface. The mechanism of rock formation can also be different depending on time, place and climatic conditions. The study of the substance of cosmic dust, which includes iron, will contribute to solving many theoretical issues and, first of all, understanding the processes of evolution of cosmic bodies, the Earth and the Solar system as a whole. It follows from the above that the study of rocks has scientific and practical value. They play a significant role in enriching our knowledge of the Earth. Knowing the geological structure of a particular region, the chemical composition of rocks, it is possible to assume what type of fossils will be in its depths. Such branches of geology as volcanology, tectonics and seismology allow us to predict earthquakes and volcanic eruptions. According to the cosmic hypothesis, iron fractions in the form of atoms, ions and their compounds should probably be scattered over the entire surface of the planet and found in almost all minerals, rocks, river and sea sediments, which is confirmed by thermomagnetic measurements [3]. Cosmic dust containing particles of metallic iron and nickel is found directly in the Earth's atmosphere, in ice and snow, in sediments. However, the question of the nature of the distribution of iron across the continents and its physicochemical state in various rocks and minerals, as well as the absence of traces of iron in Antarctica, remains unclear [2]. Obviously, if iron was

of purely terrestrial origin, it would not be scattered over the entire surface of the land, sea and river sediments of the planet, but would be localized in certain areas of the planet like many other chemical elements. In order to determine the distribution of iron across the planet's continents, we previously used the YAGRS method to study more than 100 rocks and river sediments of different morphology, color, and structure, collected from different areas of the planet (Russia, Europe, Asia, North America, the Middle East), in which iron was found both in free form and as part of various oxides and in various physical and chemical states. In this work, more than 20 rock

samples from Saudi Arabia and Turkey have been studied.

METHOD AND MATERIALS

Registration of gamma-resonance (Mössbauer) spectra of ^{57}Fe nuclei was performed on the MS-1104Em spectrometer in a compressed transmission geometry. The source of gamma radiation was the isotope $^{57}\text{Co}(\text{Cr})$. The spectra were decoded by the Univem-MS program. The samples for the study were finely dispersed rock powders crushed in an agate mortar.

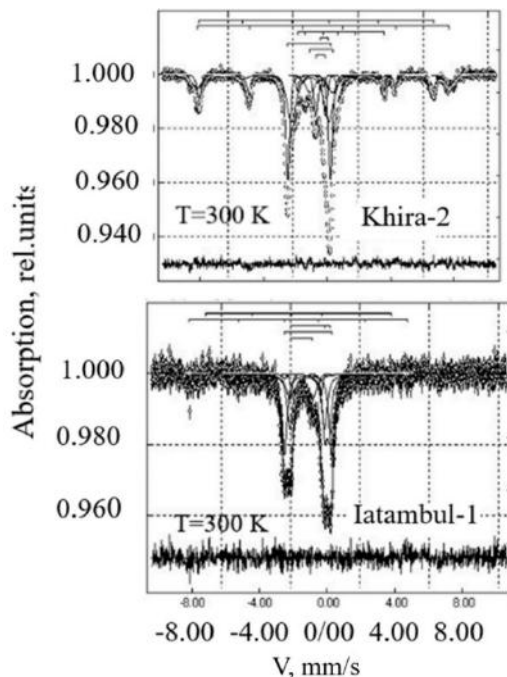


Fig.1. Mössbauer spectra of ^{57}Fe nuclei in the rocks of Khira-2 and Istanbul-1 at $T=300\text{ K}$.

Experiment and results Hydrogen, calcium, iron – all of these are present in the space environment, but in such quantities that their detection requires high-precision instruments and corresponding data analysis programs. Nuclear gamma resonance spectroscopy (NGRS), based on the Mössbauer effect, is just such a method. Due to its extremely high sensitivity ($\Delta E/E\gamma=10^{-13}$) to short-range effects, the method is one of the most effective nuclear-physical tools for studying both intra-atomic and cooperative phenomena of the condensed state of matter, allows for highly accurate investigation of hyperfine interactions in objects in which iron is a matrix or accessory impurity, characteristic of many rocks. In all the rock samples we studied, iron fractions were found in different oxides and different concentrations. This is consistent with the fact that the rocks were formed in different geological periods (Precambrian, early Paleozoic and middle and late Mesozoic), when cosmic processes had different character and different activity.

Fig. 1 shows the results of model decoding of the spectra of ^{57}Fe nuclei in the rocks of Saudi Arabia (Khira-2) and Turkey (Istanbul-1), which are characteristic of iron nuclei in rocks of different continents. As follows from Fig. 1, the spectrum of the Khira-2 rock sample corresponds to the nuclei of iron atoms in several structurally, magnetically and electrically nonequivalent positions of the heterogeneous crystal lattice of the rock, which consists of different minerals and iron oxides. The shape of the ^{57}Fe spectrum in the Istanbul-1 sample also characterizes the heterogeneity of the sample, in which, however, the iron atoms are in an asymmetric environment of atoms of other elements, but without intra-atomic magnetic fields on their nuclei. Similar and more complex spectra consisting of a superposition of sextets, doublets and singlets were obtained for all samples, the parameters of which are presented in the tables. Some samples exhibited "magnetic activity" and their spectra represented a superposition of several Zeeman sextets.

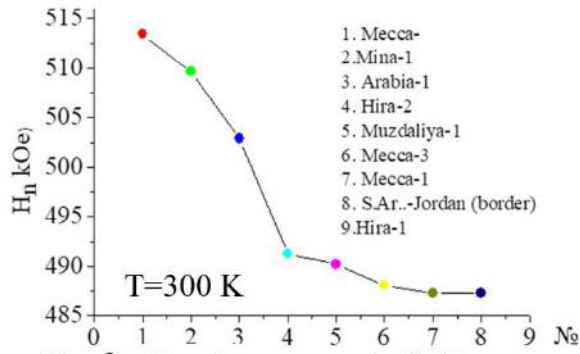


Fig. 2. Hyperfine magnetic fields on ⁵⁷Fe cores in rocks from Saudi Arabia

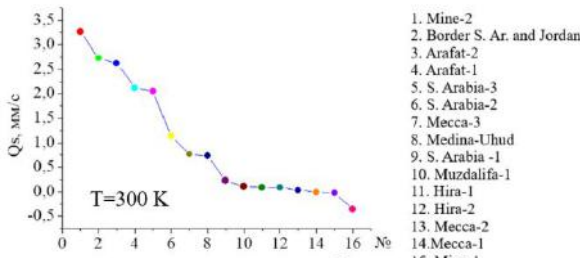


Fig. 4. Quadrupole splitting of ⁵⁷Fe core spectra in rocks of Saudi Arabia

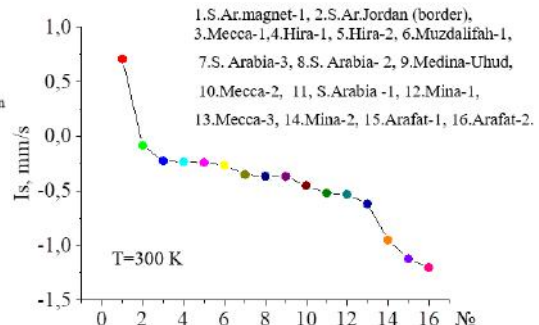


Fig. 3. Isomeric shifts in the spectra of ⁵⁷Fe nuclei in rocks of Saudi Arabia

Table 1.

Parameters of the ⁶⁷Fe nuclei spectra in the studied rock samples of Saudi Arabia.

#@#	Sample	Component	Is, mm/s	Qs, mm/s	G, mm/s	S, %
	Arafat -1	Doublet	- 1.1206	2.1144	0.5445	17.46
	S.Ar. Arafat -2	Doublet	-1.1298	2.6174	0.2993	17.46
	S.Ar. Arafat -3	Doublet	-1.1322	2.4556	0.5268	43.81
	S.Arabia-1	Doublet	-1.1562	2.0634	0.3818	45.86.
	S.Arabia-3	Doublet	-1.1481	2.0798	0.3768	43.68
	S.Arabia -2	Doublet	-1.1459	2.0800	0.3501	31.19
	S.Arabia -4_	Doublet	-0.3671	1.1331	0.1746	7.82
	S.Arabia -5	Doublet	-0.3504	2.0471	0.3113	86.13
	S.Ar. Mecca-1	Doublet	-1.1269	2.7465	0.6111	25.32
	S.Ar. Mecca-2	Doublet	-0.2714	0.6429	0.3143	13.98
	S.Ar. Mecca-3	Doublet	-1.1457	2.5674	0.3488	44.46
	S.Ar. Mine-1.	Doublet	-1.1423	2.0582	0.3249	41.88
	S.Ar.Mine-1	Doublet	-1.1431	2.0678	0.3015	36.93
	S.Ar.-magnetic-1_	Doublet	1.1259	2.2094	0.6090	59.94
	S.Ar.-magnetic-3	Doublet	1.1213	2.2076	0.6371	51.28
	S.Ar.-magnetic-2	Doublet	1.1357	2.1538	0.6111	66.61
	S.Ar.-magnetic-	Component	1.1389	2.1640	0.3647	45.6
	S.Ar. Medina-Uhud	Doublet	-0.3682	0.7361	0.3476	12.42
	Jordan-S.Arabia	Doublet	-1.0819	2.7232	0.2716	19.20
	S.Ar. Muzdalifa -1	Doublet	-1.1525	2.0870	0.4794	50.78
	S.Ar. Hira 1	Doublet	-1.1502	2.7290	0.3101	24.36
	S.Ar. Hira 2	Doublet	-1.1516	2.6012	0.4121	39.40
	S.Ar.Mina-2	Doublet	-0.9495	3.2581	0.1939	4.03
	Antalya (Akdeniz)	Doublet	-1.59	-0.18	0.17	4.79
	Istanbul-1	Doublet	-0.06	2.08	0.18	13.65
	Istanbul-2	Doublet	-1.10	1.95	0.31	24.01

Figure 2 shows the maximum values of hyperfine magnetic fields on ^{57}Fe nuclei in rock samples where iron was probably contained mainly in magnetite and hematite. As can be seen from the figure, even a small area of one country contains rocks from different geological periods, which probably had their own physicochemical and geological features. Figures 3 and 4 show the dependences of isomer shifts and quadrupole splittings of the spectra of iron nuclei, characterizing the electron charge density on iron nuclei and their environment geometry. The phase composition of the rocks includes mainly $\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ (goethite), Fe_2O_3 (hematite) and Fe_3O_4 (magnetite). According to the isomer shifts, the valence of Fe in the samples corresponds to all possible valence states of iron in oxides and other compounds.

It is known that iron exhibits variable valence (although the most stable compounds are divalent and trivalent iron). With oxygen, iron forms oxide (II) FeO , oxide (III) Fe_2O_3 and oxide (II, III) Fe_3O_4 (a compound of FeO with Fe_2O_3 , which has a spinel structure). In humid air at normal temperatures, iron is covered with loose rust ($\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$). The results of our research also showed the presence of iron in the indicated oxides, including in free metallic form, but only in one sample - S. Arabia-2. The results we obtained complement previous studies and serve as another argument in favor of the cosmic origin of iron on earth, which has a powerful force and benefit for people [10].

Table 2.

Parameters of the spectra of ^{67}Fe nuclei in the studied rock samples of Turkey.

Sample	Hn, kOe	Is, mm/s	Qs, mm/s	G, mm/s	S, %
Antalya (Acdeniz)	400	-1.59	-0.18	0.17	4.79
Istanbul-1	-	-0.06	2.08	0.18	13.65
Istanbul-2	-	-1.10	1.95	0.31	24.01

Table 3.

Phase composition of the studied samples

Sample	phase composition	content %
S.Ar. Mine-1	$\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ (goethite) Fe_2O_3 (hematite) Fe_3O_4 (magnetite)	95.3 ± 4.7 1.7 ± 1.7 3.0 ± 3.0
S.Ar. Mine-1	$\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ Fe_2O_3 Fe_3O_4	99.4 ± 0.6 0.1 ± 0.1 0.5 ± 0.5
S.Ar.Mina-2	$\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ Fe_2O_3 Fe_3O_4	94.5 ± 5.5 2.1 ± 2.1 3.4 ± 3.4
S.Arabia - 3	$\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ Fe_2O_3 Fe_3O_4 Fe (iron)	22.4 ± 22.4 1.0 ± 1.0 76.0 ± 24.0 0.6 ± 0.6
S.Arabia -5	$\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ Fe_3O_4 FeO	90.4 ± 9.6 0.4 ± 0.4 9.2 ± 9.2
S.Ar.-magnetic-1	$\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ Fe_3O_4	35.6 ± 4.8 64.4 ± 4.8
S.Ar. Khira-20	$\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$	100.0 ± 0.0
Muzdalifaa- 1	$\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ Fe_2O_3 Fe_3O_4	97.1 ± 2.9 1.9 ± 1.9 1.0 ± 1.0
Mecca-3	$\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$	100.0 ± 0.0
Mecca-1	$\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ Fe_2O_3 Fe_3O_4	98.4 ± 1.6 0.5 ± 0.5 1.1 ± 1.1
S.Ar, Khira-1	$\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ FeO	99.8 ± 0.2 0.2 ± 0.2
Mecca-2	$\text{FeOOH}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ Fe_2O_3 Fe_3O_4	66.4 ± 0.9 33.5 ± 0.8 0.1 ± 0.1

- [1] Planet Earth (ENCYCLOPEDIAS) Michael Allaby 11 10 ISBN: 978-5-389-00532-7 Year of publication: Publisher: Makhaon .2009.
- [2] *G.M. Ivanova, V.Yu. Lvov, N.V. Vasiliev, I.V. Antonov.* Fallout of cosmic matter on the surface of the Earth. Tomsk: Publishing House of Tomsk University, 1975. 120 p.
- [3] *D.K. Nurgaliev, P.G. Yasonov.* Utemov et al. Thermomagnetic diagnostics of iron and iron-nickel alloys in sedimentary rocks. Scientific notes of Kazan University. Series Natural sciences.2009.
- [4] *A. Ivanov, V. Safroshkin, V. Trukhin, A. Nekrasov.* Spectral thermomagnetic analysis of rocks. Scientific portal on magnetism of rocks and soils..1992.
- [5] *D.M. Pechersky.* Iron from space. Scientific article, No. 6, 2010, pp. 68-77.
- [6] *N.A. Mezenin.* entertaining about iron. Second edition. Moscow, "Metallurgy", 1977.
- [7] *D.M. Pechersky.* Earth and Universe 6, 68–77 (2010).
- [8] *P. Tarakeshwar, P.R. Buseck, and F.X. Timmes.* The Astrophysical Journal 879, 2 (2019).
- [9] *D.M. Pechersky.* Earth and Universe Journal. ISSN: 0044-3948. 2010
- [10] Quran. Surah 56/57, verse 26.

STUDY OF THE RESPONSE OF SEMICONDUCTOR STRUCTURES TO EXTERNAL PERTURBATIONS

IBRAGIMKHAN K. KAMILOV, NAIDA S. ABAKAROVA

ik.kamilov@mail.ru, abakarova_naida@mail.ru

*Institute of Physics named after Kh. I. Amirkhanov,
94, Yaragsky str., Makhachkala, Russia*

This paper presents some previously obtained results of our experiments on the study of the impact of external perturbations on the behavior of nonlinear semiconductor systems. The presented experimental results confirm the theoretical models.

The mechanisms of conductivity of nonlinear circuits consisting of several tunnel diodes have been studied. Suppression of current branches of the current-voltage characteristic under noise influence has been discovered.

Keywords: synergetic, nonlinear dynamics, instability, control parameter, universal constant, semiconductors, circuits, tunnel diodes.

The impact of external parameters on complex dynamic systems leads to various phenomena of instability, generation of oscillations and waves, the emergence of chaotic states and the spontaneous formation of spatial and temporal structures. The study of nonlinear phenomena, non-equilibrium phase transitions and self-organization processes in a bulk and low-dimensional condensed medium with nonlinear properties and their response to external perturbations attracts scientists' strict attention. Due to the comparative ease of studying many effects, fine reproducibility and high spatiotemporal resolution, semiconductors have been selected as the most suitable model systems for studying complex nonlinear dynamics and synergetic processes.

A series of our works are devoted to experimental verification of the theory of nonlinear dynamic systems.

As a result of the research, new evolutionary scenario of the development of chaotic states in the electron-hole plasma of semiconductors, the phenomena of absolute negative resistance have been discovered. This work presents some results of our research in this area.

The experiments were originally aimed at confirming the theoretically predicted main universal transition to chaos, i.e. the double-period cascade (Feigenbaum scenario), the interchanging between different modes of oscillation (Pomeau–Manneville scenario) and the quasiperiodic transition to chaos (Ruel–Tackens–Newhouse).

Nonlinear dynamics associated with the development of Kadomtsev-Nedospasov instability (screw instability or oscillatory effect) has been experimentally studied in injected electron-hole plasma (EHP) of bulk germanium samples in longitudinal electric and magnetic fields at high values of supercritical parameters in the temperature range 77–300 K [1].

The influence of a harmonic signal of different amplitude and frequency on the instability of the current in the Ge EHP that was input into the system as an additional control parameter at the bifurcation points

of the evolutionary scenario has been studied in detail. At the same time, such phenomena characteristic of a dynamic system as frequency capture, amplification or attenuation of an external signal, as well as issues of stability and randomization of the system have been investigated. Some universal constant and critical indexes are defined.

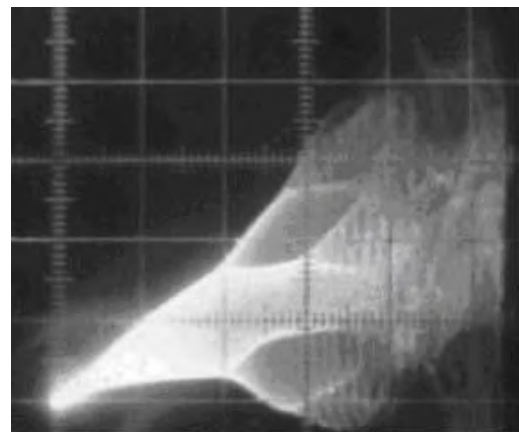


Fig.1. Feigenbaum scenario.

Figure 1 shows the results of a natural experiment carried out at $T=77$ K. The oscilloscope screen displays the Feigenbaum scenario, starting from the threshold of the Kadomtsev-Nedospasov instability up to the chaotic state. The constants δ calculated from our experiment differ significantly from the theoretically predicted ones. They do not coincide with each other, depending on the temperature and other conditions of the experiment. At the same time, the constant $\alpha \approx 2.5$ is in accordance with the theory within the limits of experimental error.

We have shown that several attractors with relevant basin of attraction can exist simultaneously in the same sample, depending on the local value of the electric field and the concentration of current carriers, i.e. the local electric field, and not the average $E_{cp} = V/L$ (where V - the voltage applied to the sample with length L) is the true parameter determining the scenario

for the development of a dynamic system. With the loss of spatial coherence between different parts of the sample, apparently, coupled multicomponent semiconductor system disintegrates into more independent subsystems with a large number of degrees of freedom, leading to chaotic behavior of the system under study.

During the experimental studies, the control parameters (or supercriticality parameters) for the system under study were not only the external electric and magnetic field, injection level, temperature, but also the angle φ between \mathbf{E} and \mathbf{H} , i.e. the deviation from their strict parallelism. It is known, that the oscillistor effect occurs in a solution $\varphi = \pm 7^\circ$ near $\mathbf{E} \uparrow \uparrow \mathbf{H}$. The development of screw instability according to the Feigenbaum evolutionary scenario occurs with a sufficiently strict positioning of the sample parallel to the magnetic field, i.e. at $\varphi \rightarrow 0^\circ$. We have experimentally confirmed that a large deviation from $\varphi \rightarrow 0^\circ$ leads to the development of an instability scenario through a quasi-periodicity (Fig. 2, Ruel-Tackens-Newhouse scenario).

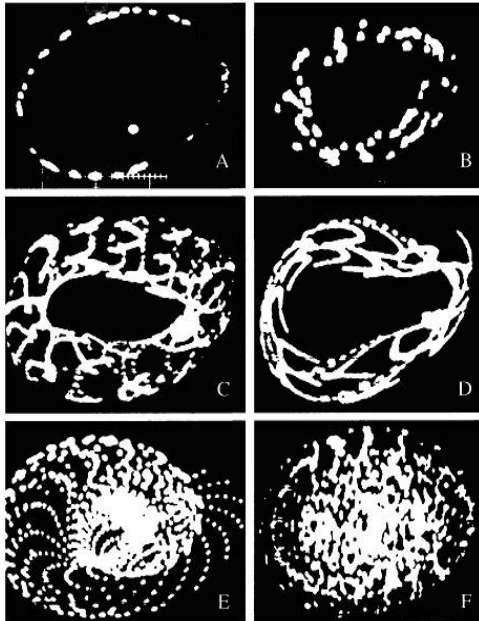


Fig. 2. Poincaré mapping (Ruel-Tackens-Newhouse scenario)

Depending on the angle φ , in the same sample at a given value of the magnetic field \mathbf{H} , we have observed the transitions to chaos both through the sequence of bifurcations doubling period and through the quasi-periodicity.

Figure 3 shows, without detailed analysis, a picture of dynamic chaos related to the case of transition to a chaotic state through intermittency (Pomeau-Manneville scenario), where bursts of randomness are clearly visible against the background of laminar phases.

All experiments were carried out in a steady-state mode on rectangular pulses, and the dynamics of the development of evolutionary scenarios were recorded

using triangular pulses of various durations and amplitudes.

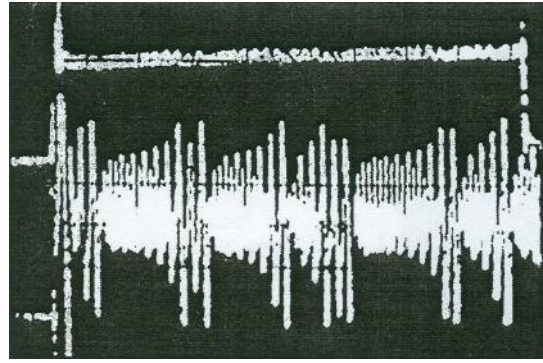


Fig. 3. Transition to a chaotic state through intermittency (Pomeau-Manneville scenario)

For comparison with the theory of nonlinear dynamic systems, phase portraits, bifurcational diagrams, two-dimensional Poincaré maps, power spectral characteristics were drawn based on experimentally obtained time, and fractal dimensions and Lyapunov exponents were calculated.

The recombination instability of the current in p-Ge (Au) during the experimental verification and a detailed study of a one-dimensional theoretical model developed for a gold-compensated electron germanium was discovered for the first time, when recombination instability in strong electric fields leads the system to instability and current oscillations [2]. The model takes into account not only the time, but also the spatial evolution of the high-field domain arising in the system when the applied voltage V and the emission coefficient β change, i.e. in the space of the voltage-emission parameters. Depending on the region of this parametric space, the system demonstrates three different modes of operation (ohmic, extinguished and fly-by-time), subdomains arise and other new properties are observed that are not typical of nonlinear systems.

The obtained experimental results fully confirm the theoretical model. Three modes of operation of the system are discovered: (ohmic, extinguished and fly-by-time). The existence of one-, two- and more subdomain states and order-disorder transitions in the system, carried out through intermittency or a non-standard scenario of transition to a chaotic state, have been established.

It is known, that noise in nonlinear systems can play a constructive role, inducing more ordered regimes, leading to the formation of regular structures, an increase in the degree of coherence of the signal-to-noise ratio, etc.

We also experimentally tested the theory of deterministic stochastic resonance [3] in a semiconductor bistable system based on double-injection structure p-Ge<Au> with S-shaped current-voltage characteristic (CVC), which in the switching area exhibits chaotic behavior with interchangeability.

We have also experimentally verified the theory of deterministic stochastic resonance [3] in a

semiconductor bistable system based on a double-injection p-Ge<Au> structure with an S-shaped current-voltage characteristic (CVC), which shows chaotic behavior with interchangeability in the switching region. The obtained results experimentally confirm most of the theoretical assumptions about the possibility of deterministic stochastic resonance in a real semiconductor bistable system with intermittency. In particular, the resonance amplification of external signal, the stochastic synchronization effect of the mean switching frequency of the bistable system and the forced frequency capture effect at large amplitudes of external signal, which is usually called «synchronization by extinguishing».

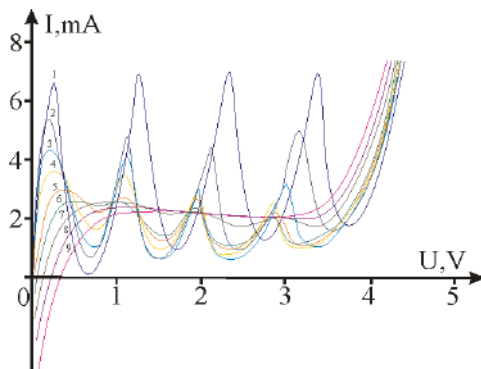


Fig. 4. CVC of a diode circuit exposed to a noise signal with a spectral density of 6 MHz with an intensity U, B: 1 – 0; 2 – 0.25; 3 – 0.5; 4 – 0.64; 5 – 0.88; 6 – 1.60; 7 – 2.40; 8 – 3.85; 9 – 4.20.

The study of the influence of external perturbations on the behavior of nonlinear circuits consisting of n series-connected semiconductor structures with negative differential resistances (NDR) is also quite promising.

Such circuits, when an electric voltage is applied, exhibit the properties inherent in superlattices and demonstrate bifurcation scenarios corresponding to them, leading to synchronization phenomena or current branches in this circuit. These studies have important

applied aspects related to a wide range of problems: from the dynamics of neural systems to multi-connections of solar panels, random-order memory devices, digital logic systems, etc.

We have experimentally studied [4] mechanisms of conductance of nonlinear circuits, consisting of tunnel diodes of serial production and general application, and their response to external harmonic (up to 100 MHz) and noise (with spectral density up to 7 MHz) high amplitude disturbance. On the CVC (Fig. 4) for the four-diode circuit, when a harmonic signal with a frequency of 50 MHz is superimposed and its amplitude increases to 2.1 V, the following characteristic features of the CVC have been discovered: a significant amplitude attenuation of the current branches; the occurrence of ambiguities on the CVC, i.e. an increase in the number of incident N-sections; the greatest influence of perturbations on the first branch of the CVC; the appearance of a section with absolute negative conductivity on the first branch of the CVC.

When a noise disturbance with a spectral density of up to 7 MHz is superimposed and the intensity of the CVC of the studied circuits increases, completely unexpected results are demonstrated (Fig.4): the amplitude of the current branches is completely suppressed; instead of the first branch, a section with absolute negative conductivity appears on the CVC; the rest of the circuit exhibits only a constant component approximately parallel to the voltage axis in the entire range of applied offsets.

It is possible that the suppression of current branches discovered during noise exposure will find a very interesting and important application for neural systems. It is known, that similar current branches are formed in neurons when they are excited by injection currents. Moreover, with intermediate injection currents, a so-called "firing" mode occurs, which plays a decisive critical role in such systems. If it becomes possible to extinguish such a critical "firing" mode in neural networks with the help of noise of a certain spectral composition and intensity, then the importance of the analogy of the result obtained in nonlinear circuits will become obvious.

[1] I.K. Kamilov, N.S. Abakarova, Kh. O. Ibragimov, K.M. Aliev. Nonlinear phenomena and chaos in germanium oscillitor. J. Phys.: Condens. Matter. - 2001. - V. 13. - pp. 4519 - 4524
 [2] И.К. Камиллов, Н.С. Абакарова, Х.О. Ибрагимов, К.М. Алиев. Рекомбинационная неустойчивость тока в германии с золотом в нелинейном режиме. Письма в ЖТФ. - 2001.- т. 27, № 5. - с. 24 - 31

[3] И.К. Камиллов, К.М. Алиев, Х.О. Ибрагимов, Н.С. Абакарова. Детерминированный стохастический резонанс в полупроводниковой бистабильной системе. Письма в ЖТФ. -2004. -т.30, № 4.-с. 25 – 32
 [4] К.М. Алиев, И.К. Камиллов, Х.О. Ибрагимов, Н.С. Абакарова. Отклик полупроводниковых нелинейных цепей на внешние возмущения. ФТП, 2015, т. 49, № 3, с.413-417

TRANSPORT PHENOMENA AND DIELECTRIC PROPERTIES OF MULTICOMPONENT $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ ($x = 0 - 1.0$)

S.N. MUSTAFAEVA¹, S.M. ASADOV^{2,3}

¹*Institute of Physics, Ministry of Science and Education of Azerbaijan, Baku,
AZ-1143 Azerbaijan*

²*Scientific Research Institute Geotechnological Problems of Oil, Gas and Chemistry,
Azerbaijan State Oil and Industry University, Baku, AZ-1010 Azerbaijan*

³*Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry, Azerbaijan National Academy of Sciences,
Baku, Az-1143 Azerbaijan*

E-mail: solmust@gmail.com

The dielectric properties of the prepared single-crystal samples of solid solutions $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ were studied in alternating electric fields with a frequency of $f = 5 \times 10^4 - 3.5 \times 10^7$ Hz. The relaxation character of the complex permittivity, the nature of dielectric losses, and the hopping mechanism of charge transfer in the $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ samples were established. It was shown that in $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$, with increasing x , the conductivity, average distance, and hopping time of charge carriers over the forbidden band decrease, while the energy spread of states localized near the Fermi level and their concentration increase.

Keywords: transport phenomena, $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ solid solutions, alternating electric fields, frequency, complex permittivity, dielectric losses, charge transfer, localized states.

PACS: 61.72.-y; 71.20.Nr; 72.20.-i

Compounds of the TlGaX_2 ($X = \text{S, Se, Te}$) type [1-5] and solid solutions based on them $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ [6,7] are promising for use as active elements of semiconductor and optoelectronic devices in the visible range. The direct and indirect band gaps E_g of TlGaSe_2 are 2.08 and 1.93 eV, respectively [8]. For TlGaSe_2 , the following data for E_g are given in [9]: 1.95 eV for the indirect band gap and 2.11 eV for the direct band gap. E_g of the TlGaS_2 compound at 10 K is 2.62 eV [10], and the optical indirect and direct band gaps are 2.45 and 2.63 eV. TlGaSe_2 and TlGaS_2 crystals have a layered structure and are characterized by anisotropy of properties. TlGaSe_2 and TlGaS_2 crystals can be fabricated as two-dimensional (2D) layered structures due to weak van der Waals forces between their adjacent monolayers. TlGaSe_2 and TlGaS_2 are p -type semiconductors. Studies of crystals of solid solutions $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ have shown that they are characterized by a noticeable change in physical properties depending on the composition [6,7] and an intense photoluminescence spectrum in the visible range for all compositions.

The purpose of this work is to study the influence of the composition of the obtained solid solutions $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ ($x = 0 - 1.0$) on their dielectric characteristics and to establish the mechanism of charge transfer in them in alternating electric fields of the radio frequency range.

Samples $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ were synthesized from elements taken in stoichiometric ratios by directly alloying them in quartz ampoules evacuated to 10^{-3} Pa. High-quality single crystals were obtained from synthesized $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ by the Bridgman method.

The dielectric coefficients of the $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ samples were measured by the resonance method. The frequency range of the alternating electric field was $5 \times 10^4 - 3.5 \times 10^7$ Hz. Samples of $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ for electrical measurements were made in the form of flat capacitors. Silver paste was used as electrodes. Dielectric properties were measured in the direction perpendicular to the layers of $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ crystals. All dielectric measurements were carried out at 298 K.

The frequency dispersion of the real and imaginary components of the complex dielectric constant of samples $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ in the frequency range $f = 5 \times 10^4 - 3.5 \times 10^7$ Hz was revealed (Figures 1 and 2).

An increase in x in $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ crystals led to a significant decrease in the real and imaginary components of the complex dielectric permittivity.

The frequency dependences of the dielectric loss tangent ($\tan\delta$) in $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ solid solutions were characterized by a hyperbolic drop, indicating losses in through conductivity. An increase in the concentration of x in the $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ crystals led to a decrease in $\tan\delta$.

We also studied the frequency-dependent conductivity (σ_{ac}) of $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ solid solutions (Figure 3). The value of σ_{ac} for $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ solid solutions decreased by approximately two orders of magnitude as x increased from 0 to 1.0. In all the solid solutions studied, the frequency dependence $\sigma_{ac}(f)$ exhibited power-law regions $\sigma_{ac} \sim f^n$. In TlGaSe_2 , initially there was a dependence $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$, which then became flatter. In $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ crystals at $x > 0$, the sublinear sections $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ were replaced by superlinear sections ($n > 1$).

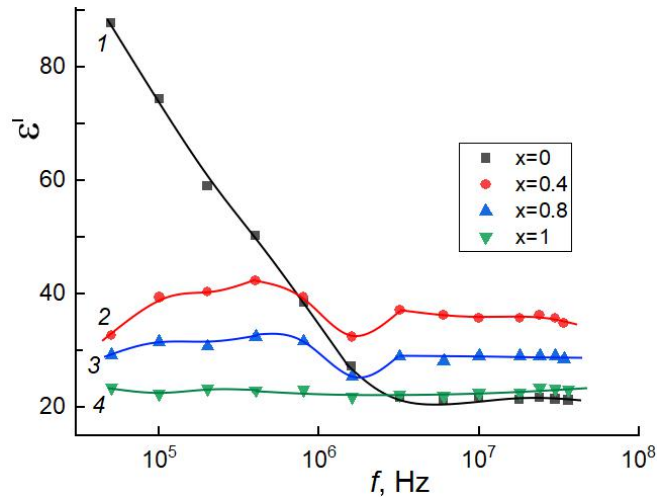


Fig. 1. Frequency dependences of the real part of complex dielectric permittivity of $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ crystals at various x : 0 (1); 0.4 (2); 0.8 (3) and 1.0 (4). $T = 298$ K.

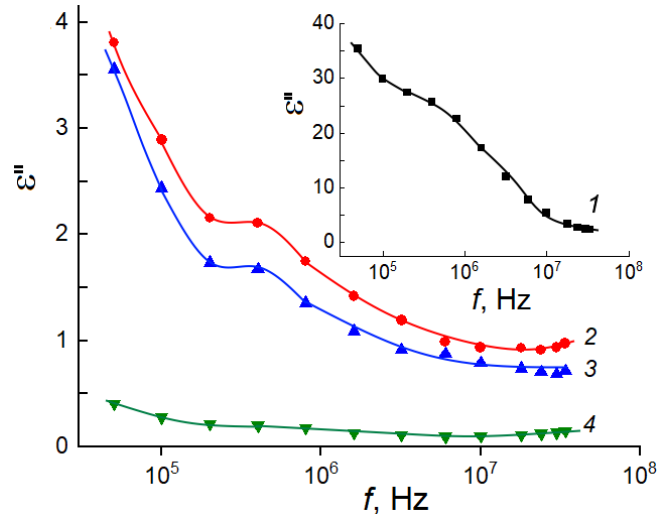


Fig. 2. Frequency dependences of the imaginary part of complex dielectric permittivity of $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ crystals at various x : 0 (1); 0.4 (2); 0.8 (3) and 1.0 (4). $T = 298$ K.

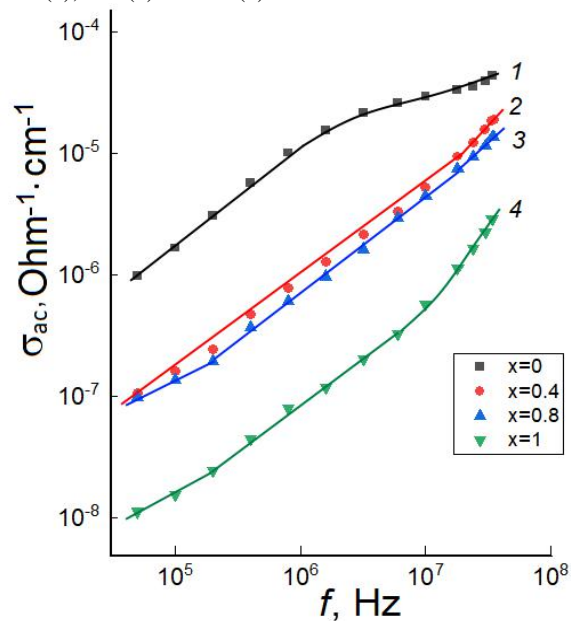


Fig. 3. Frequency-dependent conductivity of $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ solid solutions at various x : 0 (1); 0.4 (2); 0.8 (3) and 1.0 (4). $T = 298$ K.

The sublinear (power-law) frequency dependence of conductivity $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ indicates the hopping nature of transport. In this case, such a dependence is usually associated with jumps of charge carriers across localized states with the participation of phonons. This is the so-called relaxation hopping conduction.

The real part of conductivity at relatively low frequencies is determined by the phonon mechanism, and with increasing frequency, phononless hopping conductivity becomes predominant. This conductivity is characterized by a superlinear dependence $\sigma_{ac} \sim f^n$, where $n > 1$. In view of the above, the law we obtained $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ indicates a hopping mechanism of charge transfer across states localized in the vicinity of the Fermi level [11].

The parameters of localized states in $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ solid solutions have been calculated in terms of Mott theory for hopping

conductivity: the density of states near the Fermi level $N_F = 2.2 \cdot 10^{18} - 1.7 \cdot 10^{19} \text{ eV}^{-1} \text{cm}^{-3}$ and their energy spread $\Delta E = 0.005 - 0.15 \text{ eV}$, average time $\tau = 9.9 \cdot 10^{-8} - 1.2 \cdot 10^{-6} \text{ s}$ and distance $R = 81 - 240 \text{ \AA}$ of jumps.

An increase in x from 0 to 1.0 in $(\text{TlGaSe}_2)_{1-x}(\text{TlGaS}_2)_x$ solid solutions led to a decrease in the average values of the time and length of jumps, as well as to an increase in the energy spread of states localized near the Fermi level and the concentration of deep traps responsible for the transfer of charge carriers in alternating electric fields of the radio frequency range.

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare that they have no conflict of interest.

-
- [1] *S.N. Mustafaeva*. The interlayer energy barrier in the anisotropic $\text{TlB}^{\text{III}}\text{C}_2^{\text{VI}}$ monocystals. *Fizika*. 2005. V. 11. № 1-2. P. 36–37.
- [2] *A.U. Sheleg, K.V. Iodkovskaya, N.F. Kurilovich*. Effect of γ irradiation on the low-temperature electrical conductivity and dielectric properties of TlGaSe_2 crystals. *Phys. Solid State*. 1998. V. 40. № 7. P. 1208–1210. <https://doi.org/10.1134/1.1130522>.
- [3] *O.B. Plyushch, A.U. Sheleg*. Polytypism and phase transitions in TlInS_2 and TlGaSe_2 crystals. *Crystallogr. Rep.* 1999. V. 44. № 5 P. 813–817.
- [4] *S.N. Mustafaeva*. Frequency dispersion of dielectric coefficients of layered TlGaS_2 single crystals. *Phys. Solid State*. 2004. V. 46. № 6. P. 1008–1010. <https://doi.org/10.1134/1.1767234>.
- [5] *A.U. Sheleg, V.G. Gurtovoi, V.V. Shevtsova, S.N. Mustafaeva, E.M. Kerimova*. Effect of ionizing radiation on the dielectric characteristics of TlInS_2 and TlGaS_2 single crystals. *Phys. Solid State*. 2012. V. 54. № 9. P. 1870–1874. <https://doi.org/10.1134/s1063783412090284>.
- [6] *N.M. Gasanly*. Compositional dependence of refractive index and oscillator parameters in $\text{TlGa}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_2$ layered mixed crystals ($0 \leq x \leq 1$). *Mat. Chem. Phys.* 2012. V. 136. № 1. P. 259–263. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2012.06.064>.
- [7] *M. Isik, N.M. Gasanly*. Ellipsometry study of interband transitions in $\text{TlGaS}_{2-x}\text{Se}_{2-x}$ mixed crystals ($0 \leq x \leq 1$). *Optics Commun.* 2012. V. 285. № 20. P. 4092–4096. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2012.06.029>.
- [8] *M.M. El-Nahass, M.M. Sallam, S.A. Rahman, E.M. Ibrahim*. Optical, electrical conduction and dielectric properties of TlGaSe_2 layered single crystal. *Solid State Sciences*. 2006. V. 8. № 5. P. 488–499. <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2005.10.020>.
- [9] *H.-J. Song, S.-H. Yun, W.-T. Kim*. Photoluminescence properties of TlGaS_2 and $\text{TlGaS}_2\text{:Er}^{3+}$ single crystals. *J. Phys. Chem. Solids*. 1995. V. 56. № 6. P. 787–790. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(94\)00265-7](https://doi.org/10.1016/0022-3697(94)00265-7).
- [10] *N.M. Gasanly*. Coexistence of indirect and direct optical transitions, refractive indices, and oscillator parameters in TlGaS_2 , TlGaSe_2 , and TlInS_2 layered single crystals. *J. Korean Phys. Soc.* 2010. V. 57. № 1. P. 164–168. <https://doi.org/10.3938/JKPS.57.164>.
- [11] *N.F. Mott, E.A. Davis*. *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*. OUP Oxford, 2012. 590 p. ISBN: 9780199645336.

DIELECTRIC AND TRANSPORT PROPERTIES OF $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ IN ALTERNATING ELECTRIC FIELDS

S.N. MUSTAFAEVA^{1,4}, S.M. ASADOV^{2,3}, M.M. GODJAEV⁴

¹*Institute of Physics, Ministry of Science and Education of Azerbaijan, Baku, Az-1073
Azerbaijan*

²*Scientific Research Institute Geotechnological Problems of Oil, Gas and Chemistry,
Azerbaijan State Oil and Industry University, Baku, AZ-1010 Azerbaijan*

³*Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry, Azerbaijan National Academy of Sciences,
Baku, Az-1073 Azerbaijan*

⁴*Sumgayit State University of the Ministry of Science and Education of Azerbaijan
E-mail: solmust@gmail.com*

The nature of dielectric losses (conductivity losses) and the hopping mechanism of charge carrier transfer in the $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ solid solutions ($x = 0.1, 0.2, 0.4$) in alternate electric fields ($f = 5 \times 10^4 - 3.5 \times 10^7$ Hz) were established. The parameters of localized states in the forbidden band of the samples were determined. It was found that the values of the real and imaginary parts of complex dielectric permittivity, dielectric losses tangent and conductivity of studied samples increased with increasing molar fraction (x) of TlGaSe_2 .

Keywords: transport properties, $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ solid solutions, alternating electric fields, frequency, complex permittivity, dielectric losses, charge transfer, localized states.

PACS: 61.72.-y; 71.20.Nr; 72.20.-i

Semiconductor ternary compounds TlInS_2 and TlGaSe_2 have a layered structure, a small difference in lattice periods and are characterized by strong anisotropy of physical properties, high photosensitivity and optical transparency. Therefore, these materials are promising for applications in photodetectors, photoconverters, pulsed laser radiation detectors and X-ray recording devices.

The physical and physicochemical properties of TlInS_2 and TlGaSe_2 crystals have been the subject of a number of studies. In particular, the results of low-temperature X-ray studies of TlInS_2 , TlGaSe_2 and TlGaSe_2 single crystals show that phase transitions occur in them. At room temperature they belong to the layered structural type $\beta\text{-TlInS}_2$ [1]. The dielectric properties and alternating current conductivity of TlInS_2 and TlGaSe_2 single crystals, as well as the effect of γ -irradiation on them, were studied in [2-4].

The aim of this work is to study the dielectric properties of single crystals of solid solutions $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ ($x = 0.1, 0.2, 0.4$ mole fractions) and to establish the mechanism of current flow in alternating electric fields in the radio frequency range.

Single-crystal samples of $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ for electrical measurements were made in the form of flat capacitors. Silver paste was used as electrodes for the samples. The dielectric properties of the samples were measured in the direction perpendicular to the layers of single-crystal $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$. The thickness of the studied samples was 650–800 μm , and the area of the plates was $6.5 \times 10^{-2} - 10^{-1} \text{ cm}^2$. Dielectric measurements of the samples were carried out using the resonance method at room temperature.

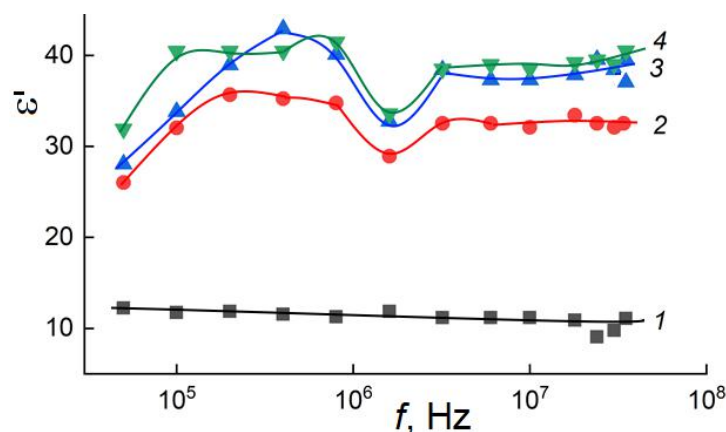


Fig. 1. Frequency dependences of the real component (ϵ') of the complex permittivity of single crystals of solid solutions $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ at $x = 0$ (1), 0.1 (2), 0.2 (3), 0.4 (4). $T = 298$ K.

Figure 1 shows the frequency dependences of the real part of the complex permittivity $\epsilon'(f)$ of $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ single crystals. It is evident that with increasing x the value ϵ' for $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ samples increases. The value ϵ'' also increased with increasing x in $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ single crystals.

Figure 2 shows the frequency dependences of the dielectric loss tangent ($\tan\delta$) in a TlInS_2 single crystal (curve 1) and a $(\text{TlInS}_2)_{0.6}(\text{TlGaSe}_2)_{0.4}$ solid solution (curve 2). The $\tan\delta(f)$ dependences for $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ solid solutions of compositions $x = 0.1$ and 0.2 were located between curves 1 and 2. In all cases, the $\tan\delta(f)$ curves had a decreasing character with increasing frequency, which indicates losses of through conductivity [5] in the $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ crystals. With an increase in the TlGaSe_2 concentration, the

dielectric losses in the $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ crystals increased.

Figure 3 shows the frequency dependences of the alternating current conductivity (ac conductivity) of $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ single crystals. For the TlInS_2 single crystal, the $\sigma_{ac}(f)$ dependence consisted of a long section $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ up to the frequency $f = 10^7$ Hz, followed by a superlinear region with a further increase in frequency to $f = 3.5 \times 10^7$ Hz. In solid solutions $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$, the conductivity initially depended weakly on frequency. Starting with $f = 10^5$ Hz and up to 10^7 Hz, the dependence $\sigma_{ac}(f)$ described by the regularity $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$, which then turned into a superlinear section. The values of σ_{ac} of solid solutions $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ differed little from each other. But these values of σ_{ac} exceeded σ_{ac} of TlInS_2 single crystals by almost an order of magnitude.

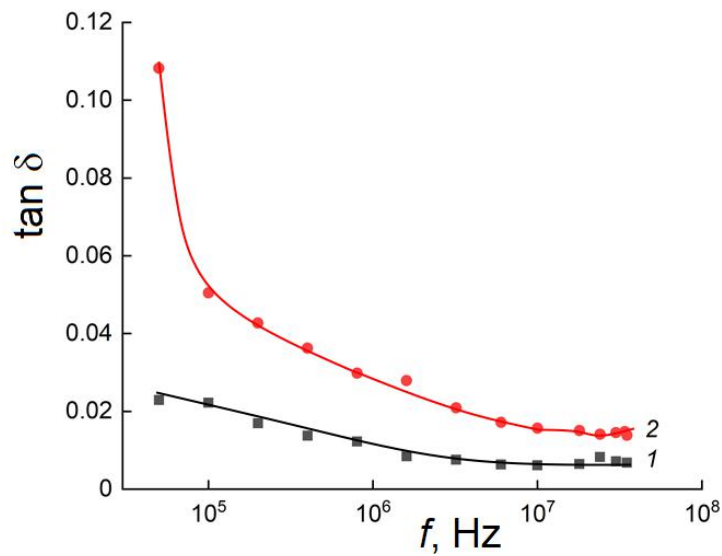


Fig. 2. Dependence of the tangent of the dielectric loss angle in $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ single crystals on the frequency at $x = 0$ (1), 0.4 (2). $T = 298$ K.

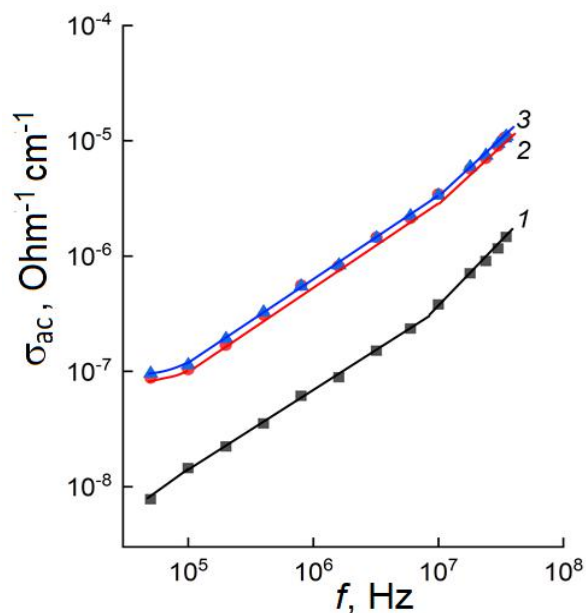


Fig. 3. Frequency-dependent conductivity on alternating current (ac -conductivity) of $(\text{TlInS}_2)_{1-x}(\text{TlGaSe}_2)_x$ single crystals at $x = 0$ (1), 0.1 (2), 0.4 (3). $T = 298$ K.

The experimental dependence $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ obtained by us in single crystals of solid solutions (TlInS₂)_{1-x}(TlGaSe₂)_x indicates that it is caused by jumps of charge carriers between states localized in the forbidden zone. These can be states localized near the edges of allowed zones, as well as states localized near the Fermi level [6]. Due to the fact that under experimental conditions the conductivity through states near the Fermi level always dominates over the conductivity through states near the edges of allowed bands, the law $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ that we obtained indicates a hopping mechanism of charge transfer through states localized in the vicinity of the Fermi level. For such a charge transfer mechanism, the following expression was obtained in [7]:

$$\sigma_{ac}(f) = \frac{\pi^3}{96} e^2 k T N_F^2 a^5 f \left[\ln \left(\frac{v_{ph}}{f} \right) \right]^4,$$

where e is the electron charge; k is the Boltzmann constant; N_F is the density of states near the Fermi level; $a = 1/\alpha$ 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 this formula, the ac conductivity depends on the frequency as $f \left[\ln(v_{ph}/f) \right]^4$. The frequency range we use corresponds to the condition $f \ll v_{ph}$. Under this condition, the value of σ_a is approximately proportional to $f^{0.8}$. Using given formula, the density of states at the Fermi level was calculated from the experimentally found values of $\sigma_{ac}(f)$: $N_F = 5.8 \times 10^{18} - 1.6 \times 10^{19} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3}$.

The theory of hopping conductivity in alternating current allows us to determine the average hopping distance (R) of charge carriers between localized states in forbidden gap of (TlInS₂)_{1-x}(TlGaSe₂)_x crystals: $R = 86 \text{ \AA}$. The average time of charge carrier jumps in (TlInS₂)_{1-x}(TlGaSe₂)_x crystals was determined to be $\tau = 2 \times 10^{-7} \text{ s}$.

Thus, with increasing concentration of TlGaSe₂ in (TlInS₂)_{1-x}(TlGaSe₂)_x, the values of ϵ' , ϵ'' , $\tan\delta$ and σ_{ac} of crystals increase. The frequency dispersion of these dielectric parameters also increases.

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare that they have no conflict of interest.

-
- [1] A.U. Sheleg, V.V. Shautsova, V.G. Hurtavy, S.N. Mustafaeva. Low-temperature X-ray diffraction studies of TlInS₂, TlGaS₂ and TlGaSe₂ single crystals. *J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2013. № 11.P.39-42. <https://doi.org/10.1134/s1027451013060190>.
- [2] S.N. Mustafaeva, M.M. Asadov, Ismailov A.A. Effect of γ -irradiation on the dielectric properties and ac -conductivity of a TlInS₂ single crystal. *Phys. Solid State*. 2009. Vol. 51. № 11. P. 2140-2143.
- [3] S.N. Mustafayeva, M.M. Asadov, A.A. Ismailov. Radiation effects in TlGaSe₂ single crystals. *Applied Physics*. 2012. № 3. P. 19-23.
- [4] A.U. Sheleg, K.V. Iodkovskaya, N.F. Kurilovich. Effect of γ -irradiation on the electrical conductivity and dielectric properties of TlGaSe₂ crystals at low temperatures // *Phys. Solid State*. 1998. Vol. 40. № 7. P. 1328-1331.
- [5] V.V. Pasyukov, V.S. Sorokin. *Materials of electronic engineering*. 6th ed., reprinted - St. Petersburg; Moscow; Krasnodar: Lan, 2004. 368 p. (In Russian)
- [6] N.F. Mott, E.A. Davis. *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*. OUP Oxford, 2012. 590 p. ISBN: 9780199645336.
- [7] M. Pollak. Frequency dependence of conductivity in amorphous solids. *Phil. Mag.* 1971. Vol. 23. P. 519-542.

**ELECTRICAL PROPERTIES OF SOLID SOLUTIONS OF THE
Sb₂Te₃-Bi₂Te₃ SYSTEM DOPED WITH GADOLINIUM IMPURITY****^{1,2}M.M. TAGIYEV, ²R.Y. ALIYEV, ³A.M. MAMMADZADEH, ²Kh.F. ALIYEVA,
²K.I. MAGERRAMOVA**¹*Azerbaijan State Economic University, Baku city, Istiglaliyat str., 6. AZ-1001,
Baku, Azerbaijan.*²*Institute of Physics named after G.B. Abdullaev Ministry of Science and Education. AZ-1073,
H. Javid ave., 131, Baku, Azerbaijan.*³*Institute of Biophysics Ministry of Science and Education, AZ1141, Z. Khalilov street, 117,
Baku, Azerbaijan**e-mail: mail_tagiyev@mail.ru*

The electrical conductivity (σ), thermoelectric power (α) and Hall coefficients (R_H) of Sb₂Te₃-Bi₂Te₃ solid solutions with gadolinium impurities were studied in the temperature range of 77÷300 K. It was found that gadolinium atoms, replacing bismuth atoms that create antistructural defects, thereby reduce the concentration of charge carriers created by these defects. This mechanism is also suitable for Sb₂Te₃-Bi₂Te₃-Gd₂Te₃ compositions. At a constant amount of Sb₂Te₃, with an increase in the amount of gadolinium in the alloy, the values of electrical conductivity and charge carrier concentration decrease.

Keywords: extrusion, annealing, solid solution, extrusion, texture.

1. INTRODUCTION

The ways of increasing the efficiency of thermoelectric materials are reduced to the creation of structural defects capable of influencing to varying degrees the processes of scattering of charge carriers and phonons. The preferential reduction of thermal conductivity, compared to electrical conductivity, is currently realized by using solid solutions with isovalent substitution, in particular, (SbBi)₂Te₃, for low-temperature p-branches and Bi₂(TeSe)₃ for n-branches [1-3].

In recent years, assumptions have been made about the possibility of increasing the thermoelectric efficiency of materials with two-dimensional and three-dimensional defects of the crystal structure, the distances between which are commensurate with the mean free path of charge carriers or the wavelength of acoustic phonons responsible for heat transfer. These assumptions are based on the possibility of creating conditions under which, in areas of the material with different physical properties, there is a stronger scattering of thermal vibrations than electrons and holes.

The features and mechanisms of action of rare earth element (REE) impurities on the electrophysical and thermal properties of solid solutions based on the Bi-Te-Se and Bi-Sb-Te systems, as well as the interaction of impurities in them during complex doping, have also been studied extremely insufficiently.

Therefore, the study of physical properties, including the clarification of the mechanisms of electron and phonon transfer in [(Sb₂Te₃)_{0.92}(Gd₂Te₃)_{0.08}] is an urgent task of thermoelectricity.

2. EXPERIMENTAL PART

The starting materials were antimony "Su-0000", bismuth grade "VI-000", zone-purified Te grade "T-3". All components were pre-purified.

The starting components and impurities were weighed with an accuracy of ± 0.0001 g. Samples with a low concentration of Gd were obtained by fusing a sample with a high concentration of Gd with an undoped sample. Gadolinium grade "GM-0" was used as a dopant.

The samples with an admixture of gadolinium (Gd) were synthesized in quartz ampoules evacuated to $\sim 10^{-3}$ Pa at a temperature of ~ 1350 K for 12 hours. During the synthesis, the ampoule with the substance was constantly shaken. Then it was sharply cooled (by lowering it into water) to room temperature.

Electrical conductivity (σ), thermo-emf (α) and Hall (R_H) coefficients, properties of the synthesized Sb₂Te₃-Bi₂Te₃ solid solutions with gadolinium impurities were studied in the temperature range of 77÷300 K [4]. For comparison, the Bi₂Te₃ compound was also synthesized and studied. And for the Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ compound, the values at ~ 300 K were taken from the literature [5]. The Bi₂Te₃ compound was also obtained by joint alloying of the pre-purified components in a quartz ampoule evacuated to a residual pressure of $\sim 10^{-3}$ Pa. The synthesis was carried out at ~ 950 K for three hours with continuous stirring of the melt.

3. RESULTS AND ITS DISCUSSION

The results of electrophysical parameters at ~ 77 and 300 K with a change in the amount of [(Sb₂Te₃)_{0.92}(Gd₂Te₃)_{0.08}] in Bi₂Te₃ are given in the table. As can be seen, with a decrease in the amount of

Bi_2Te_3 , the electrical conductivity (σ), the concentration of charge carriers (n) and the thermoelectric coefficient (α) decrease in absolute value. In addition, at high values of the amount of Bi_2Te_3 in solid solutions, the system has n-type conductivity, and at low values (~20-26 at.%) - p-type conductivity. The values of the electrophysical parameters for the pure Bi_2Te_3 compound, indicated in the table, are in good agreement with the values given in the literature [6]. In the Bi_2Te_3 compound, the maximum temperature is shifted towards an increase in the amount of bismuth. Excess bismuth atoms, replacing mainly $Te^{(2)}$ atoms, create antistructural defects. The formation of such antistructural defects is energetically more favorable. Thus, the energy of formation of antistructural defects (~ 0.4 eV) is three times less than the energy of formation of tellurium vacancies [7]. When adding Sb_2Te_3 to bismuth telluride, the deviation from stoichiometry increases even more. As a result, the hole concentration increases, and for the $Bi_{0.5}Sb_{1.5}Te_3$ composition, the value of the thermo-emf is $\alpha=140 \mu V/K$. On the other hand, the values of the Hall coefficients and thermo-emf obtained from measurements show that the hole

mobility increases when antimony telluride is added to bismuth telluride [8].

The ionic radii of gadolinium, antimony and bismuth atoms are 1.79, 1.61 and 1.82 Å, respectively [9]. Due to the proximity of the ionic radii of gadolinium and bismuth atoms (1.79 and 1.82), it can be said that gadolinium atoms introduced into solid solutions of the composition $(Bi_2Te_3)_{1-x}(Sb_2Te_3)_x$ will primarily replace bismuth atoms. Therefore, with an increase in $[(Sb_2Te_3)_{0.92}(Gd_2Te_3)_{0.08}]$ in the Sb_2Te_3 - Bi_2Te_3 - Gd_2Te_3 compositions, the excess of bismuth atoms will also decrease, i.e. the concentration of charge carriers (electrons) created in the solid solution due to the excess of bismuth will decrease, and the concentration and mobility of holes will increase. As a result, the system changes from n-type conductivity to p-type conductivity.

Pure Bi_2Te_3 compound has p-type conductivity and at room temperature its electrical conductivity is $700-800 \text{ Ohm}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$ [9]. With an increase in the amount of Bi_2Te_3 in the $[(Sb_2Te_3)_{0.92}(Gd_2Te_3)_{0.08}]$ - Bi_2Te_3 system, σ decreases and drops to a value of ~500 $\text{Ohm}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$.

Table

Electrophysical parameters of the studied compositions

SAMPLES	AT 77 K				AT 300 K			
	σ , $\text{Ohm}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$	α , mkV/K	n , cm^{-3}	μ , $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{c}$	σ , $\text{Ohm}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$	α , mkV/K	n , cm^{-3}	μ , $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{c}$
Bi_2Te_3	4800	-77	$3,6\cdot 10^{18}$	2223	520	-163	$3,6\cdot 10^{18}$	947
Sb_2Te_3			-	-	718	106	$9\cdot 10^{18}$	490
$[(Sb_2Te_3)_{0.92}(Gd_2Te_3)_{0.08}]_{0.05}[Bi_2Te_3]_{0.95}$	4652	-53	$1,5\cdot 10^{20}$	221	1248	-120,6	$1,25\cdot 10^{20}$	62
$[(Sb_2Te_3)_{0.92}(Gd_2Te_3)_{0.08}]_{0.10}[Bi_2Te_3]_{0.90}$	3543	-65	$7,6\cdot 10^{19}$	205	944	-130	$1,04\cdot 10^{20}$	57
$[(Sb_2Te_3)_{0.92}(Gd_2Te_3)_{0.08}]_{0.15}[Bi_2Te_3]_{0.85}$	3058	-71	$6,3\cdot 10^{19}$	201	760	-139	$9,1\cdot 10^{19}$	51
$(Sb_2Te_3)_{0.72}(Gd_2Te_3)_{0.02}(Bi_2Te_3)_{0.26}$	1240	82	$2,4\cdot 10^{18}$	885	650	200	$2,4\cdot 10^{18}$	440
$(Sb_2Te_3)_{0.74}(Bi_2Te_3)_{0.24}(Gd_2Te_3)_{0.02}$	1100	69	$2,7\cdot 10^{19}$	240	255	165	$2,8\cdot 10^{19}$	61
$(Sb_2Te_3)_{0.74}(Bi_2Te_3)_{0.20}(Gd_2Te_3)_{0.06}$	220	40	$2,5\cdot 10^{19}$	63	110	105	$2,4\cdot 10^{19}$	32

At 77 K, the ratio increases even more and reaches a value of ~3. This indicates that an increase in σ and a decrease in the concentration of charge carriers n in the $[(Sb_2Te_3)_{0.92}(Gd_2Te_3)_{0.08}]$ compositions are associated with the influence of gadolinium. It can be assumed that gadolinium atoms, replacing bismuth atoms that create antistructural defects, thereby reduce the concentration of charge carriers created by these defects. This mechanism is also suitable for the Sb_2Te_3 - Bi_2Te_3 - Gd_2Te_3 compositions. Moreover, here, with a constant amount of Sb_2Te_3 , with an increase in the amount of gadolinium in the alloy, the values of electrical conductivity and charge carrier concentration decrease.

The temperature dependences of the electrophysical parameters (σ and α) for the studied compositions are shown in Fig. 1, 2. As can be seen from the figures, for all curves the σ (T), α (T) dependences have a metallic character - with an increase in temperature, σ decreases, α increases, and the Hall coefficient does not change with temperature.

According to the temperature dependence of the Hall coefficient in the temperature range of 77-300K, the concentration of charge carriers is 10^{18} - 10^{20} cm^{-3} and does not change with temperature. The indicated temperature dependences of electrical conductivity and the Hall coefficient are characteristic of partially degenerate semiconductors.

The temperature dependence of the Hall mobility $\mu = R_H\sigma$ shows that in the specified compositions in the temperature range of 77-300 K the charge carriers are scattered mainly by acoustic lattice vibrations (phonons). Fig. 3 shows the dependence of the magnetoresistance on the magnetic field strength for the specified compositions. As can be seen, only for the composition $(Sb_2Te_3)_{0.72}(Bi_2Te_3)_{0.26}(Gd_2Te_3)_{0.02}$ a non-zero magnetoresistance is observed. This indicates that this composition is a non-degenerate semiconductor, while the other compositions are degenerate semiconductors.

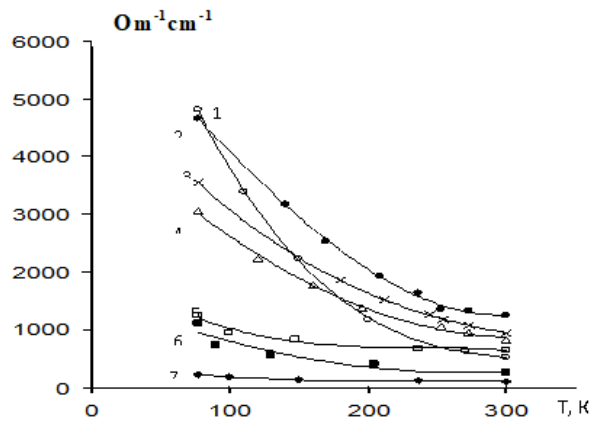


Fig. 1. Temperature dependences of electrical conductivity.
 1- $[(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{0.92}(\text{Gd}_2\text{Te}_3)_{0.08}]_{0.05}[\text{Bi}_2\text{Te}_3]_{0.95}$, 2- $[(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{0.92}(\text{Gd}_2\text{Te}_3)_{0.08}]_{0.10}[\text{Bi}_2\text{Te}_3]_{0.90}$,
 3- $[(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{0.92}(\text{Gd}_2\text{Te}_3)_{0.08}]_{0.15}[\text{Bi}_2\text{Te}_3]_{0.85}$, 4- $(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{0.74}(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{0.24}(\text{Gd}_2\text{Te}_3)_{0.02}$,
 5- $(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{0.72}(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{0.26}(\text{Gd}_2\text{Te}_3)_{0.02}$, 6- $(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{0.74}(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{0.20}(\text{Gd}_2\text{Te}_3)_{0.06}$, 7- Bi_2Te_3

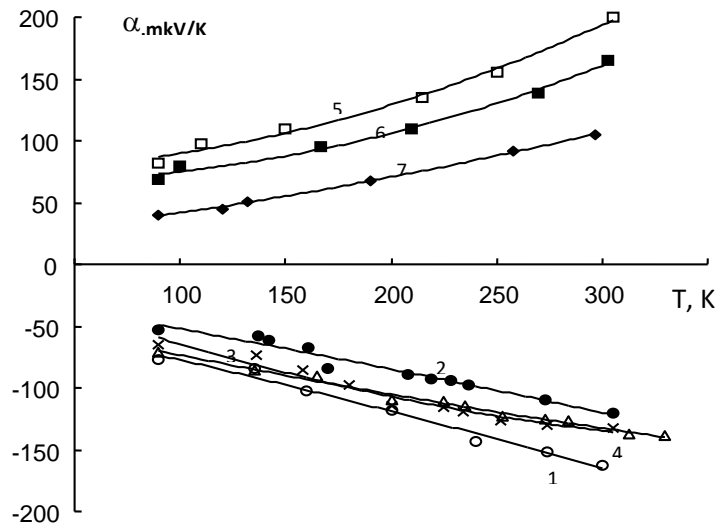


Fig. 2. Temperature dependences of the thermoelectric coefficient. The designations are the same as in Fig. 1.

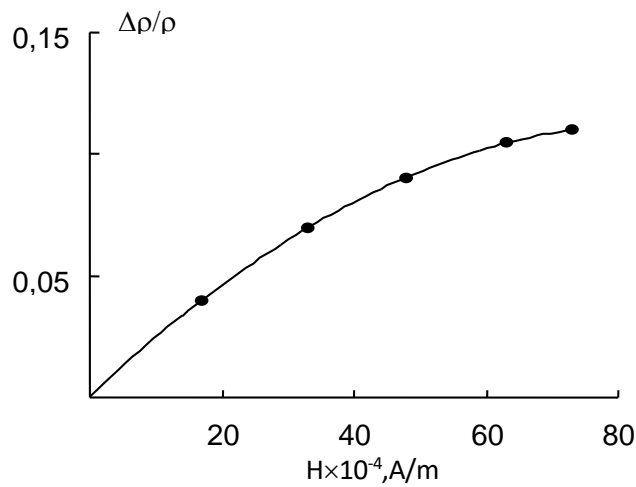


Fig. 3. Dependence of specific resistance on magnetic field strength.

The analysis of the obtained experimental data shows that for the specified composition the dependence $\frac{\Delta\rho}{\rho_0} \sim B^2$ is in good agreement with the value of A for the case of scattering on lattice vibrations.

Taking into account the above, taking $A=1.18$ for samples of the composition Bi_2Te_3 and $(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{0.72}(\text{Gd}_2\text{Te}_3)_{0.02}(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{0.26}$, and $A=1$ for other compositions, the concentrations of electrons (for n-type samples) and holes (for p-type samples) were calculated (Table).

The mobilities of electrons and holes were calculated using the values of the Hall coefficient and electrical conductivity from the expression $\mu=P_H \cdot \sigma$. For this purpose, in order to increase the accuracy, we used the Hall coefficient values for the samples measured at ~ 77 K. Since the charge carrier mobility at ~ 77 K is higher than the mobility at ~ 300 K, the Hall coefficient is measured with greater accuracy at low temperatures. Taking into account the fact that the charge carrier concentration determined at 77 K does not change down to room temperature, the charge carrier mobility was calculated in the temperature range of $77 \div 300$ K. It was found that for all compositions, starting from ~ 77 K, the mobility decreases with increasing temperature according to the law $\mu \sim T^{-n}$ (for both electrons and holes). The value of the temperature index n changes from 1.65 (for Bi_2Te_3 samples) to ~ 1.35 . This indicates that in the range of $\sim 77 \div 300$ K in the indicated compositions, electrons and holes are scattered mainly by thermal vibrations of the lattice.

Such a scattering mechanism also results from the magnetoresistive effect.

It is evident that with the increase of the amount of gadolinium in the compositions the mobility of electrons and holes decreases sharply (except for the composition $(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{0.72}(\text{Gd}_2\text{Te}_3)_{0.02}(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{0.26}$). The reason for this is the increase of scattering of electrons and holes with the formation of a triple system. It can also be assumed that the effective cross-section of scattering centers for electrons and holes created by gadolinium atoms is of sufficiently great importance. Thus, as already noted above, with the addition of Sb_2Te_3 to Bi_2Te_3 the mobility of holes increases.

4. CONCLUSION

Thus, it was found that gadolinium atoms, replacing bismuth atoms that create antistructural defects, thereby reduce the concentration of charge carriers created by these defects. This mechanism is also suitable for $\text{Sb}_2\text{Te}_3\text{-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Gd}_2\text{Te}_3$ compositions. At a constant amount of Sb_2Te_3 , with an increase in the amount of gadolinium in the alloy, the values of electrical conductivity and concentration of charge carriers decrease. With an increase in the amount of gadolinium in the compositions, the mobility of electrons and holes also decreases sharply (with the exception of the composition $(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{0.72}(\text{Gd}_2\text{Te}_3)_{0.02}(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{0.26}$). The reason for this is an increase in the scattering of electrons and holes with the formation of a ternary system. It can also be assumed that the effective cross section of the scattering centers for electrons and holes created by gadolinium atoms is quite significant.

-
- [1] *M.M. Tagiev*. Extruded materials based on solid solutions $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$, $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ and $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$. *Physics*. 2009. V. X. № 2. pp.43-51
 - [2] *L.D. Ivanova*. Thermoelectric materials for different temperature levels. *Semiconductors*. 2017. V. 51. № 7. pp. 909-912.
 - [3] *L.D. Ivanova, L.I. Petrova, Yu.V. Granatkina, V.S. Zemskov et al.* Extruded thermoelectric materials based on solid solutions of the $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Bi}_2\text{Se}_3$ system. *Inorganic materials*. 2009. V. 45. № 2. pp. 159-164.
 - [4] *R.A. Ismayilova, I.B. Bakhtiyarly, B.Sh. Barkhalov, M.M. Tagiev, R.Yu. Aliev*. Thermoelectric properties of solid solutions based on antimony, gadolinium and bismuth tellurides. *Thermoelectrics and their applications*, RAS, St. Petersburg, 2008. pp. 106-109.
 - [5] *A.I. Belyaev, E.A. Zhemchuzhina*. Surface phenomena in metallurgical processes, Moscow: Metallurgical Publishing House, 1982. 143 p.
 - [6] *D.M. Chyzhikov, V.P. Schastlivy*. Tellurium and tellurides. *M.Nauka* 1966. 279 p.
 - [7] *S. Miura, Y. Sato, K. Fukuda* and oll. Texture and thermoelectric properties of hot-extruded Bi_2Te_3 -compound. *Materials Science and Engineering*, 2000. V. 277. № 1. pp.244-249.
 - [8] *L.D. Ivanova, M.A. Korzhuev*. Single crystals $(\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3)_{0.96}(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_{0.04}$, intercalated with Cu. *Inorg. Metarials*, 2006. V. 42. № 7. pp. 712-716.
 - [9] *S.S. Gorelik, M.Ya. Dashevsky*. *Materials Science of Semiconductors and Dielectrics*, Moscow: 1988. 574p.
 - [10] *Chang-Won Hwang, Dow-Bin Hyun, Heon-Phil Ha* and oll. Effects of excess Te on the thermoelectric properties of p-type 25% Bi_2Te_3 – 75% Sb_2Te_3 single crystal and hot-pressed sinter. *J. of Materials Science*, 2001. V. 36. № 3. pp.3291-3297.

FORMATION OF TlGaSe₂ AMORPHOUS FILMS UNDER THE EFFECT OF Ge ATOMS

E.Sh. ALEKPEROV, G.B. IBRAGIMOV, A.M. NAZAROV, A.M. NARIMANZADE

¹Baku State University, Baku, Azerbaijan, alekperoveldar@mail.ru

²Institute of Physics named after G.M.Abdullayev. Baku, Azerbaijan

There has been investigated TlGa_{1-x}Ge_xSe₂ (x=0.02:0.08) compound amorphous films of 35 nm in thickness by high-energy electron diffraction method (HEED). It is established that by interacting with triple compound atoms with Ge interstitial ones as an impurity the distance between atoms in films increases from 3% up to 7%. According to the mentioned increase the distance between atoms, there has been observed of coordinate maximum areas and also with the temperature range of amorphous film formation. In this case it is possible to control precisely amorphous thin film parameters.

PACS: 61:66 Fn

Keywords: semiconductor, electron diffraction analysis, doping, structure, amorphous film.

INTRODUCTION

It is known that semiconductive compound of A³B³C₂⁶ group are widely used in instrument-making, optoelectronics [1-5]. Taking into consideration the demands for semiconductors with novel properties we investigate TlGaSe₂ half-valance amorphous films with Ge interstitial atoms in small concentrations. TlGaSe₂ compound as one of the mentioned group involves two different structural units as tetrahedron with Ga³⁺ ions and octahedron with Tl⁺ ions, this it has specific structure of crystal lattice [6]. Investigation of thin film atomic structure is carried out preferably by electron diffraction methods Bogarde and Gilson [7].

EXPERIMENTAL PART

In this paper by method of high-energy electron diffraction there have been investigated TlGa_{1-x}Ge_xSe₂ amorphous films (x=0.01÷0.08) of 35 nm in thickness obtained by simultaneous evaporation of synthesized single crystal TlGaSe₂ and Ge at room temperature from two different tungsten furnaces in vacuum ~4x10⁻⁵ Pa in installation VUP-5 [8, 9]. Given films are covered by carbon film ~3 nm in thickness top and bottom. Freshly spalled single crystals NaCl, KJ and celluloid on the grid are served as a substrate. The rate of molecular vapor deposition in vacuum is 3 nm/sec. Film thickness is read on spectrometer "Spekord 210 plus" and film composition is read on atomic absorption spectrophotometer "Shimadzu AA-6300". Electrometric system of the installation EMR-102 for recording diffraction reflection intensities improves significantly the structure determination accuracy. Incoherent background metering and experimental intensity curve normalization are made by Nabitovich method [10].

RESULTS AND THEIR DISCUSSION

Electron diffraction patterns of TlGa_{0.96}Ge_{0.04}Se₂ amorphous films (Fig.1) taken on the installation EMR-102 have diffusion rings with the values

$S = 4\pi\sin\theta/\lambda = 21.52, 34.46, 44.83 \text{ nm}^{-1}$. Diffusion maxima become distinct and are exceptional in electron diffraction patterns with ageing films in vacuum within 5-6 hours at room temperature.

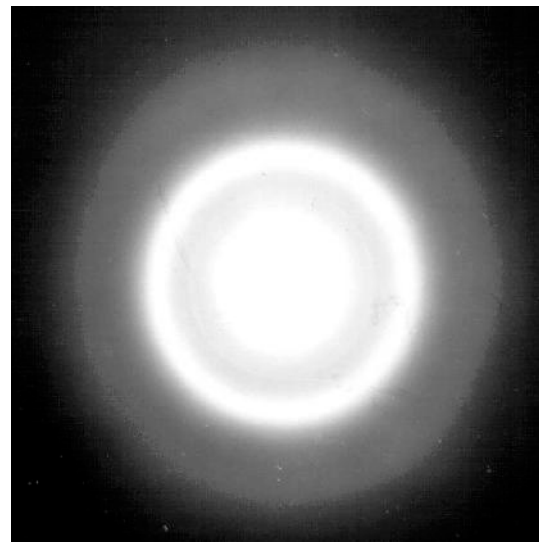


Fig. 1. Electron diffraction patterns of TlGa_{0.96}Ge_{0.04}Se₂ amorphous film.

By electron diffraction pattern interpretation based on data of recording unit interference function ($I_x(S)/m^2(S)$ and $I_o(S)/f^2(S)$) that is characteristic of short-range atomic order in TlGa_{0.96}Ge_{0.04}Se₂ amorphous films, the radial atom distribution curve (RADC) has been obtained (Fig.3).

When interpreting the electron diffraction patterns, taking into account the data from the recording unit for intensities (Fig. 2) and using the interference function ($I_e(s)/\sum_m f_m^2(s)$ and $I_c(s)/\sum_m f_m^2(s)$),

which characterizes the short-range atomic order in TlGa_{0.96}Ge_{0.04}Se₂ amorphous films, the radial atom distribution curve (RADC) has been obtained (Fig. 3). RADC calculations were performed using the RADIADIAS program on a computer.

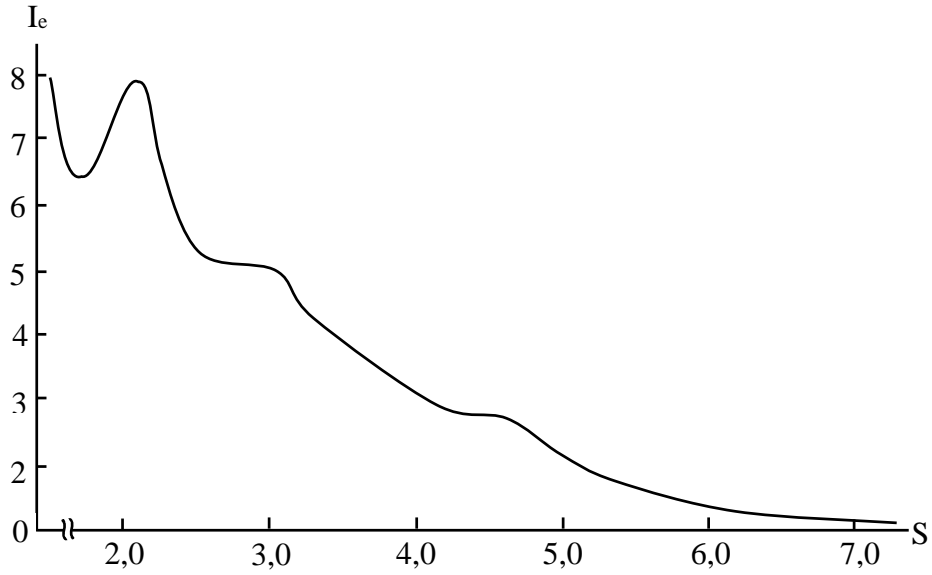


Fig. 2. Experimental intensity curve of TlGa_{0.96}Ge_{0.04}Se₂ amorphous compound.

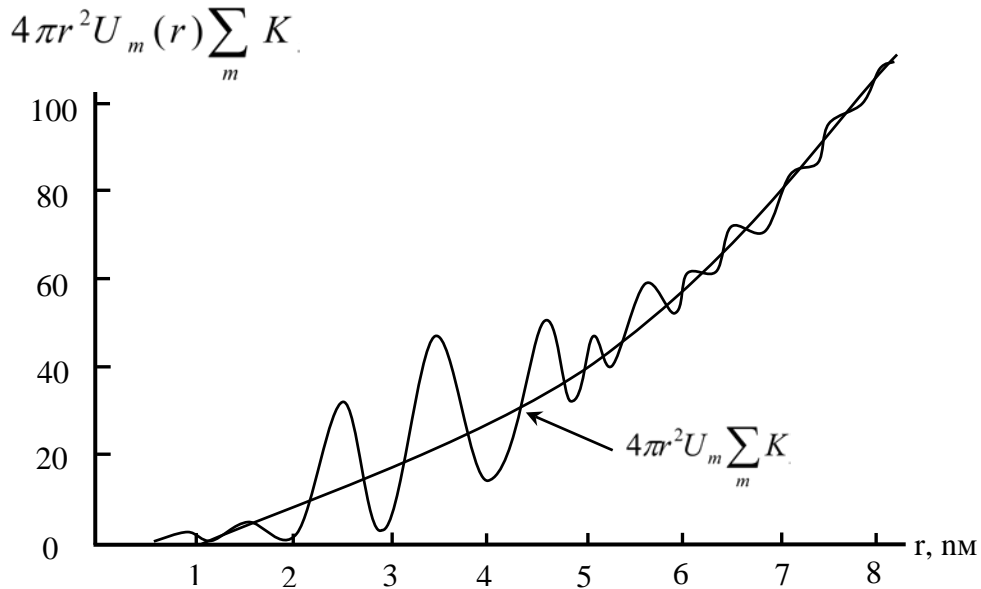


Fig. 3. Radial distribution curve of TlGa_{0.96}Ge_{0.04}Se₂ atoms.

By analyzing RADC of TlGa_{0.96}Ge_{0.04}Se₂ amorphous compound there have been revealed three maxima corresponding to the first coordinate group at $r_1 = 0.239$ nm, the second coordinate one at $r_2 = 0.340$ nm and the third coordinate one at $r_3 = 0.460$ nm. There have been determined areas beneath the first, second, and third coordinate maxima which are found to be equal $\Delta_1 = 8.6$, $\Delta_2 = 24.6$, and $\Delta_3 = 33.8$, respectively.

The radius of RADC first coordinate group is very close to the mean value of distances between Ga-Se atoms in crystal lattice. The radius of the second coordinate group is in agreement with the distance between Tl and Se atoms, also the third maximum is in agreement with the distance between similar atoms

CONCLUSION

When forming amorphous structures of numerous compositions in thin layers, the presence of Ge as an impurity affects the behavior of Tl-Se and Ga-Se system atom interaction. It is experimentally established that TlGaSe₂ films have non-trivial peculiarities that are controlled as by formation conditions as by measured doping them with Ge chemical element atoms. Coordination numbers calculated from the areas beneath the first, second, and third coordinate maxima have the following values: $n_1 \approx 4$, $n_2 \approx n_3 \approx 6$. That is to say about covalent behavior of bond between atoms in TlGa_{1-x}Ge_xSe₂ amorphous film which is characteristic of crystal phase. Apparently, Ge atom implantation in TlGaSe₂ film brings about the formation of substitutional solid solutions.

- [1] *J.S. Sanghera, I.D. Aggarwal, L.B. Shaw, C.M. Florea et. al.* // *J. Optoelektroniks and Advanced materials*. 2006, V.8, P.2148.
- [2] *Malagapov Ach. U.* Review of literature of $A^2B^6C^{21}TIB^2C^{21}$ typed semiconductive compounds. Nalchik: ЭИФА, 2007, p. 692.
- [3] *V. Kovanda, Vicek Mir, H. Jain.* *J. Non-Cryst. Solids*. 2003, V. 326, P.88.
- [4] *A.M. Pashayev, T.D. Dzhafarov.* Physical principles of nanoelectronics. Baku: 2019, p. 88.
- [5] *E.M. Kerimova, S.N. Murtafayeva, S.D. Mamedbeyli* and etc. Roentgen conduction of $TlGaSe_2$ single crystals. *Fizika*, 2001, vol. 7, № 2, pp. 61-64.
- [6] *Q.D. Huseynov, F.M. Seidov, Kh.Y. Khalilov, M.Z. Ismayilov et al.* Pseudobinary system $TlSe-GaSe$ crystals. *Journal of Phys. Chemistry*, 1974, vol. 16, № 3, pp. 803-804.
- [7] *G.P. Ignatenko, D.N. Terpii.* XIX Russian conference on electron microscope (IPTM). Thesis of reports, May 28-31, 2002, Chernogolovka, 2002, p. 35.
- [8] *A.S. Avilov.* Precious electron diffraction analysis. Thesis of Doctor of physic-mathematical sciences, 01.04.18, Moscow, 1999, p. 274.
- [9] *F.F. Volkenstein.* Electron processes on semiconductor surface at chemisorption. M. Nauka, 1987, p. 431.
- [10] *I.D. Nabivovitch, Ya.D. Stetsiv, Ya.V. Voloshchuk.* Determination of coherent intensity and background intensity on experimental curve of electron scattering. *Crystallography*, 1967, vol. 12, № 4, pp. 584-590.

SYNTHESIS METHODS OF CARBON NANOTUBES (review article)

A.M. ALIYEVA

*Institute of Physics Ministry of Science and Education of Azerbaijan Republic,
AZ 1073, Baku, H. Javid Ave., 131*

Carbon nanotubes are discussed in this review synthesis methods. Carbon nanotubes synthesis by variety methods and each of the mechanisms have precise features that can be specify properties of carbon nanotubes. Laser ablation and chemical vapor deposition are most common methods for synthesis carbon nanotubes.

Keywords: laser ablation, carbon nanotubes, physical vapor deposition, pulsed laser vaporization (PLV), Nd:YAG.

PACS: 73.63.Fg, 73.22.-f, 78.67.Ch, 61.46.Fg

INTRODUCTION

Carbon nanotubes have attracted considerable interest since their discovery by Iijima in 1991 [1]. Carbon nanotubes have aroused great interest recently because of their unique physical properties, which span a wide range from structural to electronic. For example, nanotubes have a low weight and high elastic modulus, and thus they are predicted to be the strongest fibers and widely touted as attractive candidates for use as fillers in composite materials due to their extremely high Young's modulus, stiffness, and flexibility [2–6]. These latter applications will require vast quantities of nanotubes at competitive prices to be economically feasible. Moreover, reinforcing applications may not require ultrahigh purity nanotubes. On the other hand, functionalization of nanotubes to facilitate interfacial bonding within composites will naturally introduce defects into the tube walls, lessening morphologies are needed for specified applications of CNTs. For instance, usually it is needed to prepare knotted CNTs to improve in rich interfacial adhesion, which can lead to nanotube aggregation within the matrix composites. So, there are many methods of producing these nanomaterials, including electric arc discharge [1,7], laser evaporation [8], chemical vapor deposition (CVD), catalytic CVD [9–19], hydrothermal treatment [20] and mechanochemical process in which graphite powders were first mechanically ground at room temperature and then annealed at 1400 °C [21], but little is known about the possibilities of mechanochemical processing aimed to the synthesis of carbon nanostructures in different conditions. Although significant research progress has been made to synthesize carbon nanomaterials, but developing an easy approach to large-scale production of carbon nanotubes has still been limited to date. On the other hand, most of the synthesizing methods are complicated and uncontrollable. More recently, we have suggested that using washable supported catalysts is accompanied by valuable advantages and with an extraordinary structure [22,23]. Herein, we use an efficient method for the controlled synthesis of spring-like multiwall carbon nanotubes by mechanical activation assisted annealed process [14].

In their paper authors investigated the synthesis of carbon nanotubes.

Laser ablation method

Physical vapor deposition (PVD): PVD is a technique by which a material can be vaporized into gaseous form and then deposited on the surface of a substrate.

Target source: The most common carbon source target used is solid graphite which is irradiated by laser source and vaporized into vapor carbon atoms.

Laser source: Laser source used for vaporization of target material into target vapor atoms can be continuous laser source such as CO₂ laser or pulsed laser source such as Nd:YAG laser (Neodymium doped Yttrium Aluminum Garnet, Nd:Y₃Al₅O₁₂).

Substrate used: The substrate used in this method is the water cooled copper collector on which the vaporized carbon atoms deposit and grow as CNTs.

Inert gas atmosphere: Argon gas is commonly used as inert gas which flows at a constant flow rate towards the water cooled copper collector.

Procedure for synthesis of CNTs by Laser Ablation method

Laser Ablation method is a Physical Vapor Deposition method in which graphite target is vaporized by laser source Figure 1. In this method the graphite target is placed at the center of quartz chamber filled with argon gas and maintained at 1200 °C. The graphite target is vaporized by either continuous laser source or pulsed laser source. The vaporized target atoms (carbon) are swepted toward cooled copper collector by the flow of argon gas. The carbon atoms are deposited and grown as CNTs on cooled copper collector. In case of continuous laser beam, the carbon atoms are continuously vaporized whereas in case of pulsed laser beam the amount of CNTs produced can be monitored as each shot of pulsed laser beam is directly proportional to the amount of carbon atoms vaporized [11]. By this method multi-walled carbon nanotubes are synthesized and to synthesize single-walled carbon nanotubes catalyst nanoparticles of Fe, Co, Ni are used.

The obtained CNTs are further purified to get the pure form of CNTs.

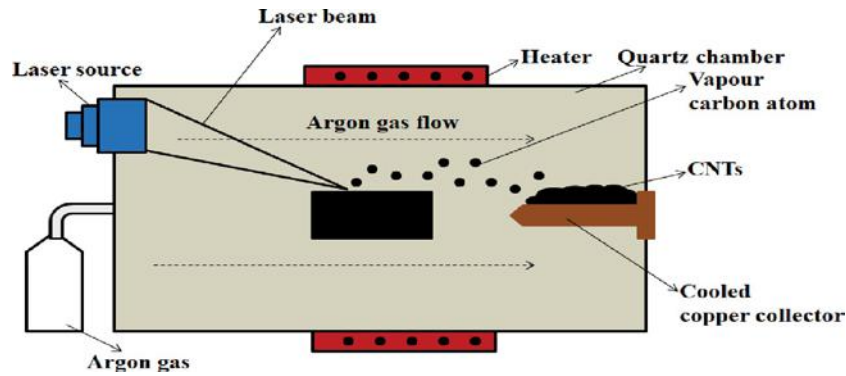


Fig. 1. Laser ablation method-schematic representation.

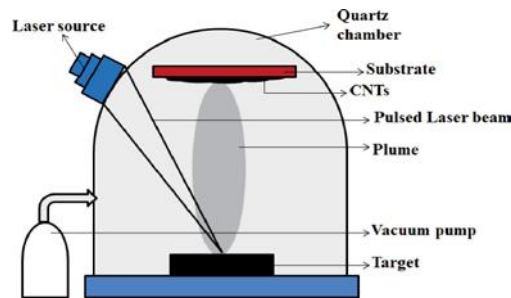


Fig. 2. Pulsed laser ablation method-Schematic representation.

Procedure for pulsed laser deposition method

Pulsed Laser deposition is a thin film deposition technique in which the target material is vaporized by pulsed laser beam and vaporized target atoms are made to deposit on substrates Figure 2. The furnace contains a target at bottom and substrate mounted on the top. A pulsed laser beam from Nd:YAG laser source is made to strike the target to produce vaporized target atoms called the plume (plume is vaporized atoms at high temperature) [12]. The plume moves towards the substrate and it is deposited and grown as CNTs. Each shot of laser is directly related to the amount of material ablated, thus deposition rate can be controlled and calibrated.

The synthesis methods were investigated by Seyed Oveis Mirabootalebi, Gholam-Hosein Akbari Fakhrabadi. Authors (13).

First synthesis of CNT was done accidentally by arc discharge (1) and now synthesis methods of carbon nanotubes are different and various. Generally, produce type can specified properties of CNT (15); precursor (which can be solid, liquid, or gas), heat source, time, temperature, atmosphere of reactions and commonly; mechanism, determinate traits of CNT. Most common methods for synthesis of carbon nanotube are arc discharge, laser ablation and chemical vapor deposition (15-19). Some of other methods for synthesis of carbon nanotubes include: dipping graphite in cold water (21), mechano-thermal (20), synthesis with decomposition Sic, torsion of graphene layers, with solar energy, synthesis with heat treatment of polymer, pyrolysis, with liquid phase and electrolysis.

Electrolysis method

This method based on liquid phase which was invention in 1995. with electrowinning of alkali or alkaline-earth metals from their chloride salts, CNT deposited on substrate (22).

By applying DC voltage between two electrodes in chamber of molten alkali-alkaline earth metals, could be produced multi walled carbon nanotubes]. Relation (1) show formation lithium carbide (23).



By forming lithium carbide (Li_2C_2), synthesis of CNT can be started in liquid phase. Generally; diameter of cnt in this method was 2-10 nm and length of them is 0.5 micrometer or more was reported and amorphous carbon, carbon nanofibers, nanographites and encapsulate CNT are byproducts of this method (24). Obtained CNT usually are multi walled, but also in some researches, produced single walled CNT (26) Different salts, applied for producing cnt such as NaCl, LiCl, KCl, and LiBr (25). Current density, electrolysis regimes, time, molten salt and temperature are the controller parameters of reaction. By optimizing condition of process, the reaction yields up to 20- 40% increase for producing multi walled carbon nanotubes].

Electrolysis can be done in low temperature, don't need to advanced equipment, possibility to controlling process of synthesise, have high quality, having low energy consumption and also don't suitable for mass production.

Laser Ablation method

In Laser ablation/vaporization, by strike pulsed laser or continuous wave laser on graphite target; nucleation and growth of carbon nanotubes to be started (31,23). First formation a hot evaporation and subsequently quickly cooled.

During cooling of the samples, small molecules and carbon atoms quickly condense and form larger clusters and synthesized carbon nanotubes by van der Waals forces stay together. For producing multi wall carbon nanotubes use pure graphite rods and for single wall use composite block of graphite. For producing single walled, Graphite composited with metal catalyst, such as Fe, Ni and Co and He-H₂ and Ar use as ambient gas.

In pulsed laser, needs more intensity laser's light than continuous laser. Nd:YAG and CO₂ are most common lasers used for laser ablation (31).

Diameters of CNT which produced by this method 4-30 nm and length of them is about 1 micrometer. Byproducts and impurities are amorphous carbon, catalyst particles, fullerene etc. Catalysts also help to growth of carbon nanotubes. Most of catalyst were used in laser ablation are: Co, Cu, Nb, Ni, Pt, Co/Ni, Co/Pt, Co/Cu, Ni/Pt. quality of production related to target composition, power of laser beam and laser properties, catalyst type, type of ambient gas, temperature of reactions and distance between substrate and target (31). Produced carbon nanotubes by this method have high purity, high yield and most produced single wall CNT; but not suitable for mass production and also need expensive and special equipments.

Flame Synthesis

In this method, CNT synthesizing by direct

combustion of carbon source in presence of an oxidizing gas (23). Generally; flame synthesis contain of three steps. First producing carbon source by hydrolysis of hydrocarbon. Second; diffusion of carbon's atoms to metallic catalyst and third; nucleation carbon nanotubes on surface of catalyst and it's gradual growth.

Oxidation gas can be oxygen or nitrogen and carbon feedstock are acetylene, methane, ethanol and ethylene. Type of flame created, have essential role on quality of produced carbon nanotubes and determinate amount of amorphous carbon in final producing. For optimizing condition, must be control temperature, composition of fuel gas and catalyst of reactions. This way is economic, suitable for mass production and most synthesizing single walled CNT, but rate of growth is relatively low.

Laser vaporization method

The CNTs were first synthesized using a laser in 1995, and the pulsed laser vaporization (PLV) technique is used to extract a large variety of carbon allotropes from graphite, one of which is CNTs. A laser beam (Yttrium Aluminum Garnet or CO₂ laser) was used in this process, and it will be put within a reactor, where it will be focused on the graphite rods. Until beginning the process, argon buffer gas and a catalyst mixture of Co and Ni in a 50:50 ratio was passed through the rod at 1200°C. The metal was added to the process to help catalyze the creation of SWCNTs, but it also produced a slew of other byproducts. As a result of the high temperature of the argon buffer steam, the rod will vaporize. As the vaporization was cooled, it was deposited in the copper collector, and nanotubes were formed (33,34). The schematic diagrams for the laser ablation procedure are shown in Fig. 3.

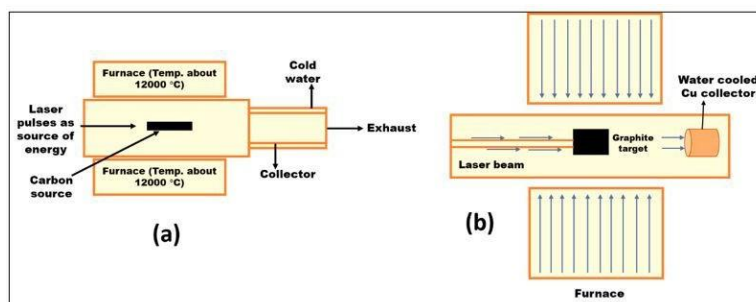


Fig. 3. Schematic diagram for laser ablation technique.

One of the benefits of this method is that high-quality SWCNTs with limited defects can be achieved in a reasonably high yield. Since the metallic atoms appear to vaporize when the tube's end is closed, this was possible. SWCNTs generated have excellent structural integrity as well. Furthermore, diameter modulation of the samples can be achieved easily by adjusting the method's parameters, i.e. catalytic metal, flow rate, and temperature. Apart from that, SWCNTs can be synthesized without requiring the production of MWCNTs.

However, there are several drawbacks to this approach. The CNTs generated may have some branching and may not be perfectly straight. Despite using higher purity graphite rods and laser forces, the amount of CNTs generated is lower than when the arc discharge approach is used (35). Typically, a significant amount of SWCNTs can be generated with good crystallization using both arc discharge and laser ablation methods. However, owing to the unique basic equipment requirements and high energy demand, these two strategies are less advantageous than CVD. In terms of yield and purity, CVD are superior to arc

and laser methods. This is because the size of the carbon source, i.e., anode for arc discharge and target for laser ablation, determines the amount of the sample formed in both arc and laser processes. There is also a need for intensive purification of CNTs developed using these two techniques, which led to the production of gas phase methods like CVD.

Chemical vapor deposition (CVD): CVD is a technique in which the vaporized reactants react chemically and forms a nanomaterial product that is deposited on the substrate **Figure 4**.

Sources for carbon: The precursor for carbon nanotubes are hydrocarbon gases such as acetylene, ethylene, methane, etc.

Substrate used: Substrates are materials on which the CNTs are grown. The commonly used substrates in CVD method are zeolite, silica, silicon plate coated with iron particles, etc.

Catalyst used: To produce single-walled carbon nanotubes metal catalyst nanoparticles such as iron, cobalt, nickel, molybdenum, iron-molybdenum alloys, etc. are used.

Sources for CVD used: Based on the heating source, the CVD can be:

- Thermal activated CVD which is heated by IR radiation, RF heater, etc.
- Photo assisted CVD which is heated by Arc

lamps, CO₂ laser, Argon ion laser, Nd:YAG laser, etc.

- Plasma assisted CVD which is heated by microwave radiation, etc.

Conditions maintained: The following conditions are maintained inside the furnace.

- Temperature: 500–900°C.
- Inert gas atmosphere: Argon gas.

Procedure for synthesis of CNTs by thermal CVD method

CNTs are synthesized by thermal CVD method by using hydrocarbon gas as carbon source. In this method, a quartz tube is placed inside a furnace maintained at high temperature (500–900°C) heated by RF heater. A crucible containing the substrate coated with catalyst nanoparticles is placed inside quartz tube filled with inert gas such as argon gas.

The hydrocarbon gas (carbon source) is pumped into the quartz tube which undergoes pyrolysis reaction and forms vapor carbon atoms. These carbon atoms bind to the substrate and join to each other by Vanderwaal force of attraction and grow as multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) on the substrate [23]. To synthesize single-walled carbon nanotubes catalyst nanoparticles of Fe, Co, Ni are used. The obtained CNTs are further purified to get the pure form of CNTs.

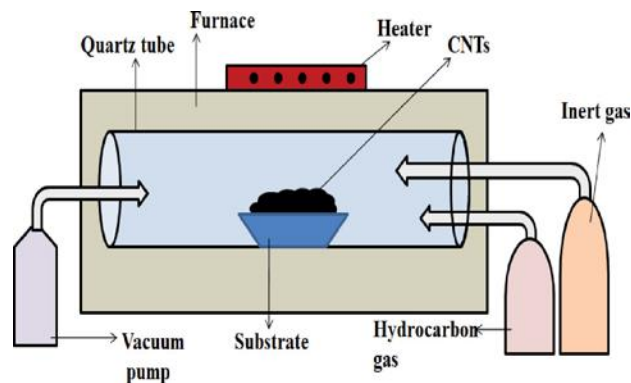


Fig. 4. CVD method.

Electric arc discharge method

Carbon nanotubes are synthesized by electric arc discharge method which is also called Plasma Arcing method.

Electrodes: Pure graphite rods (both positive and negative electrode). The positive electrode is adjustable from outside to maintain the gap between the two electrodes.

Diameter of electrodes: 5–20 μm. **Gap between electrodes:** 1 mm. **Current:** 50–120 amperes.

Voltage: 20–25 V.

Inert gas pressure: 100–500 torr (No CNT formed below 100 torr). Inert gas is used for cooling and condensation of atoms to form the CNTs. Inert gas determines the structure of carbons to be present in CNTs. Commonly used inert gas is helium gas.

Temperature: 3000–3500°C.

Reactor: It contains a quartz chamber which is

connected to vacuum pump and a diffusion pump to inert gas supply. Initially the chamber is made vacuum by the vacuum pump and then the chamber is filled with helium gas by the diffusion pump [9].

Procedure for synthesis of CNTs by Electric arc discharge method

In this method, a potential of 20–25 V is applied across the pure graphite electrodes separated by 1 mm distance and maintained at 500 torr pressure of flowing helium gas filled inside the quartz chamber **Figure 5**. When the electrodes are made to strike each other under these conditions it produces an electric arc. The energy produced in the arc is transferred to the anode which ionizes the carbon atoms of pure graphite anode and produces C⁺ ions and forms plasma (Plasma is atoms or molecules in vapor state at high temperature). These positively charged carbon ions

moves towards cathode, gets reduced and deposited and grow as CNTs on the cathode. As the CNTs grow, the length of the anode decreases, but the electrodes are adjusted and always maintain a gap of 1 mm between the two electrodes. If proper cooling of electrodes are achieved uniform deposition of CNTs are formed on the cathode which is achieved by inert gas maintained

at proper pressure [10]. By this method multi-walled carbon nanotubes are synthesized and to synthesize single-walled carbon nanotubes catalyst nanoparticles of Fe, Co, and Ni are incorporated in the central portion of the positive electrode. The obtained CNTs are further purified to get the pure form of CNTs.

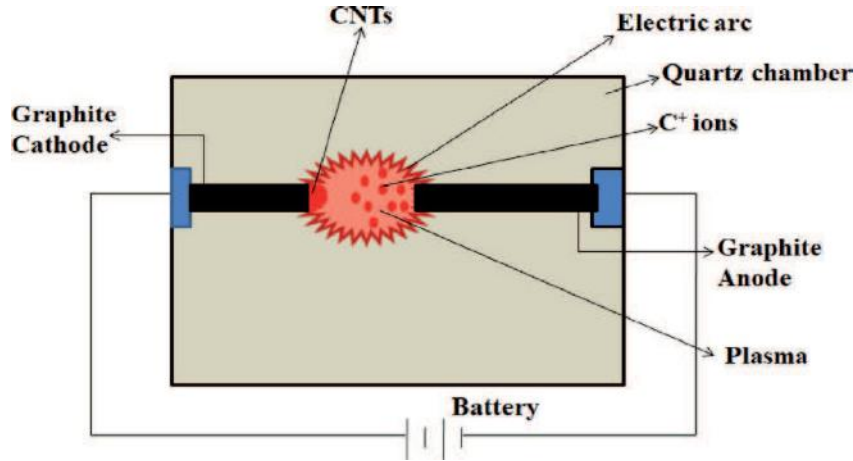


Fig. 5. Electric arc method.

Chemical vapor deposition (CVD) method

CVD is showing high potential to be used further as a CNTs processing tool for future industrial applications due to advantages such as relatively low growth temperature, high yields, and high purities with many explicit properties that can be obtained during its manufacture. While this process was first used in the 1960s and 1970s to produce carbon fibers and carbon nanofibers, it was not until 1996 that it was used on a wide scale for the production and synthesis of CNTs. Strong, liquid, and gaseous precursors were used to aid in the development of CNTs at relatively low temperatures, i.e., 500 to 1000°C, and at atmospheric pressure. Metal or metal oxide catalyst particles are used as "seeds" to aid in the development of certain precursors. In addition, the gaseous or volatile carbon compound can decompose with the aid of metallic nanoparticles as a catalyst in this step. The catalyst also serves as a nucleation site for the development of CNTs. The reaction chamber is filled with a

combination of nitrogen, ethylene, and acetylene during the procedure. This approach allows CNTs to expand in a variety of macroscopic morphologies, including powders and films (i.e., thick or thin), as well as various microscopic architectures (i.e., aligned, coiled, intertwined, or straight). The simplicity of the process is due to the use of such precursors, as well as different substrates and catalysts. As a result, producers will get the desired type of CNT. The four key parameters that specify the form of CNTs formed (SWCNT or MWCNT) in this process are the reactor's atmosphere, the source of hydrocarbon, the catalyst, and the growth temperature. MWCNTs are typically formed at lower temperatures (i.e. 600 to 900°C), while SWCNT development occurs at temperatures greater than 900°C. Not just that, but the commodity obtained is purer and has a higher yield. Regardless, defects can be detected in the composition of the samples collected, and these defects are normally in significant numbers. The general and basic schematic diagrams for the CVD technique are shown in Fig.6.

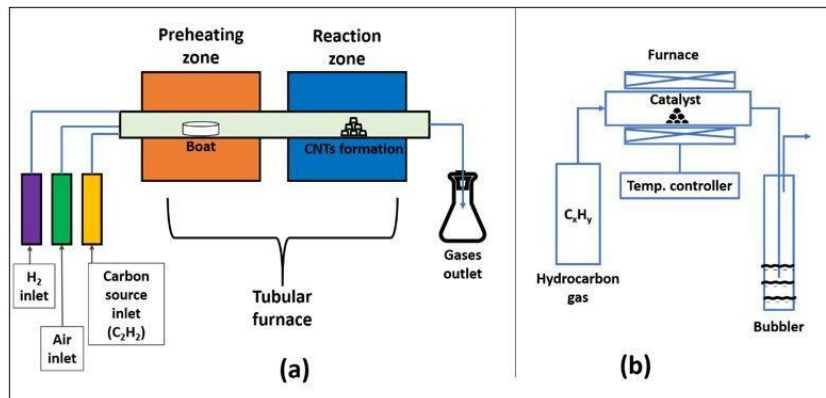


Fig. 6. Schematic diagrams of CVD process.

Alcohol CVD (ACCVD)

Since the temperature of the process is relatively low as low as 550°C, the ACCVD system can produce SWCNTs in large quantities at a low cost. Evaporated methanol and ethanol are applied to zeolite-supported iron and cobalt catalytic metal particles in this process. Alcohol reacting with catalytic metal particles created hydroxyl radicals, which removed carbon atoms with hanging bonds, preventing the formation of high-purity SWCNTs.

Plasma-enhanced CVD (PECVD)

PECVD is a broad concept that encompasses a variety of synthesis methods which may be either direct or remote. Direct PECVD was used to make MWCNT field emitter towers and some SWCNTs, while remote PECVD can be used to develop all types of CNTs. Instead of using thermal energy, this method uses energy sources that can supply energy for both hydrocarbon decomposition and CNT processing at a low temperature. The plasma energy sources used on the CNT formation are hot filament PECVD, direct current PECVD, radio frequency PECVD, and microwave PECVD. Hydrocarbon gas is used over intermediate metals in an ionized state in this process. Furthermore, the reactive species in the plasma system influenced the development of microscopic diameter tubes, which had implications for both diameter regulation and selective etching of metallic SWCNTs. The PECVD process consists of three major stages: (i) primary reaction takes place between energetic particles and carbon precursor in nonequilibrium plasma which leads to the precursor to be decomposed into carbon atoms and other active radicals; (ii) diffusion of carbon atoms and radicals onto the catalyst surface, as well as secondary reactions between the reactants, and (iii) catalyst interacts with the reactants on its surface, allowing carbon atoms to infiltrate and

precipitate, as well as the release of result gases (Ding et al., 2016). This kind of CVD process has the benefit of producing a high yield of matched CNTs at a lower substrate temperature. Furthermore, by adding a voltage to the substrate, the volume of supplied ionized carbon species onto the catalyst surface can be tuned. The chirality distribution and growth rate of SWCNTs can be regulated, for example, by adjusting catalyst size and H₂ flow rate. This kind of CVD process has the benefit of producing a high yield of matched CNTs at a lower substrate temperature. Furthermore, by adding a voltage to the substrate, the volume of supplied ionized carbon species onto the catalyst surface can be tuned. The chirality distribution and growth rate of SWCNTs can be regulated, for example, by adjusting catalyst size and H₂ flow rate.

Thermal catalytic CVD

Decomposition of hydrocarbons or other carbon feedstock will take place at elevated temperatures ranging from 500 to 1200°C in this process. Prior to use, the feed would be dissolved in a steady flow of noble gases in the furnace, which would pass through transition metal catalysts such as iron, nickel, and cobalt, among others. The decomposed carbon would dissolve such metal particles until it reached a point of super saturation. The hydrocarbon is then decomposed and deposited on a substrate, i.e., alumina, glass, or silicon substrate. The carbon precipitate would then form in the shape of fullerene dorms. Depending on the temperature range of the process, different forms of CNT may be produced by using various types of carbon feedstock. Chemical composition and textural properties of the catalyst material(s) used are two parameters that control the length, diameter, orientation, and consistency of produced CNTs. The amounts of defects and the existence of amorphous carbon was also used to test the above properties of the finished product.

-
- [1] *Ahmad Aqel, Kholoud M.M. Abou El-Nour, Reda A.A. Ammar, Abdulrahman Al-Warthan.* Carbon nanotubes, science and technology part (I) structure, synthesis and characterization. *Arabian Journal of Chemistry* (2012) 5, 1–23.
- [2] *S. Dolmer.* 20003. <http://www.inano.dk/sw180.asp>. Denmark. [online] available.
- [3] *K Tanaka, T Yamabe, K Fukui.* 1999. *The Science and Technology of Carbon Nanotubes*, First ed. Elsevier, Oxford.
- [4] *S. Iijima.* 1991. *Nature* (London) 354, 56.
- [5] *P. Harris.* 2003. A Carbon Nanotube Page, Chemistry Department of the University of Reading, <http://www.personal.rdg.ac.uk/~scsharip/tubes.htm>. [online] Available.
- [6] *M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R Saito.* 1995. *Carbon* 33, 883.
- [7] *T. Yildirim, Oş Gü İseren, Kılıç S Ciraci.* 2000. *Phys. Rev. B* 62, 19.
- [8] *Aravind Kumar Jagadeesan, Krithiga Thangavelu and Venkatesan Dhananjeyan.* *Carbon Nanotubes: Synthesis, Properties and Applications.* [21st Century Surface Science](http://www.21stcenturysurface.com). Published: July 31st, 2020.
- [9] *V.P. Pham, S-H Jang, D. Whang, J.Y. Choi.* Direct growth of graphene on rigid and flexible substrates: Progress, applications, and challenges. *Chemical Society Reviews*. 2017;46:6276-6300.
- [10] *V.P. Pham.* Hexagon flower quantum dot-like Cu pattern formation during low-pressure chemical vapor. Deposited Graphene growth on a liquid Cu/W substrate. *ACS Omega*. 2018;3:8036-8041.
- [11] *T. Torres.* Carbon nanotubes and related structures: Synthesis, characterization. In: *Functionalization and Applications*. Vol. 135. Weinheim: Wiley-VCH; 2010. pp. 215-228. Available from: <https://doi.org/10.1002/anie.201006930>

- [12] *P.J.F, Haris, A. Hirsch, C. Backes.* Carbon Nanotubes Science: Synthesis, Properties and Applications. Vol. 102. Germany: Cambridge University Press;2009. pp. 210-23
- [13] *Seyed Oveis Mirabootalebi, Gholam-Hosein Akbari Fakhrabadi.* National Conference on Nanostructures, Nanoscience and Nanoengineering 2017.
- [14] *S. Manafi, M. Rahimipour, and Y. Pajuhhanfar.* The synthesis of peculiar structure of spring-like multiwalled carbon nanotubes via mechanochemical method. *Ceramics International*, 2011. 37(7): p. 2803-2808.
- [15] *D.M. Guldi, and N. Martín.* Carbon nanotubes and related structures: synthesis, characterization, functionalization, and applications. 2010: John Wiley & Sons.
- [16] *B. Zheng, Y. Li, and J. Liu.* CVD synthesis and purification of single-walled carbonnanotubes on aerogel-supported catalyst. *Applied Physics A*, 2002. 74(3): p. 345-348.
- [17] *Y Ando et al.,* Growing carbon nanotubes. *Materials today*, 2004. 7(10): p. 22-29.
- [18] *D.H. Toubestani et al.* CVD Growth of Carbon Nanotubes and Nanofibers: Big Length and Constant Diameter. in *Macromolecular symposia*. 2010. Wiley Online Library.
- [19] *Y. Chen et al.,* The nucleation and growth of carbon nanotubes in a mechano-thermal process. *Carbon*, 2004. 42(8): p. 1543-1548.
- [20] *Z. Kang, et al.,* One-step water-assisted synthesis of high-quality carbon nanotubes directly from graphite. *Journal of the American Chemical Society*, 2003. 125 (45): p. 13652-13653.
- [21] *A. Szabó, et al.,* Synthesis methods of carbon nanotubes and related materials. *Materials*, 2010. 3(5): p. 3092-3140.
- [22] *M. Terrones.* Science and technology of the twenty-first century: synthesis, properties, and applications of carbon nanotubes. *Annual review of materials research*, 2003. 33(1): p. 419- 501.
- [23] *G.Z. Chen, et al.,* Electrochemical investigation of the formation of carbon nanotubes in molten salts. *High Temperature Material Processes*, 1998. 2: p. 459-470.
- [24] *Z. Ren, Y. Lan, and Y. Wang.* Aligned carbon nanotubes: physics, concepts, fabrication and devices. 2012: Springer Science & Business Media.
- [25] *R.E. Smalley, et al.,* Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties, and applications. Vol. 80. 2003: Springer Science & Business Media.
- [26] *P. Queipo, et al.* Aerosol Catalyst Particles for Substrate CVD Synthesis of Single-Walled Carbon Nanotubes. *Chemical Vapor Deposition*, 2006. 12(6): p. 364-369.
- [27] *H. Byeon, et al.,* Growth of ultra long multiwall carbon nanotube arrays by aerosol- assisted chemical vapor deposition. *Journal of nanoscience and nanotechnology*, 2010.10(9): p. 6116-6119.
- [28] *S. Abdullayeva, et al.,* Characterization of high quality carbon nanotubes synthesized via Aerosol-CVD. *Journal: JOURNAL OF ADVANCES IN PHYSICS*, 2015. 11(4).
- [29] *M.M.A. Rafique, and J. Iqbal.* Production of carbon nanotubes by different routes-a review.*Journal of encapsulation and adsorption sciences*, 2011. 1(02): p. 29.
- [30] *Nur-Azzah Afah Binti Taib .Md. Rezaur Rahman, Mohammed Mahbul Matin, Jamal Uddin, Muhammad Khusairy Bin Bakri, Afrasyab Khan.* A Review on Carbon Nanotubes (CNT): Structure, Synthesis, Purication and Properties for Modern day Applications. *Research Square*. September 2021.
- [31] *R. Kaur, P. Vatta M. Kaur.* 2018. Carbon Nanotubes: A Review Article. *International Journal for Research in Applied Science Engineering Technology* 6(4):5075–5079. <https://doi.org/10.22214/ijraset.2018.4827>.
- [32] *A. Raunika, S.A. Raj, K. Jayakrishna.* Sultan MTH 2017 Carbon nanotube: A review on its mechanical properties and application in aerospace industry. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. 270,012027. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/270/1/012027>.
- [33] *G. Rahman, Z. Najaf, A. Mehmood, S. Bilal, S.A. Mian, G. Ali.* 2019. An Overview of the Recent Progress in the Synthesis and Applications of Carbon Nanotubes. *C Journal of Carbon Research* 5(1):1–31. <https://doi.org/10.3390/c5010003>.

THE INFLUENCE OF STRUCTURAL DEFECTS ON THE ELECTRONIC AND ADHESIVE PROCESSES AT THE INTERFACE OF THE $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ SOLID SOLUTION WITH CONTACT ALLOYS

^{1,2} M.M. TAGIYEV, ²G.D. ABDINOVA, ³I.A. ABDULLAEVA,
²Kh.F. ALIEVA, ²T.I. PIRIEVA

¹Azerbaijan State Economic University, Baku city, Istiglaliyat str., 6. AZ-1001,
Baku, Azerbaijan.

²Institute of Physics Ministry of Science and Education. AZ-1073, H. Javid ave., 131,
Baku, Azerbaijan.

³Institute of Radiation Problems of the Ministry of Science and Education. AZ 1143, B.
Vahabzade Ave., 9, Baku, Azerbaijan.
e-mail: mail_tagiyev@mail.ru

The dependence of the resistance of the transition contact r_k and the adhesion work of extruded samples of the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution on the magnetic field strength and temperature was investigated. It was found that the resistance of the transition contacts of the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ -contact alloy structures is determined mainly by the resistance of the n - $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution - $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution structure heavily doped with acceptor impurity atoms Sn and Pb diffusing from the contact alloy into the near-contact region of the crystal.

Keywords: extrusion, annealing, solid solution, extrusion, texture

1. INTRODUCTION

Crystals of solid solutions of Bi-Sb systems are photosensitive in the infrared region of the spectrum, and are also effective low-temperature thermo- and magnetothermoelectric materials for the creation of solid-state electronic coolers for infrared photodetectors. The efficiency of photo- and thermoelectric converters, along with the fundamental parameters of the semiconductor material, is also determined by the physical properties of the transition contacts of these converters [1-5] the efficiency of thermoelements is determined by the relationship [6]

$$Z = \alpha^2 / [\chi(\rho + r_k / 2\ell)] \quad (1)$$

Where α and χ are the thermoelectric emf and thermal conductivity coefficients, ρ is the resistivity of the semiconductor material of the thermoelement legs, r_k is the resistance of the transition contact between the semiconductor and the switching plates, ℓ - is the length of the thermoelement legs. A long service life of a thermoelement can be achieved if, under operating conditions, the thermoelectric and contact materials have mutual physical and chemical resistance, and the switching method and quality ensure this resistance.

The process of contacting a metal and a semiconductor is accompanied by mutual diffusion of materials, which leads to poisoning and oxidation of the semiconductor material. In the case of soldering, the solder can release toxic components inside the thermoelement legs, especially at high temperatures. The diffusion of the contact material in the thermal branch causes a number of harmful phenomena that reduce the efficiency of the thermoelectric material,

such as the formation of a second phase of a well-conducting layer that causes a local short circuit of the thermoelement, a direct reaction of the contact material with the thermoelectric, the appearance of donor or acceptor levels that change the local concentration of carriers, the dissolution of impurities from the thermal branches by the contact material, etc.

Therefore, the switching material must have high electrical and thermal conductivity, and the transition resistance at the contact section of the semiconductor with the switching material must be minimal, provided that the linear expansion coefficients of the thermoelectric and switching materials are matched. Therefore, the study of physical properties, including elucidation of the mechanisms of electron and phonon transfer in extruded samples of $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solutions, is an urgent task in materials science.

Taking into account the above, in this work the resistance of the transition contact and the adhesive properties the effect of heat treatment on the resistance of the transition contacts of extruded samples of $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solutions with various contact alloys were investigated [7].

2. EXPERIMENTAL PART

Samples of $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solutions were obtained in the following process sequence:

-the synthesis was carried out by direct alloying of the components in a quartz ampoule, pre-etched in a $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ solution and evacuated to a residual pressure of $\sim 10^{-3}$ Pa, constantly subjected to shaking during the synthesis to improve the homogeneity of the alloy. The ampoule with the substance was sharply cooled to room temperature. The components used were bismuth of the VI-0000 brand, antimony of the SU-0000 brand.

- extrusion was carried out on an MS-1000 hydraulic press. Extrusion process parameters: $P_{eks.}=4.0 \text{ t/cm}^2$, $T_{eks.}=475\pm 3\text{K}$.

Post-extrusion annealing was carried out in ampoules evacuated to $\sim 10^{-3} \text{ Pa}$ at $\sim 503 \text{ K}$ for 5 hours. The experiments were carried out in the temperature range from ~ 77 to $\sim 300 \text{ K}$ and magnetic field strength up to $74 \times 10^4 \text{ A/m}$. Electrical measurements were carried out along the extrusion axis. Samples that had not undergone heat treatment after extrusion and the same samples that had undergone heat treatment.

3. RESULTS AND ITS DISCUSSION

Fig. 1 shows the dependences of $(r_k - r_{k0})/r_{k0}$ and $(\rho - \rho_0)/\rho_0$ at $\sim 77 \text{ K}$ on the magnetic field strength in the case of the contact material made of alloy 1. Here r_{k0} , ρ_0 are the transition contact resistance and the specific resistance in the absence of a magnetic field, and r_k and ρ are in a magnetic field. It is evident that the nature of the change in the transition contact resistance r_k of the

$\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution with alloy 1 and the specific resistance ρ of the solid solution itself of the extruded $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ sample on the magnetic field strength are the same. However, the change in $(r_k - r_{k0})/r_{k0}$ with an increase in the magnetic field strength is greater in all cases than the change in $(\rho - \rho_0)/\rho_0$. For example, at $\sim 77 \text{ K}$ with a magnetic field strength greater than $\sim 23 \times 10^4 \text{ A/m}$, the ratio $[(r_k - r_{k0})/r_{k0}] / [(\rho - \rho_0)/\rho_0]$ for samples based on annealed solid solution reaches 1.5. With increasing temperature to 300 K , the dependence of r_k and ρ on the magnetic field strength weakens, however, the patterns observed at $\sim 77 \text{ K}$ on the effect of the magnetic field on r_k and ρ are preserved at high temperatures.

Similar results at ~ 77 and 300 K were obtained in the case of contact alloy 2.

The magneto-resistance results obtained in extruded $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ samples are well described by the results of theory and experimental data available in the literature [8].

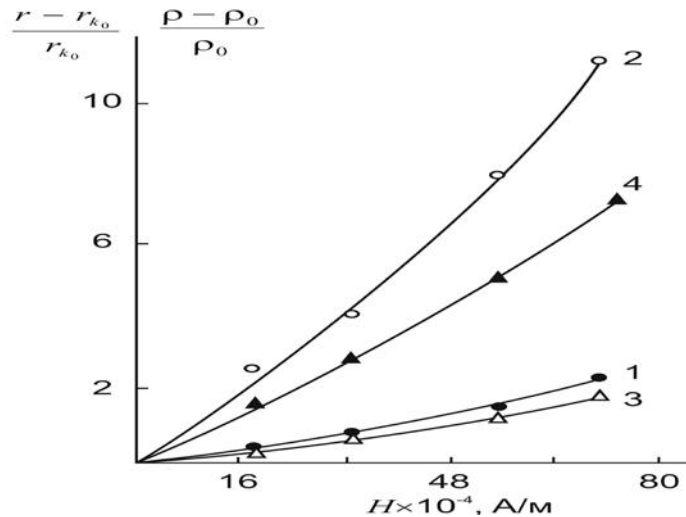


Fig. 1. Dependences of the transient contact (1, 2) and specific magnetoresistance (3, 4) at $\sim 77\text{K}$ on the magnetic field strength. Curves 1, 3 relate to $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ samples that have not undergone heat treatment, and 2 and 4 to samples that have undergone heat treatment after extrusion.

The following considerations can explain the rather strong dependences r_k of the transition contact of $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ with contact alloys on the magnetic field strength, compared to the specific resistance ρ . When applying the contact to the ends of extruded $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ samples, mutual diffusion of the components of the solid solution and the contact alloy in each other occurs.

Therefore, as a result of the diffusion of Pb and Sn atoms from the contact alloy into the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution, a near-contact layer of this solid solution is formed near the contact, doped with lead and tin atoms (or only tin in the case of a contact alloy wt %: 57 Bi + 43 Sn). As a result, the following structure is formed: $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution - intermediate layer of $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution, heavily doped with acceptor lead and tin atoms - contact alloy. The specific resistance of the intermediate layer at $\sim 77 \text{ K}$ (solid solution $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ doped with Pb and Sn) is several

times higher than the specific resistance of pure $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$. In addition, $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ samples doped with Pb or Sn atoms with a concentration of more than 0.01 at.% have p-type conductivity at $\sim 77 \text{ K}$. Therefore, the transient contact resistance of the structure will be mainly determined by the transient resistance of the transition $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution - intermediate layer. In a magnetic field, with an increase in the magnetic field strength to $74 \times 10^4 \text{ A/m}$, the specific resistance of $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ increases strongly (by ~ 7.3 times). At the same time, the specific resistance of the intermediate layer also increases (for example, experiments have shown that extruded samples with 0.1 at.% Pb have $\sim 77 \text{ K}$ $\rho \approx 5 \cdot 10^{-4} \text{ (Ohm-cm)}$ at $\sim 77 \text{ K}$ and with an increase in the voltage to $74 \times 10^4 \text{ A/m}$, ρ increases almost linearly and reaches a value of $6 \cdot 10^{-4} \text{ (Ohm-cm)}$. Because of this, the growth of r_k of the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ - intermediate phase structure under the action of a

magnetic field is stronger than the growth of the specific resistance of pure $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$.

At temperatures above ~ 120 K, the conductivity type of the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution doped with Pb or Sn becomes electronic [9]. In addition, at high temperatures, the effect of Pb and Sn impurities on the ρ of the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution, including the ρ of the intermediate layer, is weakened. Therefore, at ~ 300 K, despite the fact that the value of the specific resistance of both the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution and the intermediate layer (the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ layer doped with Pb or Sn atoms) differs insignificantly from the values of ρ at ~ 77 K, the contact resistance r_k at ~ 300 K is ~ 2 times lower than at ~ 77 K. The change in r_k of the structure under the action of a magnetic field at ~ 300 K also correlates well with the change in ρ of pure $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ and the intermediate layer. In extruded samples of $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$, there are stressed regions that create scattering centers for charge carriers [2]. Annealing of the rods after extrusion leads to the disappearance of these regions, which ends with an increase in the mobility of charge carriers. As a result, the magnetoresistive effect and the change in r_k under the influence of a magnetic field in annealed samples are stronger than in non-annealed ones.

In addition to electrical parameters, contacts are also characterized by mechanical properties. The bond and adhesion between the extruded $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution and the contact alloy is determined by the process of wetting the crystal surface with this contact alloy.

It is known that the wetting of a solid by a liquid and the bond of a liquid with a solid can be determined by two types of forces acting between the phases:

- physical interaction combining dipole, induction and dispersion forces. By analogy with adsorption, this type of contact can be called physical, reversible wetting, i.e. such a contact when the contacting surfaces after contact can be separated, while remaining unchanged;

- chemical forces - ionic and homopolar. This type of contact and wetting can be called chemical, irreversible wetting.

The main difference between these types of contacts is the magnitude of the interphase forces. If the energy of the Van der Waals forces is a fraction or several units of kcal/mol, then for chemical interaction this energy is tens and hundreds of kcal/mol.

Thus, physical forces, although they always act, are not able to provide such energy; such energy can only be caused by chemical interaction.

A distinctive feature of chemical wetting, in addition to the large value of interfacial forces, is the relatively strong dependence of the degree of wettability on temperature; often such a dependence is characterized by a wetting threshold - the presence of a temperature, after reaching which the contact angle begins to drop sharply, and the work of adhesion to increase.

Wetting of the surface of a solid is caused, in addition to the above, by the presence of internal and surface force fields in them. The appearance of these

forces causes interaction between molecules inside and on the surface of bodies.

The nature of wetting of the contact material largely depends on the value of the surface tension coefficient of their melts, the value of interfacial tension in contact with the melt of the contact material with the surface of the solid [10]. Spreading of liquids and wetting of the surface of a solid are accompanied by an increase in the surface of the liquid and are associated with overcoming the forces of surface tension.

In addition to the above, wetting of the surface of a crystal by a molten contact material largely depends on the nature of the previous treatment, the state of the crystal surface, the size and uniformity of the gap, the method of removing the oxide film, the environment, etc. Since the influence of all these factors is theoretically difficult to take into account, in practice it is determined by experiment. The process of wetting the surface of a solid with the liquid phase of the contact material and the forces that determine adhesion play a significant role in creating devices with specified properties. The characteristic of the adhesion forces of a liquid and a solid is the specific work of adhesion, equal to the work of their separation along the interphase boundary

$$A_a = \sigma_0 (1 + \cos\theta) \quad (2)$$

where σ_0 is the coefficient of surface tension of the melt of the contact material, θ - is the contact angle, defined as the angle between the surface of the solid and the tangent to the point of contact with the liquid at the interface with the environment.

Wetting of the crystal surface with a molten contact alloy depends on the composition of the contact alloy, the state of the crystal surface, the type of medium, etc.

To determine the contact angles of wetting θ of the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ surface with contact alloys, the optical method of "sessile drop" was used. The optical system of the setup provided a magnification of ~ 20 times, which made it possible to use drops weighing 1.5-2.0 g. The surface tension coefficient σ_0 was determined by the drop method [11].

Experiments showed that when using alloy 1 as a contact material, the contact angle is $\sim 23-24^\circ$, and in the case of the alloy 2. $\sim 23-24^\circ$ At 410-415 K, the surface tension of alloy 1 and the alloy 2 were 424 and 410 mN/m, respectively.

The work of adhesion A_a for the specified contact alloys with the surface of the extruded sample of the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution, calculated from the above expression at a temperature of 410 and 415 K, is 780 and 850 mJ/m², respectively.

These values of A_a indicate that good wetting of the surface of the extruded sample of the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution by the above contact alloys is ensured by a sufficiently strong physicochemical interaction of the melt of the contact material with the extruded samples of the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution.

4. CONCLUSION

Thus, it was found that the resistance of the transition contacts of the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ -contact alloy structures is determined mainly by the resistance of the n- $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution - $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution structure heavily doped with Sn and Pb acceptor impurity atoms diffusing from the contact alloy into the

near-contact region of the crystal. In the extruded samples that were not annealed after extrusion, the ratio $(r_k-r_{k0})/r_{k0}$ and $(\rho-\rho_0)/\rho_0$ at magnetic field strengths is lower than for the annealed samples. Along with this, for the samples that were not heat treated, the ratio $(r_k-r_{k0})/r_{k0} (\rho-\rho_0)/\rho_0$ is lower than for the annealed samples.

-
- [1] *L.D. Ivanova*. Thermoelectric materials for different temperature levels. Semiconductors. 2017. V.51. pp. 909-912.
- [2] *M.M. Tagiyev*. Effect of Grain Size and Pb Doping on the Thermoelectric Properties of Extruded Samples of the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ Solid Solution. Inorganic Materials. 2021. V.57. pp. 113–118.
- [3] *N.A. Sideronko, Z.M. Dashevsky*. Effective Bi–Sb Crystals for Thermoelectric Cooling at Temperatures of $T \lesssim 180$ K. Semiconductors. 2019. V.53. pp.686-690.
- [4] *M.M. Tagiyev, I.A. Abdullayeva, G.D. Abdinova*. Effect of Gamma Irradiation on the Magnetothermoelectric Properties of Extruded ZrO_2 -Modified $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$. Inorganic Materials 2022. V. 58. pp. 561–567.
- [5] *Yamashita O., Odahara H.* Effect of the thickness of Bi-Te compound and Cu electrode on the resultant Seebeck coefficient in touching Cu/Bi-Te/Cu composites. J. of Materials Science.2007. V.42. № 13. pp.5057-5067.
- [6] *A.F. Ioffe*. Semiconductor thermoelements, Moscow-Leningrad: Nauka, 1960, 186 p.
- [7] *M.M. Tagiev*. Magnetothermoelectric properties of switching contacts of thermoelements based on $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution. Applied Physics, Moscow, 1999, № 3, pp. 105-108.
- [8] *L.D. Ivanova, L.I. Petrova., Yu.V. Granatkina, V.S. Zemskov, O.B. Sokolov, S.Ya. Skipidarov, N.I. Duvankov*. Extruded materials for thermoelectric coolers. *Inorganic Materials* 2008. V. 44. pp. 687–691.
- [9] *M.M. Tagiev, D.Sh. Abdinov*. Magnetothermoelectric properties of extruded samples of $\text{Bi}_{85}\text{Sb}_{15}$ solid solution doped with lead. Inorganic materials, 1995, V.31. № 11, pp.1405-1407.
- [10] *Yu.V. Naidich*. Contact phenomena in melts, Kiyev: Nauk. Dumka, 1972, 196 p.
- [11] *A. Adamson*. Physical chemistry of surfaces Moscow: Mir, 1979, 567 p.

INFLUENCE OF COPPER AND SELENIUM ATOMS ON THE CRYSTAL STRUCTURE OF $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$ WITH PARTIAL REPLACEMENT OF GALLIUM AND SULFUR ATOMS BY COPPER AND SELENIUM ATOMS**M.G. KYAZUMOV***Institute of Physics, Ministry of Science and Education of Azerbaijan,
AZ1073 H.Javid ave., 131, Baku
e-mail: eaisaeva@mail.ru*

It has been established that the structure of $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$ crystals, characterized by TOTE and TOTE00E structural types, with the replacement of 1/3 of the gallium atoms by copper atoms, the $\text{Cu}_{0.5}\text{Ga}_{0.33}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$ structure becomes the TOTTE type ($a = 3.861 \text{ \AA}$, $c = 30.915 \text{ \AA}$, sp. gr. $P6_3mc$), and with the subsequent replacement of 1/6 of the sulfur atoms by selenium, the $\text{Cu}_{0.5}\text{Ga}_{0.33}\text{In}_{1.5}\text{S}_{2.5}\text{Se}_{0.5}$ structure becomes the TTOTTE type ($a = 3.866 \text{ \AA}$, $c = 18.695 \text{ \AA}$, sp. gr. $P3m1$).

Keywords: structure of inorganic compounds, electron diffraction.

PACS: 61.05.-a, 61.14.-x, 61.66.Fn.

INTRODUCTION

The $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$ crystals crystallize in a structure with the lattice parameters: $a = 3.819 \text{ \AA}$, $c = 21.12 \text{ \AA}$, sp. gr. $P\bar{3}m1$ [1] and $a = 3.82 \text{ \AA}$, $c = 63.41 \text{ \AA}$, sp. gr. $R3m$ with the structural type... $hT_cO_cT_hE_cO_cE...$ [2, 3], where O, T and E are the designations of octahedral, tetrahedral and empty layers, respectively, h and c denote the hexagonal and cubic, respectively, types of packing of S atoms in the anion layers.

The aim of this work is to establish the influence of partial replacement of gallium and sulfur atoms with

copper and selenium atoms on the structures of polytypic modifications of $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$.

EXPERIMENTAL PART AND RESULT DISCUSSION

The $\text{Cu}_{0.5}\text{Ga}_{0.33}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$ and $\text{Cu}_{0.5}\text{Ga}_{0.33}\text{In}_{1.5}\text{S}_{2.5}\text{Se}_{0.5}$ compositions were synthesized. Samples for electron diffraction studies were prepared by depositing microcrystals from an aqueous suspension onto a metal grid covered with a celluloid film. Electron diffraction patterns from textures were recorded using an EG-400 high-voltage electronograph.

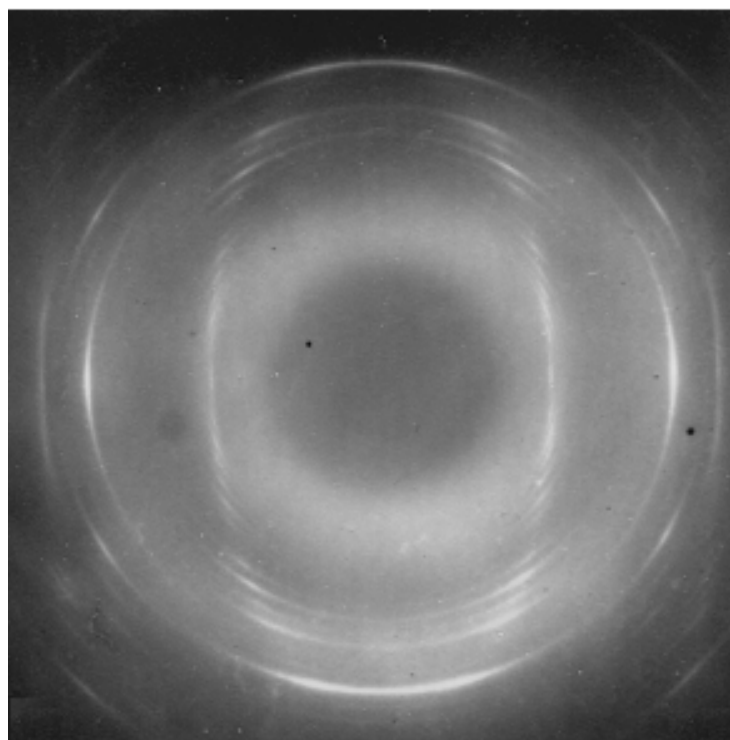


Fig. 1. Electron diffraction pattern of $\text{Cu}_{0.5}\text{Ga}_{0.33}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$ textures.

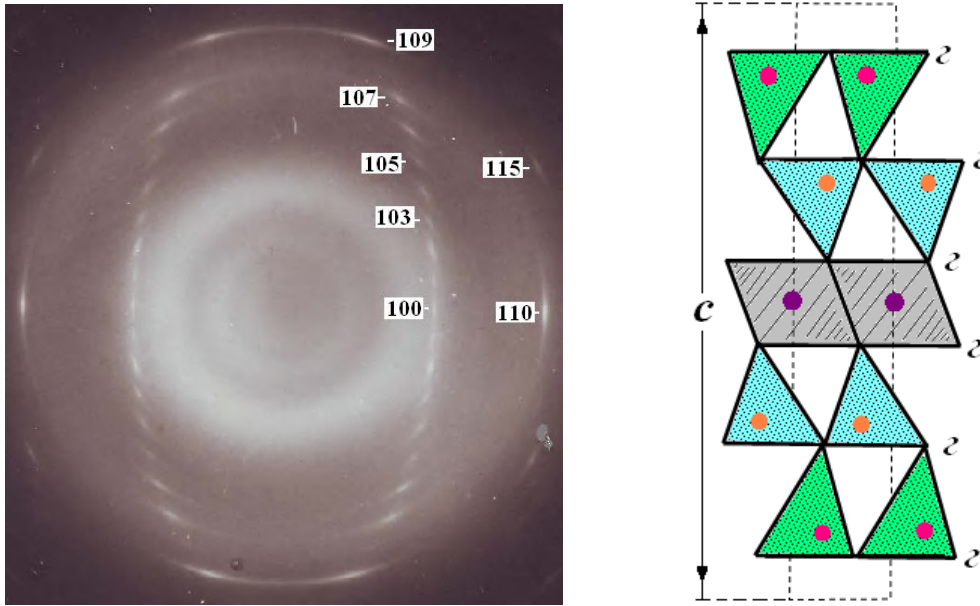


Fig.2. a) Electron diffraction pattern of $Cu_{0.5}Ga_{0.33}In_{1.5}S_{2.5}Se_{0.5}$ textures.
 b) Projection of the structure of $Cu_{0.5}Ga_{0.33}In_{1.5}S_{2.5}Se_{0.5}$ on the plane $(11\bar{2}0)$.

The decoding of electron diffraction patterns was carried out using the following formulas for oblique textures [4]:

$$d_{100} = \sqrt{3} a/2 = 2L\lambda h/2R_{h00}, \quad (1)$$

$$D_{hk\ l} = (R_{hk\ l}^2 - R_{hk0}^2)^{1/2}, \quad (2)$$

$$\Delta D = c * L\lambda = (D_{hk\ l} - D_{hk(l-1)}), \quad (3)$$

$$d_{001} = c = 1/c^* = L\lambda/\Delta D. \quad (4)$$

Fig. 1 shows the electron diffraction pattern of $Cu_{0.5}Ga_{0.33}In_{1.5}S_3$ textures. The lattice parameters were determined from this electron diffraction pattern: $a=3.861\text{\AA}$, $c=30.915\text{\AA}$. There are no reflections with the value $l \neq 2n$ in the series $hh2\bar{h}l$ on the electron diffraction pattern. This indicates that the crystal structure is built from two identical packets. It was established that the structure has the space group $P6_3mc$. The second strong reflection in the series $11\bar{2}l$ is the reflection $11\bar{2}8$. The value $l = 8$ indicates that the unit cell consists of two $TTO\bar{T}E$ types of packets [5] and, therefore, the structure of $Cu_{0.5}Ga_{0.33}In_{1.5}S_3$ is an isostructural analogue of the structure of the 2H polytype $Zn_2In_2S_5$ [6].

Fig. 2a shows the electron diffraction pattern from the $Cu_{0.5}Ga_{0.33}In_{1.5}S_{2.5}Se_{0.5}$ textures, where there are no

systematic extinctions of reflections. The second strong reflection $11\bar{2}5$ is clearly distinguished on the second ellipse (the strongest in the series $11\bar{2}l$ is the reflection $11\bar{2}0$). The lattice parameters were determined: $a = 3.866\text{\AA}$, $c = 18.695\text{\AA}$, sp. gr. $P3m1$ and the structural type ...TOTTE.... By comparing the experimental and calculated values of the reflection intensities, the type of packing of the anion layers was established ...hhhhh.... The structure of $Cu_{0.5}Ga_{0.33}In_{1.5}S_{2.5}Se_{0.5}$ is identical to the structure of $Zn_3In_2S_6$ [7] and $GaInS_3$ [8]. Fig. 2b shows the projection of the structure of $Cu_{0.5}Ga_{0.33}In_{1.5}S_{2.5}Se_{0.5}$ (i.e. $CuGa_{0.67}In_3S_5Se$) on the plane $(11\bar{2}0)$.

CONCLUSION

It has been established that the structure of $Ga_{0.5}In_{1.5}S_3$ crystals, characterized by TOTEOE structural types, becomes TOTTE type when 1/3 of gallium atoms are replaced by copper atoms, and becomes TTOTTE type when sulfur (S) atoms are subsequently replaced by selenium (Se). The latter is probably due to an increase in the size of one of the tetrahedral voids in the unit cell, on which cations with a large ionic radius (i.e. indium atoms) can freely be located.

[1] И.Р. Амирасланов, Ф.Ю. Асадов, Б.А. Максимов, В.Н. Молчанов, А.А. Мусаев, Н.Г. Фурманова. Синтез нового полупроводника $Ga_{0.5}In_{1.5}S_3$ с заданной

структурой. Кристаллография, 1990, т.35, в.2, с.332-336.

[2] М.Г. Кязумов, И.Р. Амирасланов, Ю.Г. Асадов. Электронографическое

- исследования кристаллической структуры $Ga_{1,3}In_{3,4}S_7$. Azərbaycan MEA Xəbərləri, 2003, с. XXIII, № 3, с. 56-61.
- [3] M. G. Kyazumov, S. M. Rzayeva, A. S. Avilov. "Effect of Sulfur Deficiency on the Structural and Superstructural Features of $Ga_{1,29}In_{3,38}S_7$ ". Crystallography Reports, 2023, Vol. 68, № 7, pp. 1005–1009.
- [4] Б.Б. Звягин. Электронография и структурная кристаллография глинистых минералов / Б.Б. Звягин. - Москва: Наука, - 1964. - 312 с.
- [5] М.Г. Кязумов. Выявление на дифракционных картинах особых рефлексов как индикатор типа структуры и качества кристаллов. Кристаллография, 2014. Т. 59. С. 572.
- [6] Ф.Г. Доника, С.И. Радауцан, С.А. Семилетов, Т.В. Доника, И.Г. Мустя. Кристаллическая структура двухпакетного политипа $Zn_2In_2S_5(II)_a$. Кристаллография, 1972, т. 17, вып. 3, с. 666-667.
- [7] Ф.Г. Доника, Г.А. Киоссе, С.И. Радауцан, С.А. Семилетов, В.Ф. Житарь. Кристаллическая структура $Zn_3In_2S_6$. Кристаллография, 1967, т. 12, вып. 5, с. 854-859.
- [8] Г.Г. Гусейнов, М.Г. Кязумов, А.С. Кулиев и др. Кристаллическая структура $GaInS_3$. Доклады АН Азерб.ССР, 1988. т. XXIV, № 7, с. 26-29.

SONOCHEMICAL SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NANOSIZED
COPPER ALUMINATE SPINELN. MUSAYEVA, H. KHALILOVA, I. AMIRASLANOV,
B. IZZATOV, M. ALIZADA*Institute of Physics, Ministry of Science and Education, H.Javid ave, 131,
AZ1073 Baku, Azerbaijan**e-mail: nmusayeva@physics.science.az**tel: (012)5393259; mob:0503025647*

In the present work, copper aluminate (CuAl_2O_4) nanoparticles were synthesised by sonochemical method. X-ray diffraction analysis revealed that the synthesised crystals are of cubic spinel structure. The analysis confirmed the presence of γ - Al_2O_3 phase in the synthesized product. An increase in the concentration of Cu ions relative to Al ions in the solution changes the color of the powder. This is associated with the change in the ratio of CuAl_2O_4 crystallites to γ - Al_2O_3 crystallites. The size of spinel crystallites were found to be 7-10 nm in size.

Keywords: sonochemical, spinel, nanoparticles, CuAl_2O_4 , γ - Al_2O_3 , X-ray diffraction

PACS: 61.46.Df; 32.30.Rj; 33.20.Fb

INTRODUCTION

A wide range catalytic, electronic and optical properties allow the use of transition metal oxide spinels in various fields of science and technique. Among the spinel-structured materials, Cu-based spinels exhibit high activity in many applications, especially in catalytic processes. Compared with some metals, the use of aluminate spinels is more favorable in terms of environmental safety. Copper aluminate (CuAl_2O_4) spinels are characterized by thermal stability, mechanical resistance, hydrophobicity and low surface acidity. Usually, the synthesis of metal aluminates requires temperatures above 1000°C and several days. To overcome these disadvantages, more useful methods such as co-precipitation, hydrothermal synthesis and sol-gel have been widely used in the preparation of CuAl_2O_4 spinel in recent times [1-4]. However, the main shortcomings of the majority of the methods are the use of a wide variety of reagents, multi-steps and high energy requirements. Compared to other methods, the sol-gel method is considered more affordable technology for the synthesis of CuAl_2O_4 spinel, as it enables the production of particles with a homogeneous composition and small size at relatively low temperature [3,4]. The authors used diethanolamine as a new fuel for the sol-gel auto-combustion synthesis of nanocrystalline NiAl_2O_4 , CuAl_2O_4 and ZnAl_2O_4 alumina spinels in their research [5]. The results of X-ray diffraction (XRD) analysis showed that the average crystal size of single-phase CuAl_2O_4 aluminate spinel obtained by this way was 62 nm after calcination at 1000°C . The high energy consumption and the large size of the obtained nanoparticles are the main disadvantages limiting the application of this method.

The main goal of this research was the synthesis of CuAl_2O_4 spinel with homogenous structure by sonochemical method. Both the crystalline structure

and the sizes of the crystallites were determined. Raman spectroscopy analysis was carried out.

EXPERIMENTAL

Preparation of CuAl_2O_4 spinel

For the synthesis of nanoparticles of CuAl_2O_4 spinel containing 12% CuO 5 g dry AlCl_3 was dissolved in 50 ml deionized (DI) water. 0.32 g of $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ salt was crushed in a mortar and after adding 50 ml of DI water was mixed in an ultrasonic bath with a frequency of 68 kHz for 1 hour. During this time, due to the effect of ultrasonic waves, the water temperature rose to 62°C . At the end, the mixed solution turns into a completely clear blue liquid. The beaker containing the solution was heated on a magnetic stirrer (stirring at a speed of 1500 rpm) and 5.91 g of NaOH solution dissolved in 50 ml of DI water was gradually added to it dropwise for half an hour. As the amount of alkali increases, the solution turns light brown. The temperature of the solution was raised to 80°C and was additionally mixed for 30 min. When the mixing process was stopped, rapid precipitation occurred in the obtained gel-like solution. The precipitate was separated from the solution by centrifugation, washed repeatedly with DI water until pH was reached 8, and after drying at 80°C for 2 hours, thermally treated at 800°C for 5 hours. As a result, a light brown powder was obtained. Synthesis of nano-sized CuAl_2O_4 spinel crystals containing 25% CuO was carried out by the same method using 0.67 g of $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ salt and brown powder was obtained. For comparison, the nanoparticles of γ - Al_2O_3 and CuO were synthesized.

The XRD analysis of the obtained powdered substances were carried out using a D2 Phaser Diffractometer device with $\text{CuK}\alpha$ radiation (Bruker, Germany). The Raman spectra of the samples were recorded in EnSpectr R532 Raman spectrometer within the wavenumber range of 300 - 1000 cm^{-1} at

room temperature. In order to avoid false signals in the spectrum, the powdered samples were placed on a Si substrate.

RESULTS AND DISCUSSION

Structural analysis

The results of XRD analyses of γ -Al₂O₃, CuO and CuAl₂O₄ (containing 12 v \bar{a} 25 % Cu) nanocrystals are shown in Figure 1. As we can see in the Figure, CuAl₂O₄ phases obtained with both percentages of Cu are spinel having cubic structure (lattice constant $a = 8.05500\text{\AA}$). XRD analysis of CuO confirms that it has a monoclinic structure. The intense peaks corresponding to 31.7° and 45.6° belonging to γ -Al₂O₃ also appeared in the spectrum of the sample containing 12 mass% Cu. In the spectrum of the sample containing 25 mass% Cu, these peaks are slightly shifted to larger angles. These peaks are not seen in the spectrum of CuO. In the spectra of

spinel structures, the intense peak observed at 67° in the spectrum of γ -Al₂O₃ shifts to a smaller angle as the concentration of CuO increases. This corresponds to the weak 65.7° in the spectrum of CuO. From the abovementioned, it can be concluded that two phases are formed in the synthesised nanocrystal structure including CuAl₂O₄ with a cubic spinel structure (JCPDS No. 33-0448) and cubic γ -Al₂O₃ phase (JCPDS no: 00-001-1303). The peaks related to γ -Al₂O₃ can be explained by the fact that the calcination temperature (800°C) creates conditions for the formation of the γ -Al₂O₃ phase along with the CuAl₂O₄ phase. We also assume that the concentration of Cu ions in the chemical solution is more than 3 times lower than that of Al ions concentration, which may resulted in smaller number of the crystals formed in the CuAl₂O₄ phase and crystallization of the remaining Al ions in the γ -Al₂O₃ phase. At both concentrations, CuO phase (JCPDS No. 45-0937) was not recorded in the CuAl₂O₄ spectra.

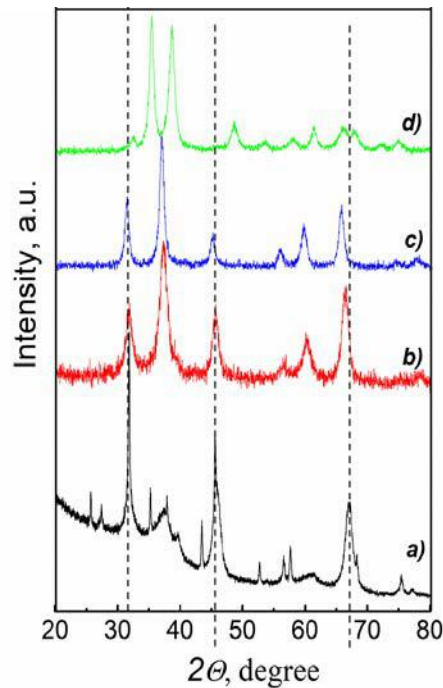


Fig. 1. XRD pattern of γ -Al₂O₃, CuO and CuAl₂O₄ (containing 12 v \bar{a} 25 % Cu)

The average crystallite size (D) of single-phase CuAl₂O₄ spinel crystals was calculated using Debye–Scherrer equation:

$$D = 0.9 \lambda / \beta \cos \theta$$

where D is the average crystallite size, λ is the wavelength of the X-ray source (Cu K α , 1.54 Å), β is the integral breadth of the diffraction peak, which was calculated from the full width at half maximum of the strongest diffraction peak (311), and θ is the Bragg's diffraction angle. According to the calculations, the average size of CuAl₂O₄ nanocrystals were 10 and 7 nm for CuAl₂O₄ (12% Cu) and CuAl₂O₄ (25% Cu), respectively.

Figure 2 illustrates the nanocrystalline powders of CuO, CuAl₂O₄ (12% Cu), CuAl₂O₄ (25% Cu) and γ -Al₂O₃.

Raman analysis

The Raman spectrum of the samples obtained at room temperature in the range of 100-1000 cm⁻¹ wavenumber is shown in Figure 3. The 400, 645 and 718 cm⁻¹ peaks observed in the spectrum of CuAl₂O₄ containing 12% Cu were also observed in the spectrum of CuAl₂O₄ containing 25% Cu. These peaks belong to the γ -Al₂O₃ phase and are associated with vibrational modes of Al-O bonds [6]. A slight shift of the peaks confirms the formation of the CuAl₂O₄ phase [7].



Fig.2. Photographs of a)CuO, b)CuAl₂O₄ (12% Cu), c)CuAl₂O₄ (25% Cu) and d)γ-Al₂O₃ crystals.

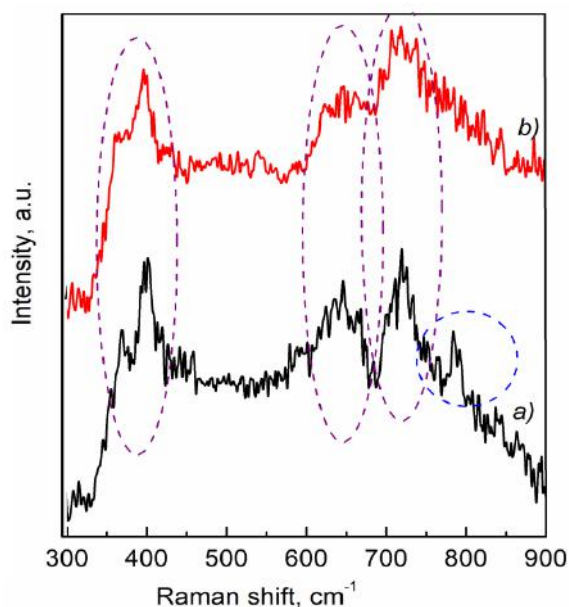


Fig.3. Room temperature Raman spectra of powders: a) CuAl₂O₄ (12% Cu) and b) CuAl₂O₄ (25% Cu)

CONCLUSION

CuAl₂O₄ phase was synthesized by sonochemical method with two different concentrations of Cu according to stoichiometry. XRD analysis showed that CuAl₂O₄ cubic spinel phase is present in the powdered

substances obtained with both concentrations of Cu, and in addition, γ-Al₂O₃ phase was formed. The sizes of the as-synthesised nanoparticles are 7-10 nm. The results were also confirmed by Raman spectroscopic analysis.

- [1] Ziyi Wang, Kun Liang, Siu-Wai Chan, Yuanyuan Tang. Fabrication of nano CuAl_2O_4 spinel for copper stabilization and antibacterial application, *Journal of Hazardous Materials*, Volume 371, 2019, Pages 550-557, ISSN 0304-3894, <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2019.02.053>
- [2] Zhizhan Chen, Erwei Shi, Wenjun Li, Yanqing Zheng, Weizhuo Zhong. Hydrothermal synthesis and optical property of nano-sized CoAl_2O_4 pigment, *Materials Letters*, Volume 55, Issue 5, 2002, Pages 281-284, ISSN 0167-577X, [https://doi.org/10.1016/S0167-577X\(02\)00378-6](https://doi.org/10.1016/S0167-577X(02)00378-6)
- [3] B.K. Kwak, D.S. Park, Y.S. Yun and J. Yi. Preparation and characterization of nanocrystalline CuAl_2O_4 spinel catalysts by sol-gel method for the hydrogenolysis of glycerol. *Catalysis Communications*, 2012, № 24, p. 90–95, <https://doi.org/10.1016/j.catcom.2012.03.029>
- [4] M. Salavati-Niasari, F. Davar, M. Farhadi. Synthesis and characterization of spinel-type CuAl_2O_4 nanocrystalline by modified sol-gel method. *J Sol-Gel Sci Technol*, 2009, № 51, 48–52. <https://doi.org/10.1007/s10971-009-1940-3>
- [5] Th. Tangcharoen, J. T-Thienprasert, Ch. Kongmark. Effect of calcination temperature on structural and optical properties of MAl_2O_4 (M = Ni, Cu, Zn) aluminate spinel nanoparticles. *J Adv Ceram* 2019, 8(3), p.352–366. <https://doi.org/10.1007/s40145-019-0317-5>
- [6] V. Andal, G. Buvaneswari, and R. Lakshmipathy. Synthesis of CuAl_2O_4 nanoparticle and its conversion to CuO nanorod. *Journal of Nanomaterials* Volume 2021, Article ID 8082522, 7 pages. <https://doi.org/10.1155/2021/8082522>
- [7] M. Baronskiy, A. Rastorguev, A. Zhuzhgov, A. Kostyukov, O. Krivoruchko, & V. Snytnikov. 2016. Photoluminescence and Raman spectroscopy studies of low-temperature $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ phases synthesized from different precursors. *Optical Materials*, 53, 87–93. doi:10.1016/j.optmat.2016.01.029
- [8] F. Moulla, W. Chekirou, A. Karaali, N. Boukheit & K. Mirouh. 2020. Solid state synthesis and spectroscopic analysis of CuAlO_2 and spinel CuAl_2O_4 , *Phase Transitions*, DOI:10.1080/01411594.2020.1789919

FEATURES OF TRANSMISSION SPECTRA OF GaSe THIN FILMS AND NANOPARTICLES SYNTHESIZED BY LASER ABLATION**V.M. SALMANOV¹, A.G. HUSEYNOV, G.B. IBRAGIMOV^{1,2}, R.M. MAMEDOV¹,
T.A. MAMEDOVA¹, F.Sh. AKHMEDOVA¹**¹*Baku State University, AZ1148 Baku, Azerbaijan*²*Institute of Physics, Ministry of Science and Education of the Republic of Azerbaijan,**Az-1073, Baku, G. Javid Ave., 131**e-mail: vagif_salmanov@yahoo.com*

The transmission spectra of GaSe thin films and nanoparticles obtained by laser ablation of a solid target in a liquid medium were experimentally studied. X-ray diffraction analysis showed that the crystalline structure of the nanoparticles is the same as that of the bulk material. It is shown that in GaSe nanoparticles the process of laser light absorption on structural defects is absent. It is shown that the observed luminescence is caused by radiative recombination of free excitons.

Keywords: thin films and GaSe nanoparticles, laser ablation, transmission spectra.

INTRODUCTION

One of the most intensively developing areas in the natural sciences is the study of small-sized objects - nanoparticles. Great scientific and practical interest in nanoparticles is because many of their physical, chemical, and thermodynamic properties differ significantly from the properties of their constituent atoms or molecules and the properties of macroscopic matter, which opens up great opportunities for obtaining new materials and creating new technologies based on them [1]. One of the most common methods for obtaining nanoparticles is pulsed laser ablation (PLA) of solid targets located in a vacuum, ambient gas, or liquid [2]. Laser ablation is a simple, fast, and direct nanoparticle synthesis method. This method does not require long periods for chemical reactions, as well as high temperatures and pressures or multi-step processes typical of chemical synthesis. The ILA method applies to a virtually unlimited combination of target materials and liquids, which allows NP synthesis in a selected medium. The properties of the generated NPs - shape, size, size distribution, composition, and structure for each target material - depend on the parameters of the laser used for ablation (radiation wavelength, pulse duration and repetition rate, pulse energy), as well as on the environmental conditions (vacuum, fixed gas pressure, or liquid). Currently, semiconductor nanoparticles attract much attention from researchers. Quantum-size effects, which occur in particles smaller than the Bohr radius of an exciton, play a key role in the manifestation of semiconductor nanoparticles' electronic and optical properties [3]. The dependence of optical properties on the size of nanoparticles opens up opportunities for creating new generations of solar cells, lasers, LEDs, luminescent labels, and photocatalysts on their basis [4].

Studies of optical phenomena in poorly studied, but at the same time very promising gallium selenide (GaSe) nanoparticles are of great interest. GaSe semiconductor crystals, due to their layered structure (covalent bonding along the layers and weak van der

Waals bonding between the layers), high nonlinear polarizability, optical homogeneity, high exciton binding energy (~20 meV), and the presence of a natural mirror surface, have become one of the main elements of optoelectronics [5-8]. On the other hand, it is known that stacking faults existing in GaSe crystals greatly affect their physical properties and lead to the localization of electron wave functions in the direction perpendicular to the layers [9].

This work is devoted to an experimental study of the transmission spectra of thin films and GaSe nanoparticles synthesized by laser ablation.

EXPERIMENTAL PROCEDURE

The target material was a bulk nominally undoped GaSe crystal grown by the Bridgman method. Samples with a thickness of ~100 μm were prepared by mechanical cleavage. A pulsed Nd:YAG laser with built-in 2nd and 3rd harmonic generators designed to generate radiation with wavelengths of 1064, 532 and 335 nm was used as a radiation source. The laser pulse duration was 10 ns with a maximum power of ~12 MW/cm². The radiation intensity was varied using calibrated neutral light filters. The transmission spectra of GaSe thin films and nanoparticles were studied using an automatic M833 double-dispersion monochromator (spectral resolution of ~0.024 nm at a wavelength of 600 nm), with computer control and a detector recording radiation in the wavelength range of 350-2000 nm.

Laser radiation with a wavelength of 1064 nm, focused by a positive lens ($f=11$ cm), was used to ablate a GaSe crystal with a diameter of 1.5 cm. Laser ablation of the GaSe crystal was carried out in a quartz cuvette containing 5 ml of PVP (polyvinylpyrrolidone), without adding any surfactants. The ablation process was carried out at normal pressure with a laser energy of 135 mJ per pulse and an ablation time of 10 min.

X-ray structural analysis showed that the crystalline structure of the nanoparticles is the same as that of the bulk material (hexagonal). The sizes of the

nanoparticles calculated using the Debye-Scherrer formula [10] varied in the range of (2-20) nm.

EXPERIMENTAL RESULTS AND THEIR DISCUSSION

Figure 1 shows the dependencies of the transmittance of thin films and GaSe nanoparticles on the pump power of laser radiation. As can be seen from the figure, with an increase in the excitation intensity, a

decrease in the transmittance of thin films is observed (curve 1). With an increase in the radiation intensity from 1 to 10 MW/cm², the transmittance decreases by ~35%. It should be noted that in this case, the position of the line width in the transmission spectrum remains virtually unchanged. Unlike thin films, in a colloidal solution of GaSe nanoparticles, an inverse dependence is observed; with an increase in the pump power, the transmittance increases by ~10 times.

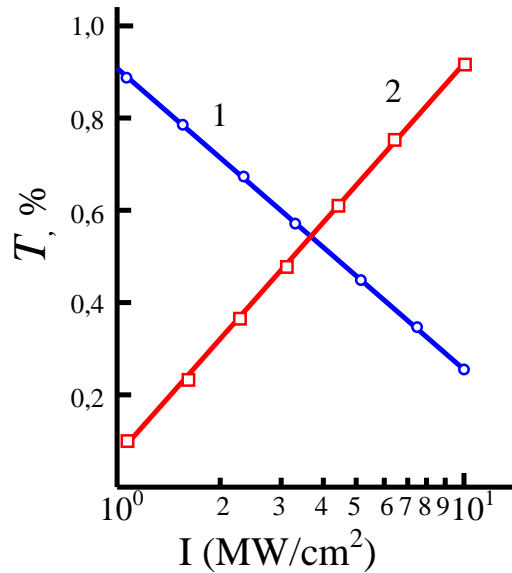


Fig. 1. Dependences of the transmittance of thin films (curve 1) and nanoparticles (curve 2) of GaSe on the pump power of laser radiation.

Of particular interest is the elucidation of the mechanism of laser radiation absorption in thin films and GaSe nanoparticles. In our case, the magnitude of the laser radiation quantum ($\hbar\omega=1.17$ eV) is less than the band gap of thin films ($E_g=2.11$ eV [11]) and even less than the band gap of GaSe nanoparticles ($E_g=2.64$ eV [12]), which turned out to be 0.53 eV larger than in thin films. When excitation of semiconductors by laser light with an energy lower than the band gap ($\hbar\omega < E_g$), impurity and nonlinear absorption associated with 2- and 3-photon excitations can occur. In the case of layered semiconductors such as GaSe, absorptions associated with structural defects cannot be ignored. As our studies have shown, in the transmission spectra of GaSe thin films, absorption lines associated with impurity levels are absent. Two-photon absorption in the presence of structural defects and a low absorption coefficient ($\alpha \sim 10^{-2}$ cm⁻¹) at the existing excitation intensities is also unlikely. In our opinion, the most probable process of laser radiation absorption is absorption by structural defects. In GaSe crystals, the distance between layers is $\sim(3-4)$ Å, and group defects arising as a result of structural disorder occur in approximately each of the 15 layers [9]. Therefore, it can be assumed that when thin GaSe films are exposed to laser radiation with a quantum energy of $\hbar\omega < E_g$, absorption occurs in the bulk of the substance, where

group defects are randomly distributed in the defect layer, perpendicular to the optical axis "c". This assumption is also supported by our experiments on the study of the photoconductivity of GaSe at high laser excitation intensities [13, 14]. It was shown that the anisotropy of nonequilibrium carrier transport in different crystallographic directions is caused by the presence of group defects.

In GaSe nanoparticles, absorption associated with group defects is not observed. In this case, light absorption occurs not in the bulk of the substance, but in the surface layer with a thickness comparable with the thickness of the layer group, equal to $\sim(2-20)$ nm. Figure 2 shows the photoluminescence spectrum of GaSe nanoparticles excited by the second harmonic of the Nd:YAG laser ($\hbar\omega=2.34$ eV).

As can be seen from the figure, the maximum of the nanoparticle emission corresponds to the wavelength $\lambda=473$ nm (2.62 eV). The half-width of the emission line is ~ 10 Å. In our opinion, the observed luminescence is due to the radiative recombination of free excitons. This is evidenced by the stability, narrowness of the line and the location of the maximum (2.62 eV) from the width of the forbidden zone (2.64 eV) by 0.02 eV, equal to the binding energy of excitons in GaSe.

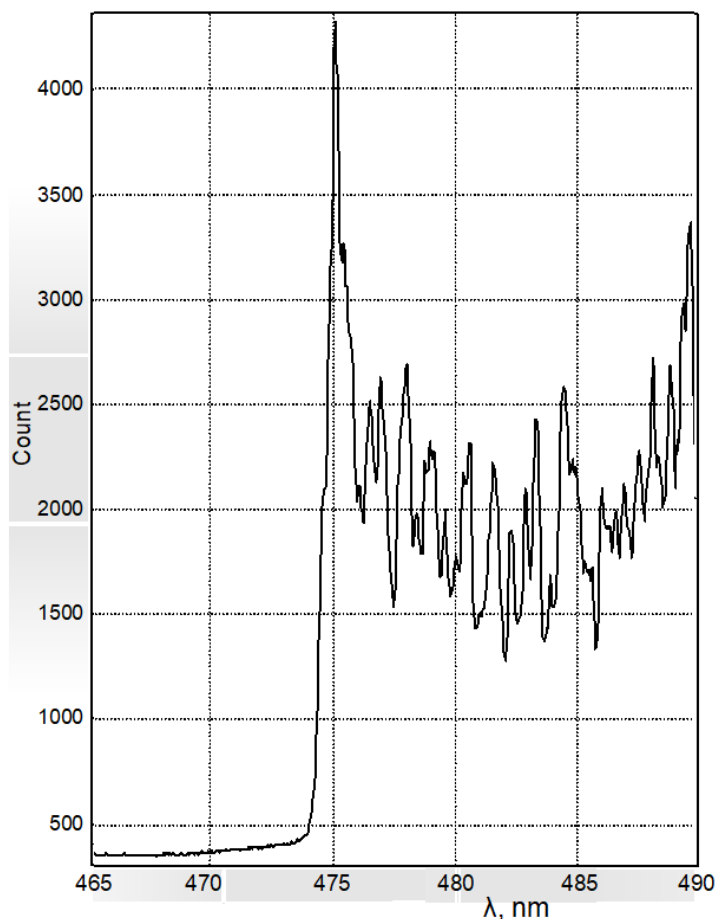


Fig. 2. Photoluminescence spectrum of GaSe nanoparticles excited by the second harmonic of a Nd:YAG laser ($h\omega=2.34$ eV).

- | | |
|--|--|
| <p>[1] G.N. Makarov. UFN, 2013, vol. 183, № 7, p. 673-718.</p> <p>[2] H. Gleiter. Acta Mater. 2000, 48(1), p. 12-25.</p> <p>[3] A.A. Eliseev, A.V. Lukashin. Functional nanomaterials. Moscow, Fizmatgiz. 2010, 320p.</p> <p>[4] O. Renn, M.C. Roco. J. Nanopart. Res. 2006, 8, p. 153-159.</p> <p>[5] V. Chikan, D.F. Kelley. Synthesis of highly luminescent GaSe nanoparticle. Nano Letters. 2002, v.2, p. 141-153.</p> <p>[6] K. Mogyorosi, D.F. Kelley. Superradiance in GaSe nanoparticle aggregates. J. Phys. Chem. 2007, v. 111, p. 579-586.</p> <p>[7] V.M. Salmanov, A.G. Guseinov, R.M. Mamedov, A.A. Salmanova, N.D. Dashdamirova. Optics and Spectroscopy, 2020, Vol. 128, Issue 4, pp. 513-516.</p> <p>[8] V.M. Salmanov, A.G. Huseynov, M.A. Jafarov,</p> | <p>R.M. Mamedov. Chalcogenide Letters 2021, v.18, № 4, p. 155-159.</p> <p>[9] K. Maschke. Schmid Ph. Phys. Rev. B, 1975, v.12, № 10, p. 4312-4315.</p> <p>[10] S. Samuel. Int. J. of Nanotechnology 2004, v.1, p. 42-85.</p> <p>[11] V. Chikan, D.F. Kelley. Nano Letters 2002, v.2, p. 141-153.</p> <p>[12] V.M. Salmanov, A.G. Guseinov, M.A. Dzhabarov, R.M. Mamedov, F.Sh. Akhmedova, T.A. Mamedova. Phys.Chemistry A, 2024, p.1-5.</p> <p>[13] A.G. Kazim-zade, A.A. Agaeva, V.M. Salmanov, A.G. Mokhtari. Inorganic materials, 2001, Issue 7, pp. 886-887.</p> <p>[14] A.G. Kazim-zade, V.M. Salmanov, Yu. Asadov, A.A. Agasiev, A.A. Agaeva, Z.M. Mamedov. Bakı Universitet Xəbərləri 2007, № 1, p.91-99.</p> |
|--|--|

DIELECTRIC RELAXATION OF THE ABSORPTION SPECTRUM IN CHLOROBENZENE – BENZENE AND CHLOROBENZENE – HEXANE SOLUTIONS

SAMIR AZIZOV

*Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan, Institute of Physics,
H.Javid ave131., AZ-1073 Baku, Azerbaijan,
email: samir_azizov@mail.ru*

The article presents the results of a study of the dielectric constant of solutions of a polar liquid in a non-polar solvent: chlorobenzene - benzene, chlorobenzene - hexane. The measurements were carried out at a wavelength $\lambda = 12.80$ cm in the temperature range from -80°C to 20°C . The temperature dependence of the dielectric relaxation time of molecules in the liquid and solid states of the studied solutions is determined. The thermodynamic quantities characterizing the process of dielectric relaxation are calculated for solutions of chlorobenzene - benzene, chlorobenzene - hexane.

Keywords: Dielectric spectroscopy, dielectric relaxation, chlorobenzene, benzene, hexane.

PACS: 61.20. – p; 77.22. – d; 77.22.Gm;

1. INTRODUCTION

The study of the dielectric properties of polar liquids and their solutions in nonpolar solvents is one of the most fundamental and complex problems of science, which is of great theoretical and practical importance. At present, studies of the molecular structure of a liquid and the dynamics of its rearrangement in the course of thermal motion occupy a central place in works devoted to the study of intermolecular interactions in liquids. To solve these problems, modern physical and physico-chemical research methods are used, such as diffraction and thermodynamic methods, dielectric, acoustic spectroscopy, etc. [1]. Among these methods, an important place belongs to dielectric spectroscopy. Studies of the dielectric properties of solutions of polar liquids in nonpolar solvents make it possible to obtain extensive information about their molecular structure, intermolecular interactions, information about thermodynamic parameters and mechanisms of molecular processes.

The relaxation properties of polar molecules are mainly studied either using the Debye theory [1, 2] or using the theory of absolute reaction rates [3 – 5]. In the first case, the relaxation time of a polar molecule is interpreted in connection with its magnitude and the viscosity of the environment. And in the second case, the rate of change of the relaxation process is taken into account, where the relaxation time is expressed in terms of thermodynamic activation quantities.

This paper presents studies of the dielectric relaxation of chlorobenzene in nonpolar solvents benzene and hexane.

2. MATERIALS AND RESEARCH METHODS

Solutions of the polar liquid chlorobenzene in nonpolar solvents benzene and hexane (United States, Keysight Technologies) were chosen for research.

Measurements of permittivity ε' and dielectric loss

ε'' of binary systems chlorobenzene – benzene ($x_2 = 0.179$; $x_2 = 0.368$; $x_2 = 0.567$; $x_2 = 0.778$; $x_2 = 1.000$), chlorobenzene–hexane ($x_2=0.300$; $x_2=0.562$; $x_2=0.794$; $x_2 = 1.000$) were carried out at a wavelength $\lambda = 12.80$ cm in the temperature range from -80°C to 20°C ,

The temperature dependence of the dielectric coefficients of the studied liquid was studied [5 – 9]. The proposed method uses the relationship between the input impedance Z_0 and the complex propagation constant γ of a line filled with a dielectric.

According to the theory of long lines, we have:

$$\gamma = \alpha + i\beta = i\omega (\varepsilon^* \mu^*)^{1/2} \quad (1)$$

where α is the damping constant characterizing the decrease in the amplitude of the wave propagating along the line, β is the phase constant characterizing the change in the phase of the same wave, μ^* is the complex magnetic permeability.

Taking $\mu^* = 1$, we get:

$$\varepsilon^* = \varepsilon' - i\varepsilon'' = \frac{\gamma \lambda_1}{2\pi} \quad (2)$$

where λ_1 is the wavelength in the air part of the line.

The value of γ is related to the input impedance Z_0 as follows:

$$\frac{th\gamma d}{\gamma d} = -i \frac{\lambda_1}{2\pi d} \cdot \frac{Z_0}{Z_1} \quad (3)$$

where d is the thickness of the dielectric, Z_1 is the wave resistance of the air part of the line.

The input impedance Z_0 is expressed in terms of the experimentally determined running coefficient $q = E_{\min}/E_{\max}$ (E is the electric field strength) and the node displacement γ_1 of the standing wave:

$$Z_0 = Z_1 \frac{q - i \operatorname{tg} \beta_0 \gamma_1}{1 - iq \operatorname{tg} \beta_0 \gamma_1} \quad (4)$$

here $\beta_0 = \frac{2\pi}{\lambda_1}$. Equation (3) is solved by a graphical

method, in the form:

$$\frac{thT e^{i\tau}}{T e^{i\tau}} = C e^{i\xi} \quad (5)$$

here $T e^{i\tau}$ – polar form of the complex quantity γd . C and ξ are the modulus and argument, respectively, of the right side of equation (5). Substituting the notation $Z_0/Z_1 = R + iX$, then from equation (4) we get:

$$\begin{cases} R = \frac{q(1+tg^2 \beta_0 \gamma_1)}{1+q^2 tg^2 \beta_0 \gamma_1} \\ X = \frac{(q^2-1)tg \beta_0 \gamma_1}{1+q^2 tg^2 \beta_0 \gamma_1} \end{cases} \quad (6)$$

Taking into account (3) and (6) we have:

$$\begin{cases} C = \sqrt{A^2 + B^2} \quad \text{где } A = \frac{\lambda_1}{2\pi d} X \\ tg \xi = \arctg \frac{B}{A} \quad \text{где } B = \frac{\lambda_1}{2\pi d} R \end{cases} \quad (7)$$

Having determined the values C and ξ from expressions (6) and (7), we find T and τ from the graphical solution of equation (5) given in (7).

Since $T e^{i\tau} = \gamma d = d(\alpha + i\beta)$, then

$$\begin{cases} \alpha = \frac{T \cos \tau}{d} \\ \beta = \frac{T \sin \tau}{d} \end{cases} \quad (8)$$

Bearing in mind (2), to determine the real and imaginary parts of the complex permittivity, we obtain the following expressions:

$$\begin{cases} \epsilon' = \left(\frac{\lambda_1}{2\pi}\right)^2 (\beta^2 - \alpha^2) \\ \epsilon'' = \left(\frac{\lambda_1}{2\pi}\right)^2 2\alpha\beta \end{cases} \quad (9)$$

An analysis of the method showed that in the case of small and medium losses $tg\delta < 0.1$, accurate results are achieved at thicknesses that are multiples of an odd number of quarters of the wavelength in the sample. For large losses $tg\delta > 0.1$, the thickness of the sample has to be taken so small that it itself becomes a source of noticeable errors.

3. RESULTS AND DISCUSSION

On fig. 1.2 shows the temperature dependence of the permittivity ϵ' and dielectric losses ϵ'' for the chlorobenzene-hexane system, with the chlorobenzene content in mole fractions being 0.300; 0.562; 0.794 and 1.000.

At the point of solidification of the studied solutions, a sharp decrease in the values of dielectric permittivity ϵ' and dielectric losses ϵ'' is observed.

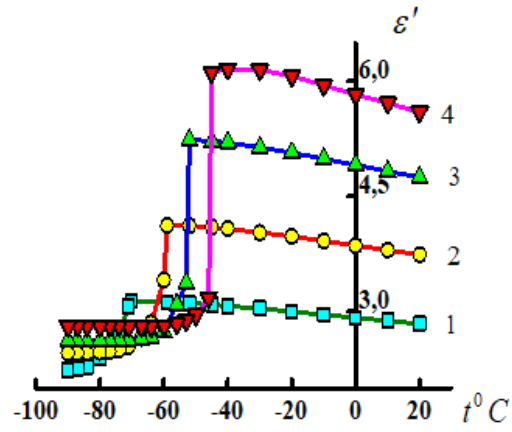


Fig. 1. Temperature dependence of ϵ' for the system chlorobenzene – hexane, 1 - 0.300; 2 - 0.562; 3 - 0.794; 4 - 1,000.

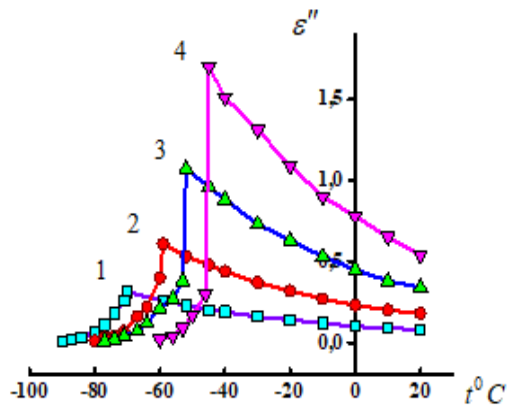


Fig. 2. Temperature dependence of ϵ'' for the system chlorobenzene - hexane, 1 - 0.300; 2 - 0.562; 3 - 0.794; 4 - 1.000.

Another type of complex permeability versus temperature curve $\epsilon^* = f(T)$ was found in the chlorobenzene-benzene system at chlorobenzene concentrations in mole fractions $x_2 = 0.179$ and $x_2 = 0.368$. In both cases, at the solidification point, there is a slight drop in the values of the permittivity ϵ' , while the values of the dielectric loss ϵ'' continue to grow (Fig. 3.4).

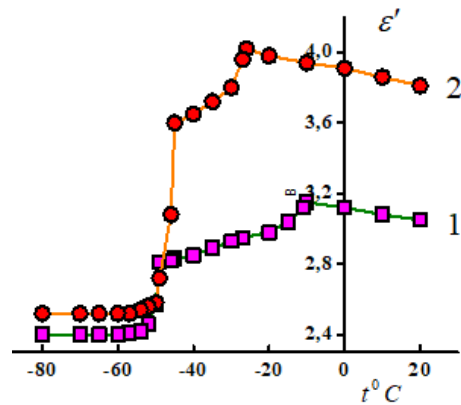


Fig. 3. Temperature dependence of ϵ' for the system chlorobenzene – benzene, 1 - 0.179; 2 - 0.368.

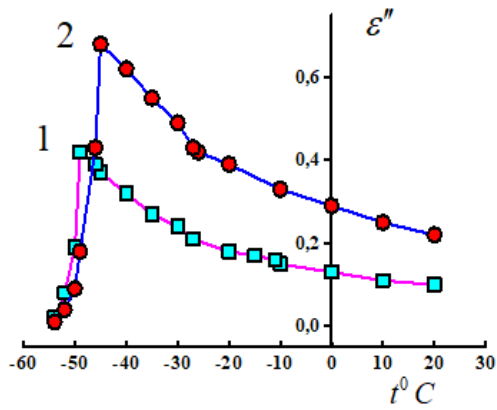


Fig. 4. Temperature dependence of ϵ'' for the system chlorobenzene - benzene, 1 - 0.179; 2 - 0.368.

This is more clearly manifested in the graph of the temperature dependence of the loss angle tangent $\text{tg}\delta = \epsilon''/\epsilon'$ for solutions of chlorobenzene - benzene (Fig. 5). The loss of rotational mobility of molecules occurs only when cooling is 200 below the solidification point $x_2 = 0.368$ and 400 – for $x_2 = 0.179$.

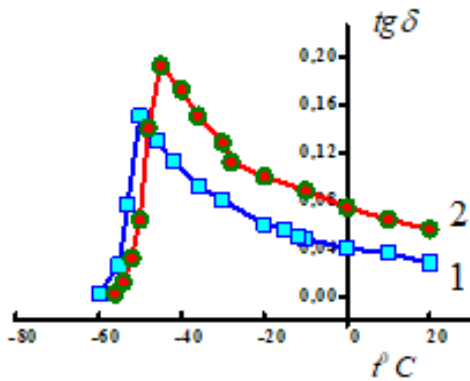


Fig. 5. Temperature dependence of $\text{tg}\delta$ for the system chlorobenzene - benzene, 1 - 0.368; 2 - 0.179.

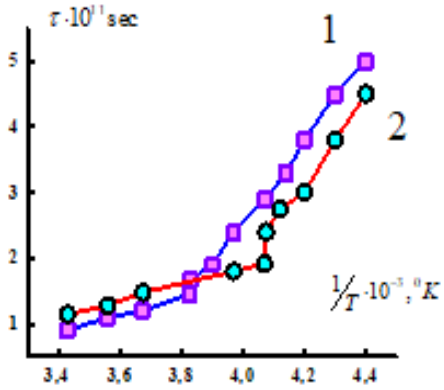


Fig. 6. Temperature dependence of relaxation time τ for the system chlorobenzene - benzene, 1 - 0.179; 2 - 0.368.

On fig. Figure 6 shows the temperature dependence of the relaxation time. As can be seen, at the point of solidification on the straight line of the graph, there is a sharp bend in the curve of the graph. Activation energy U according to the relation

$$r = A \exp(-U/RT) \quad (10)$$

equals 1.77 kcal/mol in liquid and 4.5 kcal/mol below the solidification point for $x_2 = 0.358$ and 1.65 kcal/mol in liquid and 4.7 kcal/mol below the solidification point for $x_2 = 0.179$.

Thus, at given concentrations, the solid state is characterized by the presence of two phases - an intermediate metastable phase, which passes with further cooling into a stable low-temperature phase.

Table 1 gives the results of the corresponding calculations for the studied solutions of chlorobenzene - benzene, chlorobenzene - hexane.

Table 1.

Values ΔF – free energy change, ΔH – enthalpy change, ΔS – activation entropy change for the process of dielectric relaxation in the temperature range $-40^\circ\text{C} \div 20^\circ\text{C}$

x_2	ΔF				$T\Delta S$				ΔH
	20^0	0^0	-20^0	-40^0	20^0	0^0	-20^0	-40^0	
Chlorobenzene – benzene									
0,179	2,37	2,98	–	–	–1,13	–1,04	–	–	1,24
0,368	2,44	2,35	2,27	–	–1,10	–1,01	–0,93	–	1,34
0,567	2,48	2,40	2,32	2,24	–1,06	–0,98	–0,90	–0,82	1,42
0,778	2,50	2,42	2,35	2,27	–1,04	–0,96	–0,89	–0,81	1,46
1,000	2,50	2,47	2,39	2,31	–1,01	–0,99	–0,90	–0,82	1,49
Chlorobenzene – hexane									
0,300	2,20	2,09	2,03	1,95	–1,20	–1,09	–1,03	–0,95	1,00
0,562	2,28	2,19	2,11	2,04	–1,16	–1,07	–0,99	–0,92	1,12
0,794	2,40	2,31	2,25	2,17	–1,07	–0,98	–0,92	–0,84	1,33
1,000	2,50	2,47	2,39	2,31	–1,01	–0,99	–0,90	–0,82	1,49

The results of the corresponding calculations of the values of ΔF , ΔH and ΔS of the studied solutions chlorobenzene - benzene, chlorobenzene - hexane show that the height of the potential barrier separating the two equilibrium positions of the polar molecule is the largest in the state of a pure polar liquid and decreases with dilution in a nonpolar solvent, and this is more pronounced in hexane than in benzene.

CONCLUSION

In almost all cases, the phase transition is accompanied by a sharp drop in the dielectric permittivity ϵ' and dielectric losses ϵ'' temperatures. Based on the temperature dependence of the relaxation time, the values of thermodynamic parameters for the process of dielectric relaxation are determined. The results are discussed in connection with the size and shape of the solvent molecules.

-
- [1] Yu.A. Gusev. Fundamentals of dielectric spectroscopy. Tutorial Kazan KSU, 2008, 112.
- [2] F. Kremer, A. Schonhals. Broadband Dielectric Spectroscopy. Springer, 2002, 729.
<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-56120-7>.
- [3] S.T. Azizov. Temperature dependence of dielectric relaxation of absorption spectra in the chlorobenzene – iodobenzene system. EAST EUROPEAN JOURNAL OF PHYSICS. ISSN 2312-4334, 2024, 453 – 459.
<https://doi.org/10.26565/2312-4334-2024-1-50/>
- [4] P.W. Smith. Transient electronics: Pulsed Circuit Technology. John Wiley & Sons Ltd, The Atrium, Southern Gate, Chichester, West Sussex PO19 8SQ, England, 2002, 15.
- [5] S.T. Azizov. Dielectric relaxation in solutions chlorobenzene - benzene and chlorobenzene – hexane//Modern Physics Letters B Vol. 38, № 20, 2450167 (12 pages), 2024.
<https://doi.org/10.1142/S0217984924501677>
- [6] D. Kumar, S.K. Sit, S.N. Singh, S. Sahoo. Investigation of dielectric relaxation in dipolar liquids from conductivity measurement. Bulletin of Materials Science, 2022, vol. 45 37 – 49.
<https://doi.org/10.1007/s12034-021-02597-x>
- [7] C.J.F. Böttcher and P.Bordewijk. Theory of Electric Polarization, v. 2, 2 nd. edn. Elsevier, Amsterdam, 1978.
<https://doi.org/10.1002/bbpc.19800841128>
- [8] S.T. Azizov. Temperature dependence of dielectric relaxation of absorption spectra in the chlorobenzene – iodobenzene system. EAST EUROPEAN JOURNAL OF PHYSICS. ISSN 2312-4334, 2024, 453 – 459.
<https://doi.org/10.26565/2312-4334-2024-1-501/>
- [9] E.Y. Salaev, E.R. Gasimov, Ch.O. Qajar, S.T.Azizov. Resonans reflektionles absorbpnion of elektromagnetik waves in solutions. Turkish Journal of Physics, 1998, v. XXII № 5 389 – 393
<https://journals.tubitak.gov.tr/physics/vol22/iss5/4/>

TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE KINETIC COEFFICIENTS OF BISMUTH RICH SEMIMETALLIC Bi-Sb ALLOYS

A.A. MUSAYEV¹, E.R. YUZBASHOV²

¹National Aviation Academy, Mardakan ave. 30, Baku, Azerbaijan

²Institute of Physics Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan,
H.Javid ave. 131, AZ1073, Baku, Azerbaijan

e-mail: eltaj100@yahoo.com

The temperature dependence (in the 78 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 alloys of $\text{Bi}_{0.97}\text{Sb}_{0.03}$ and $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ 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_3 , correspondingly; and the tilt angle of electronic isoenergetic ellipsoids to the bisectrix axis (φ_e). Calculations were carried out for two- (L electrons and T holes) and three-band (L electrons, T and L holes) models.

Keywords: 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 system 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.

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].

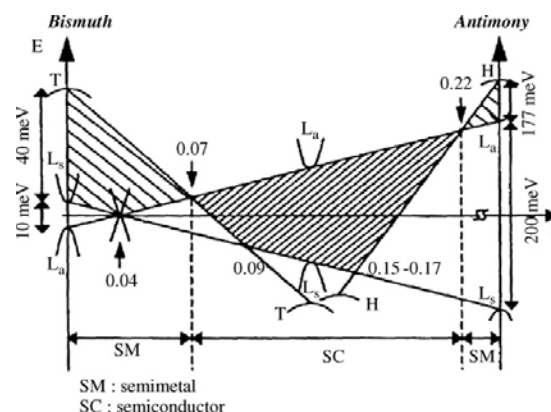


Fig. 1. Schematic representation of the energy bands near the Fermi level for $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ alloys as a function of x at $T=0$ K.

In 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 (77K-300K) 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 alloys of $\text{Bi}_{0.97}\text{Sb}_{0.03}$ and $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ at the temperature range of 78÷300 K was carried out in the paper. Single crystals of the alloys 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 ÷ 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 ÷ 0.04 Tesla at nitrogen temperatures).

The following components of the tensor of electric resistance in low magnetic field for the alloy of $\text{Bi}_{0.97}\text{Sb}_{0.03}$ and $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ - 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).

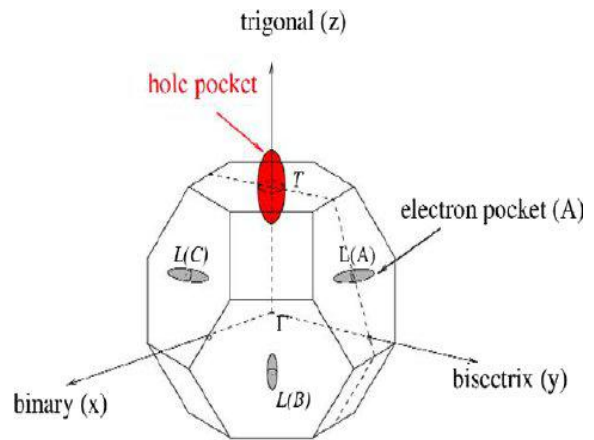


Fig. 2. The Brillouin zone of Bi and Bi-rich alloys showing three L-point electron pockets and one T-point hole pocket.

The dependence of components of specific resistance (ρ_{11} and ρ_{33}) on temperature at the investigated temperature range showed metallic character (fig. 3.a,b). The temperature dependences of the Hall and magnetoresistance coefficients are shown in the figures 4.a, b and 5.a, b, correspondingly.

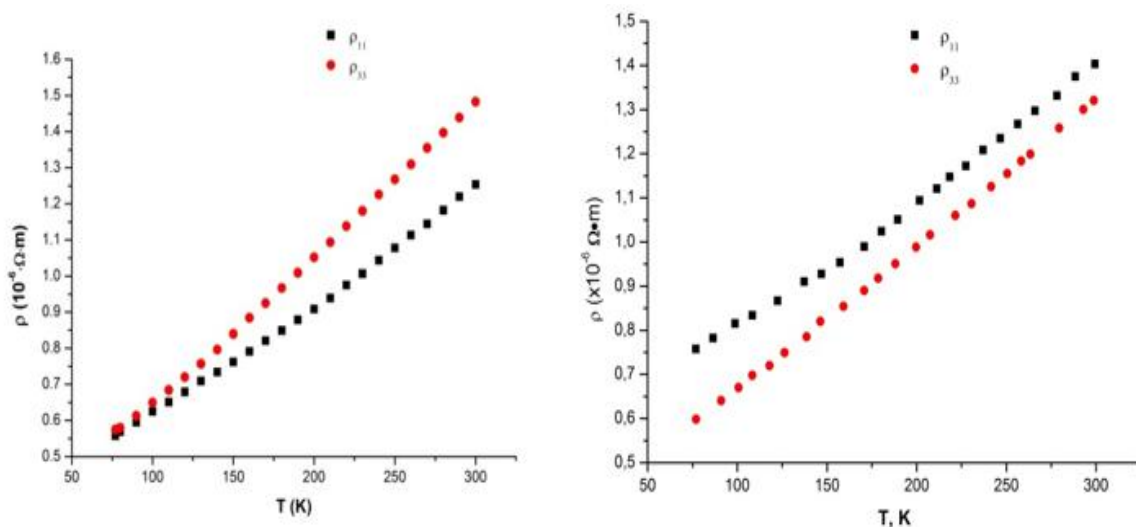


Fig. 3. Temperature dependence of isothermal specific resistivities ρ_{11} and ρ_{33} for $\text{Bi}_{0.97}\text{Sb}_{0.03}$ (a) and $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ (b) alloys.

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 conductance 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.

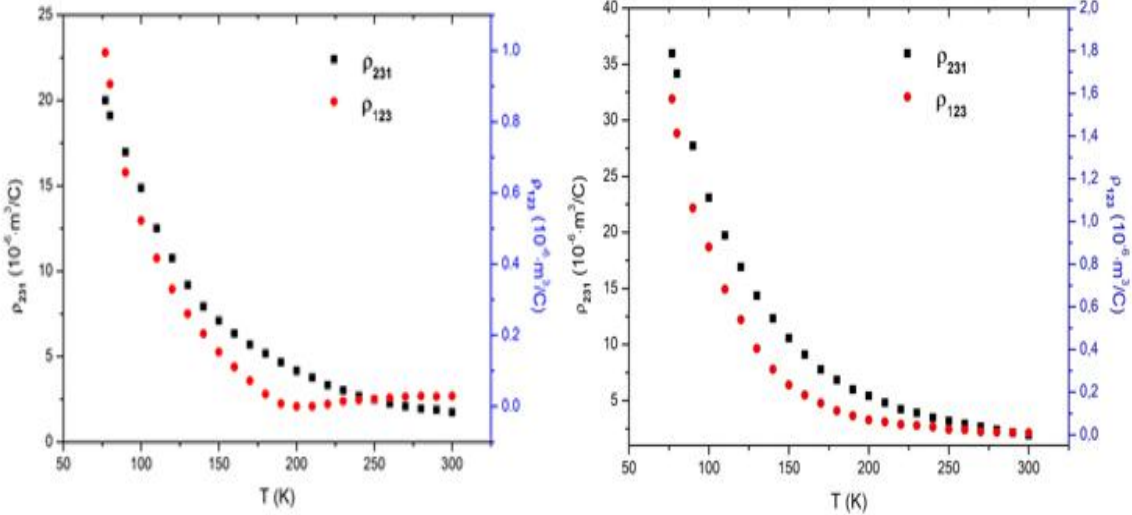


Fig. 4. Temperature dependence of Hall coefficients R_{231} and R_{123} $\text{Bi}_{0.97}\text{Sb}_{0.03}$ (a) and $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ (b) alloys.

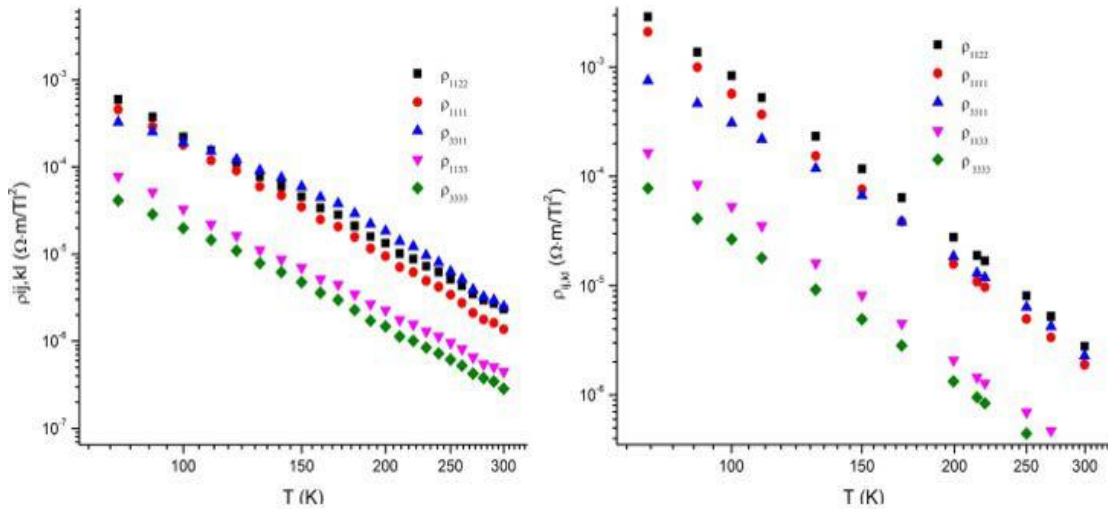


Fig. 5. Temperature dependence of five components of magnetoresistance in double-logarithmic scale for $\text{Bi}_{0.97}\text{Sb}_{0.03}$ (a) and $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ (b) alloys.

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 78K to 120 ÷ 160K) 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.

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 functions of \mathbf{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

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{11} &= \frac{1}{\rho_{11}}; & \sigma_{33} &= \frac{1}{\rho_{33}} \\ \sigma_{123} &= \frac{R_{123}}{\rho_{11}^2}; & \sigma_{231} &= \frac{R_{231}}{\rho_{11}\rho_{33}} \\ \sigma_{1111} &= \frac{\rho_{1111}}{\rho_{11}^2}; & \sigma_{1122} &= \frac{\rho_{1122}}{\rho_{11}^2} + \frac{R_{231}^2}{\rho_{11}^2\rho_{33}}; & \sigma_{1133} &= \frac{\rho_{1133}}{\rho_{11}^2} + \frac{R_{123}^2}{\rho_{11}^3} \\ \sigma_{3333} &= \frac{\rho_{3333}}{\rho_{33}^2}; & \sigma_{3311} &= \frac{\rho_{3311}}{\rho_{33}^2} + \frac{R_{231}^2}{\rho_{33}^2\rho_{11}} \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

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 v_i (where i is 1, 2, 3) of electrons and 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 hole ellipsoids (pockets) localized at L point of the BZ and heavy holes localized at T point. The important assumptions are independent contribution to electric current from each valley and

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:

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 two models for the semimetallic alloys:

$$\sigma(\vec{B}) = 3\sigma_s^e(L) + \sigma_s^h(T) \quad (4)$$

and

$$\sigma(\vec{B}) = 3\sigma_s^e(L) + \sigma_s^h(T) + 3\sigma_s^h(L) \quad (5)$$

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:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= \frac{1}{2}Ne[\mu_1 + C^2\mu_2 + S^2\mu_3] \\ \sigma_{33} &= Ne[S^2\mu_2 + C^2\mu_3] \\ \sigma_{231} &= \frac{1}{2}Ne[\mu_2\mu_3 + \mu_1(S^2\mu_2 + C^2\mu_3)] \\ \sigma_{123} &= Ne[\mu_1(C^2\mu_2 + S^2\mu_3)] \\ \sigma_{1133} &= \frac{1}{2}Ne[\mu_1(\mu_1 + C^2\mu_2 + S^2\mu_3)(C^2\mu_2^2 + S^2\mu_3^2)] \\ \sigma_{3311} &= \frac{1}{2}Ne[(S^2\mu_1 + C^2\mu_3) + [\mu_2\mu_3 + \mu_1(S^2\mu_2 + C^2\mu_3)]] \\ \sigma_{1111} &= \frac{1}{8}Ne[S^2\mu_2(\mu_1 - \mu_3)^2 + C^2\mu_3(\mu_1 - \mu_2)^2 + 3S^2C^2\mu_1(\mu_2 - \mu_3)] \\ \sigma_{1122} &= \frac{1}{8}Ne[3S^2\mu_2(\mu_1^2 + \mu_3^2) + 3C^2\mu_3(\mu_1^2 + \mu_2^2) + C^2S^2\mu_1(\mu_2 - \mu_3)^2 + 2\mu_1\mu_2\mu_3] \\ \sigma_{3333} &= Ne[C^2S^2\mu_1(\mu_2 - \mu_3)^2] \end{aligned}$$

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 $\varphi_e(L) = \varphi_h(L)$; for T-holes $\varphi_h(T) = 0$. So, for heavy holes $S = 0$ and $C = 1$ and $v_1 = v_2$, because T-ellipsoid is an ellipsoid of revolution.

To obtain a fairer assessment of the experimental data, a computer program producing a least-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 ; their mobilities μ_1 , μ_2 , μ_3 and

v_1 , v_3 , correspondingly; and the tilt angle of electronic isoenergetic ellipsoids to the bisectrix axis (φ_e). 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 . The contribution of μ_2 is 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 P , localized at T-point of the Brillouin zone.

Table 1.a. Calculated kinetic parameters of Bi_{0.97}Sb_{0.03} alloy obtained for model N_L=P_T

T	N=P	φ	μ ₁	μ ₂	μ ₃	v ₁	v ₃
K	*10 ²⁴ m-3	Deg.	m ² /V·sec				
80	0.205	6.41	83.02	0.011	49.4	12.8	5.3 6
90	0,243	6.58	65.9	0.024	38.7	10.4	4.31
110	0,327	7.08	44.9	0.034	25.6	6.72	3.19
130	0.428	6.75	31.6	0.092	17.02	4.72	2.72
150	0,55	7.29	23.1	0.11	11.9	3.32	1.96
170	0.692	6.99	17.1	0.10	8.56	2.41	1.39
190	0.859	6.99	12.9	0.065	6.23	1.73	1.11
210	1.02	7.62	10.05	0.068	4.73	1.39	0.953
230	1.25	7.62	7.55	0.065	3.54	1.11	0.785
250	1.52	7.67	5.88	0.031	2.75	0.878	0.627
270	1.75	7.9	4.71	0.028	2.19	0.733	0.527
300	2.13	7.9	3.53	0.036	1.71	0.597	0.346

Table 1.b. Calculated kinetic parameters of Bi_{0.94}Sb_{0.06} alloy obtained for model N_L=P_T

T	N=P	φ	μ ₁	μ ₂	μ ₃	v ₁	v ₃
K	*10 ²⁴ m-3	Deg.	m ² /V·sec				
80	0.11	6.41	119.0	0.65	82.3	9.44	14.6
90	0.143	6.58	94.3	0.54	55.0	7.60	12.9
110	0.204	7.08	62.9	0.38	34.3	5.31	8.0
130	0.285	6.75	45.6	0.24	22.2	3.75	5.27
150	0.374	7.29	32.3	0.16	15.1	2.80	4.11
170	0.489	6.99	23.9	0.10	10.2	2.11	3.10
190	0.626	6.99	17.8	0.076	7.4	1.60	2.2
210	0.775	7.62	13.5	0.055	5.5	1.31	1.8
250	1.23	7.67	7.61	0.036	3.11	0.76	0.95
270	1.48	7.9	6.01	0.031	2.40	0.62	0.77
300	1.99	7.9	4.03	0.024	1.71	0.45	0.46

The result of calculations for the case of equality carrier densities of electrons N to the sum of carrier densities of heavy holes localized at T- and light holes at L- points of the Brillouin zone (i.e. N_L= P_L + P_T) is shown in the Table 2.

In this calculation the tilt angle of electronic isoenergetic ellipsoids to the bisectrix axis (φ_e) was chosen as a constant equaled to 6°40". This assumption is valid, because in the temperature range studied the alteration of φ_e does not greatly affect to the result of the calculation. Further the calculations indicated that as the temperature increases the results of the calculation are less sensitive to the value of v₃. So, the data for v₃ is not cited, because an accurate value of it cannot be obtained.

The Tables 2 a.,b. show that a contribution of light holes P_L into the total hole conductivity (P=P_L+P_T=N) increases as the temperature rises, but a relative

contribution of light holes to the total hole conductivity R [R=P_L/(P_L+P_T)] has a maximum at the temperature about 250K. Such dependence may be explained, if we take into account that in the narrow-gap semimetals as Bi-Sb the energetic gap E_g, in the first approximation, is increasing in quadratic law [12], but activation thermal energy in linear law by the increasing of temperature. Therefore, a contribution of light holes P_L decreases as the temperature rises in the range of high temperatures.

Taking into the account that formulas connecting ρ_{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.

Table 2.a. Calculated kinetic parameters of Bi_{0.97}Sb_{0.03} alloy obtained for model N_L=P_T+P_L

T	N	P _T	P _L	μ ₁	μ ₂	μ ₃	v ₁
K	*10 ²⁴ m-3			m ² /V·s			
80	0.22	0.2132	0.0068	80.2	0.26	48.1	10.31
90	0.25	0.147	0.103	64.3	0.066	39.3	9.98
110	0.33	0.210	0.12	42.7	0.12	27.7	6.72
130	0.44	0.288	0.152	29.1	0.13	18.5	4.72
150	0.56	0.375	0.185	21.3	0.14	13.1	3.33
170	0.70	0.485	0.215	16.5	0.13	9.71	2.45
190	0.87	0.616	0.254	12.6	0.13	6.73	1.72
210	1.11	0.757	0.353	9.52	0.1	5.16	1.31
230	1.33	0.861	0.469	6.93	0.087	3.84	1.13
250	1.52	1.18	0.34	5.37	0.061	3.12	0.86
270	1.83	1.43	0.4	4.4	0.043	2.44	0.72
300	2.21	1.92	0.29	3.21	0.041	1.79	0.58

Table 2.b. Calculated kinetic parameters of Bi_{0.94}Sb_{0.06} alloy obtained for model N_L=P_T+P_L

T	N	P _T	P _L	μ ₁	μ ₂	μ ₃	v ₁
K	*10 ²⁴ m-3			m ² /V·s			
80	0.119	0.114	0.005	114.2	0.47	83.1	6.61
90	0.156	0.147	0.008	82.9	0.46	58.6	5.80
110	0.225	0.210	0.015	53.7	0.36	37.7	4.21
130	0.311	0.288	0.023	37.1	0.25	24.5	3.12
150	0.407	0.375	0.032	27.3	0.18	17.1	2.5
170	0.531	0.485	0.046	19.9	0.13	11.7	1.91
190	0.677	0.616	0.061	14.9	0.096	8.4	1.40
210	0.837	0.757	0.080	11.5	0.079	6.3	1.11
250	1.31	1.18	0.127	6.7	0.052	3.5	0.86
270	1.58	1.43	0.151	5.4	0.047	2.7	0.58
300	2.09	1.92	0.171	3.9	0.035	1.9	0.44

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 Bi_{1-x}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.

- | | |
|--|--|
| <p>[1] S. Tang and M. S. Dresselhaus. J. Mater. Chem. C, 2014, 2, 4710-4726.</p> <p>[2] A. Nikolaeva, L. Konopko, T. Huber, P. Bodiul, I. Popov E. Moloshnik. Journal of Electronic Materials, 2012, 1- 4.</p> <p>[3] S. Tang and M. S. Dresselhaus. Physical Review B, 2012, 86, 075436.</p> <p>[4] B. Landschreiber, E. Gunes, G. Homm, C. Will, P. Tomeš, C. Rohner, A. Sesselmann, P. Klar, S.</p> | <p>Paschen, E. Muller and S. Schlecht. Journal of Elec. Materials, 2013, 1-6.</p> <p>[5] S. Tang and M. S. Dresselhaus. Nanoscale, 2012, 4, 7786-7790.</p> <p>[6] L. Fu and C. L. Kane. Physical Review B, 2007, 76, 045302.</p> <p>[7] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. Cava and M.Z. Hasan. Nature, 2008, 452, 970-974.</p> |
|--|--|

- [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.

THERMODYNAMIC PROPERTIES OF BIOFUEL COMPONENTS

L.A. AKHMEDOVA-AZIZOVA¹, I. M. ABDULAGATOV², M.A. MAMMEDOVA³,
G.N. NAJAFOV⁴, M.A. TALYBOV⁵¹Azerbaijan Technical University, Department of Energy efficiency and green energy technologies
akhmedova_la@yahoo.com²Geothermal and Renewal Energy Institute, High Temperature Joint Institute of the Russian Academy of Sciences, Makhachkala, Dagestan, Russia Federation. Dagestan State University, Makhachkala, Dagestan, Russian Federation.ilmutdina@gmail.com³Azerbaijan Technical University, Department of Energy efficiency and green energy technologies
e.a.8900@mail.ru⁴PhD Associate professor, Baku Engineering University, Department of Physics, Baku, Azerbaijan
gachaynajafov@gmail.com⁵Azerbaijan Technical University, Department of Energy efficiency and green energy technologies
misirkhantalibov@yahoo.com

The density (ρ) and speed of sound (u) of two main components of biofuels, methyl laurate and methyl stearate, were measured at temperatures from (283 to 353) K and from (313 to 353) K at atmospheric pressure, respectively. An Anton Paar DSA 5000 M sound-speed analyzer, has been used to simultaneously measurements of the density and speed of sound of the methyl laurate and methyl stearate as the primary components of biodiesel fuel. The measured values of density and speed of sound were used to calculate other derived key thermodynamic properties such as the adiabatic coefficient of bulk compressibility (β_s), coefficient of thermal expansion (α_p), isothermal coefficient of bulk compressibility (β_T), isochoric (C_V) and isobaric (C_P) heat capacities, enthalpy (ΔH) and entropy (ΔS) difference, partial temperature derivative of enthalpy $(\partial H/\partial T)_P$ and entropy $(\partial S/\partial T)_P$, and the partial specific volume derivatives of internal energy $(\partial U/\partial V)_T$ (internal pressure) of methyl laurate and methyl stearate as a function of temperature. The overall uncertainties (at the 95 % confidence level) of the reference correlations of the density and speed of sound of methyl laurate and methyl stearate are 0.025 % and 0.045 %, respectively.

Keywords: density, speed of sound, methyl esters (FAMES), methyl laurate and methyl stearate.

INTRODUCTION

Thermophysical properties of the fuel components such as density, viscosity, heat capacity, and enthalpy play a fundamental role in mass and heat transfer. Biofuel, mainly derived from vegetable oils or the fermentation of plant material, have gained importance over the last few decades as more sustainable and environmentally friendly alternatives to fossil fuels. Biofuel is a type of fuel derived from organic materials, such as plants and animal waste. It can be used as an alternative to fossil fuels in various applications, including transportation, heating, and electricity generation.

Common types of biofuels include:

1. Ethanol: Made from fermented plant sugars, often derived from corn or sugarcane.
2. Biodiesel: Produced from vegetable oils, animal fats, or recycled cooking oil through a process called transesterification.

Biofuels are considered renewable energy sources because they can be replenished over time. They can help reduce greenhouse gas emissions and dependence on fossil fuels, though their production can also have environmental impacts, such as deforestation or land-use changes.

Biodiesel primarily consists of fatty acid methyl esters (FAME), which are produced from the

transesterification of triglycerides found in vegetable oils, animal fats, or recycled cooking oils. During this process, the triglycerides react with an alcohol (usually methanol or ethanol) in the presence of a catalyst to form biodiesel and glycerin.

The main feed stocks for biodiesel include:

1. Vegetable oils: Such as soybean, canola, palm, and sunflower oil.
2. Animal fats: Such as tallow and lard.
3. Recycled oils: Used cooking oils from restaurants and food processing.

Biodiesel can be used in diesel engines either on its own or blended with petroleum diesel, making it a renewable alternative to traditional fossil fuels. Thus, biodiesel consist of the alkyl monoesters of fatty acids from vegetable oils and animal fats and can be used in existing diesel engines without modification [1]. The injection timing changes are causing different exhaust emissions, for example, NO_x emissions increase with advanced timing. The main purposes of the present study are to measure of the density and speed of sound and derived values of adiabatic compressibility, of two main constituents of biodiesel (methyl laurate and methyl stearate), at temperatures from melting point to 353 K and atmospheric pressure of (101.325 kPa). There is great scientific interest in study of the thermodynamic properties of main components of biofuels. The thermodynamic properties of biofuels are

varying from one biomass feedstock to another. Methyl laurate and methyl stearate are the primary components of biodiesel fuel. The measurements were performed using an Anton Paar DSA 5000 M sound-speed analyzer (viscodensimeter) for the simultaneously measurements of the density and speed of sound temperature range from (283.15 to 353.15) K and atmospheric pressure. This technique was successfully used previously [3-13] to accurately measure thermodynamic, acoustic, and transport properties of different types of natural and molecular liquids. Besides, the key derived thermodynamic properties for practical applications based on the measured data were calculated. There are limited and inconsistent thermodynamic properties data for methyl laurate and methyl stearate in the literature. We provide a brief review of some of the works that are reported the density and speed of sound data for methyl laurate and methyl stearate.

EXPERIMENTAL AND MATERIALS

Materials

The samples (methyl laurate and methyl stearate) were purchased from a commercial supplier with stated purities greater than or equal to 99 wt %. The density and speed of sound of the methyl laurate and methyl stearate at atmospheric pressure (101.325 kPa) at elevated temperatures have been simultaneously measured with a sound-speed analyzer DSA 5000 M (digital VTD, Anton Paar Instrument, Austria) [8-13].

Experimental Method

Several methods such as DSA5000M VTD, DMA 5000, and modified Sprengel pycnometers or tube techniques have been applied to accurately measure the density of methyl laurate and methyl stearate with an uncertainty of (0.05 to 0.1) kg·m⁻³. Reported speed of sound data were measured using Anton Paar DSA 5000 M sound-speed analyzer (visco-densimeter) or pulse-echo speed of sound measurement cell with an uncertainty within (0.1 to 0.5) m·s⁻¹.

The working principle of an oscillation-type densimeter is based on the law of harmonic oscillation, in which a U-tube is completely filled with the sample under study and subjected to an electromagnetic force. The measurement of the frequency and duration of vibration of the tube filled with the sample, allows the determination of the density of the sample. This measuring principle is based on the Mass-Spring Model. The measuring cell consists of an oscillator formed by a hollow U-shaped tube made from glass or metal. The tube has double walls and space between them is filled with a gas with high thermal conductivity. In this space is also placed a platinum resistance thermometer (PRT) that allows the temperature measurement of the sample during the density measurements.

Density measurements with a VTD are based on the dependence of the period of oscillation of a unilaterally fixed U-tube on its mass. This mass consists of the U-tube material and the mass of the fluid

sample under study filled into the U-tube. Vibrating – tube is a technique to determine the density of liquids based on an electronic measurement of the frequency of oscillation, from which the density can be calculated. The well-known principle of vibrating-tube densimeters is based on the theory of vibration and material deformation of mechanical oscillator concerning a U-shaped tube of constant volume filled with a fluid sample. Stationary oscillations of the tube are maintained by the electromagnetic force, generated by means of a drive system, acting on the tube. The two branches of the U-shaped oscillator function as its spring elements. The input signal for the drive system is obtained from a pick-up system that converts mechanical oscillations of the tube into an electrical signal. If the sample volume inside the cell is constant, the oscillations are close to the resonant frequency

$$f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m_0 + V_b \rho_b}} \quad (1)$$

of the tube and are related (function) to the density ρ_b of a fluid filled in; $m_b = \rho_b V_b$ is the sample mass. It is apparent that ρ_b , m , V_b , and f depend on the measurement conditions, *i.e.* on the T , P , and viscosity of the fluid. The period of the oscillation of the filled tube is

$$\tau = f^{-1} \quad \text{or} \quad \tau = 2\pi \sqrt{\frac{m + V_b \rho_b}{k}} \quad (2)$$

Applying the square of Eq. 2 we can obtain the working equation for this method as

$$\rho_b = A - B\tau^2 \quad (3)$$

where instrument constants (parameters) $A = \frac{m}{V_b}$ and

$B = \frac{k}{4\pi^2 V_b}$ in which the cell volume and the cell mass are involved as well as the spring constant k of the measuring cell are both functions of temperature and pressure. Usually the temperature and pressure dependences of the parameters A and B are determined using the calibration procedures with a minimum of two reference fluids such as water, air, nitrogen, benzene, and toluene whose PVT properties are well known and should be performed very carefully (Lemmon et al. 2010). Particularly, the instrument constant, as this follows from Eq. 3, The calibration

constant $B = \frac{\rho_1 - \rho_2}{\tau_2^2 - \tau_1^2}$, can be determined by measuring

the oscillation periods (τ_1^2 and τ_2^2) for two reference fluids with well-known densities (ρ_1 and ρ_2). The parameter B is approximately a linear function of temperature (slope is about 10^{-4} to 10^{-3} K⁻¹). The accuracy of the method is limited by the calibration procedure and depends on the uncertainty of the properties of calibrating fluid. The temperature in the measuring cell, where located the U-tube, was

controlled using a thermostat with an uncertainty of 10 mK and measured using the (ITS-90) PRT100 thermometer with an uncertainty 0.03 K. This densimeter (DMA4500) allows for a highly precise density measurements in the wide measuring range from (0 to 3000) kg·m⁻³ and at temperatures from (273 to 363) K. The uncertainty of the density measurements is 5×10⁻⁵ g·cm⁻³ (or about 0.005 %). The repeatability of density and temperature measurements are 1×10⁻⁵ g·cm⁻³ and 0.01 K, respectively. This type VTD has

been successfully used previously in our earlier publications to accurate measure of the density of various fluids (ionic liquids, hydrocarbons, and their mixtures with alcohols (Abdulagatov *et al.* 2008a-d; Schmidt *et al.* 2012).

During the oscillation of the U-tube, the sample shows the effect of damping of the oscillation, which is function of the sample viscosity. Correction related with influence of the viscosity can be estimated as (Segovia *et al.* 2009)

$$\rho_{cor} = \rho_{unc} [1 - (0.4482\sqrt{\eta} - 0.1627)10^{-4}] \quad (4)$$

where ρ_{cor} is the “corrected” and ρ_{unc} “uncorrected” densities. This correction for our geothermal samples is within (0.001 to 0.004) %. The total absolute uncertainty (kg·m⁻³) in density measurements caused by the viscosity and oscillation nodes move effects can be approximately estimated as $\Delta\rho_b \approx 0.05\sqrt{\eta}$, where η is the viscosity of fluid in mPa·s. The correction for the present geothermal samples is within from (0.03 to 0.06) kg·m⁻³ or (0.0035 to 0.006) %.

the present measured speed of sound data for methyl laurate and methyl stearate (deviation statistics) with the reported data sources are provided in our publication [13].

Derived Thermodynamic Property Data

In the present work, we have critically assessed all of the reported data for their internal consistence (see above) to carefully select primary data to fit correlation models. The selected primary density and speed of sound data for methyl laurate and methyl stearate together with the present data were fitted to eqs. (5) and (6)

$$\rho(T) = \rho_0 + \rho_1 T + \rho_2 T^2 \quad (5)$$

$$u(T) = u_0 + u_1 T + u_2 T^2 \quad (6)$$

All 42 (for methyl laurate) and 25 (methyl stearate) primary speed of sound data deviates from the values calculated from reference correlation eq. (3) within less than 0.1 %, except two data points where the deviations are within 0.12 % and 0.15 % at temperatures of 323.15 K and 333.15 K, respectively (Table 1).

Based on the measured density and speed of sound data together with the selected reported vapor-pressure data the derived key thermodynamic properties of methyl stearate have been calculated using well-known thermodynamic relations. The calculated values of the thermodynamic property data of methyl laurate are given in Tables 2.

RESULTS AND DISCUSSION

Density

Density measurements were performed at atmospheric pressure of 101.325 kPa as a function of temperature from (283 to 353) K for methyl laurate and from (313 to 353) K for methyl stearate. Each density measurement was repeated 5 times for both samples. The average absolute deviations AAD between the present density and the majority of reported data are within 0.03 % (for methyl laurate) and 0.02 % (for methyl stearate).

Speed of Sound

Measurements of the speed of sound of the same FAMES samples were performed at atmospheric pressure (101.325 kPa) as a function of temperature over a same temperature range as in density experiment, namely, from (283 to 353) K for methyl laurate and from (313 to 353) K for methyl stearate in our previous publications. The detailed quantitative comparison of

Table 1.

Values of fitting parameters (ρ_i) and (u_i) of the reference correlation eqs. (5) and (6) for density and speed of sound of methyl laurate and methyl stearate together with the deviation statistics

Sample	ρ_0	ρ_1	ρ_2	AAD, (%)	Bias, (%)	St.Dev, (%)	St.Err, (%)	Max.Dev, (%)
Methyl laurate	1097.89608	-0.768915	-0.359156	0.03	0.00	0.04	0.00	0.11
Methyl stearate	1138.61037	-1.087851	5.330402	0.02	0.00	0.03	0.00	0.11
Sample	u_0	u_1	u_2	AAD, (%)	Bias, (%)	St.Dev, (%)	St.Err, (%)	Max.Dev, (%)
Methyl laurate	2784.93874	-6.000006	0.003785	0.04	0.00	0.06	0.01	0.18
Methyl stearate	3016.93713	-7.028059	0.005302	0.05	0.00	0.06	0.01	0.15

Table 2.

Derived, from the present density (ρ) and speed of sound (u) measurements, values of the key thermodynamic properties of methyl stearate

$T(K)$	$Q_s \times 10^9 (Pa^{-1})$	$a_p \times 10^3 (K^{-1})$	$\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T \times 10^3 (m^3 \cdot kg^{-1})$	$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T (MPa)$	$-\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right) \times 10^6 (m^3 \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1})$	$Q_T \times 10^3 (MPa^{-1})$	$V (MPa \cdot K^{-1})$	$C_V (kJ \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1})$	$C_P (kJ \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1})$
313.15	0.6598	0.8868	0.8495	349.09	1.0431	0.7953	1.1151	1.774	2.138
318.10	0.6799	0.8845	0.8490	344.40	1.0449	0.8167	1.0830	1.788	2.148
323.15	0.7047	0.8821	0.8484	338.24	1.0467	0.8425	1.0470	1.810	2.164
328.10	0.7252	0.8796	0.8478	333.84	1.0483	0.8642	1.0178	1.825	2.175
333.09	0.7506	0.8771	0.8473	327.83	1.0500	0.8909	0.9845	1.842	2.189
338.08	0.7746	0.8746	0.8468	322.66	1.0515	0.9161	0.9547	1.857	2.197
340.07	0.7844	0.8735	0.8466	320.58	1.0521	0.9263	0.9430	1.865	2.203
343.12	0.7976	0.8719	0.8463	318.11	1.0529	0.9402	0.9274	1.875	2.210
348.06	0.8240	0.8693	0.8458	312.60	1.0543	0.9676	0.8984	1.892	2.222
353.15	0.8511	0.8666	0.8454	307.28	1.0556	0.9956	0.8704	1.910	2.234

CONCLUSIONS

The density and speed of sound of two FAMES (methyl laurate and methyl stearate) have been measured over a temperature range from melting points to 353 K at atmospheric pressure. New wide-ranging reference correlations for density and speed of sound of methyl laurate and methyl stearate at atmospheric pressure were developed. The correlations based on the present measured and the critically assessed reported

density and speed sound data (primary data). The correlations are applicable over the temperature range from melting point (278.15 K for methyl laurate and 310.95 K methyl stearate) to 353 K, although reasonable safety extrapolation to high temperatures (up to 453 K) is possible. The overall uncertainty of the reference correlations of the density and speed of sound of methyl laurate and methyl stearate are 0.03 % and 0.02 % (for density) and 0.04 % and 0.05 % (for speed of sound), respectively.

- [1] M.E. Tat, J.H. van Gerpen. Measurement of Biodiesel Speed of Sound and Its Impact on Injection Timing National Renewable Energy Laboratory Measurement of Biodiesel Speed of Sound and Its Impact on Injection Timing. NREL/SR-510-31462, Golden, Colorado, 2003.
- [2] M.L. Huber, E.W. Lemmon, A. Kazakov, L.S. Ott, T.J. Bruno. Model for the Thermodynamic Properties of a Biodiesel Fuel. *Energy & Fuels*, 2009, 23, 3790-3797.
- [3] S.M. Rasulov, I.M. Abdulagatov. PVT, saturated liquid density and vapor-pressure measurements of main components of the biofuels at high temperatures and high pressures: Methyl palmitate. *Fuel* 2018, 218, 282-294.
- [4] S.M. Rasulov, I.A. Isaev, M. Dzida, I.M. Abdulagatov. High-temperature and high-pressure density and liquid-vapor phase transition properties of methyl octanoate as main biofuel component. *Fuel*, 2021, 291, 120058.
- [5] R.A. Usmanov, S.V. Mazanov, A.R. Gabitova, L.Kh. Miftakhova, F.M. Gumerov, R.Z. Musin, I.M. Abdulagatov. The effect of fatty acid ethyl esters concentration on the kinematic viscosity of biodiesel fuel. *J. Chem. Eng. Data*, 2015, 60, 3404–3413.
- [6] D. Sagdeev, I. Gabitov, Ch. Isyanov, V.Khairutdinov, M. Farakhov, Z. Zaripov, I.Abdulagatov. Temperature effect on density and viscosity of oleic acid. *J. Am. Oil Chem. Soc.*, 2019, 96, 647-662.
- [7] I.M. Abdulagatov, N.G. Polikhronidi, R.G.Batyrova, M. Dzida. Isochoric heat capacity, phase transition and derived key thermodynamic properties of methyl decanoate, *Fuel*, 2022, 310, 122251.
- [8] I.M. Abdulagatov, L.A. Akhmedova-Azizova, R.M. Aliev, G.B. Badavov. Measurements of the Density, Speed of Sound, Viscosity and Derived Thermodynamic Properties of Geothermal Fluids. Part. I. *J. Chem. Eng. Data*, 2016, 61, 234–246.
- [9] I.M. Abdulagatov, L.A. Akhmedova-Azizova, R.M. Aliev, G.B. Badavov. Measurements of the density, speed of sound, viscosity and derived thermodynamic properties of geothermal fluids. Part II. *Appl. Geochem.*, 2016, 69, 28-41.
- [10] I.M. Abdulagatov, G.B. Badavov, L.A.Akhmedova-Azizova, R.M. Aliev. Thermodynamic properties of geothermal

THERMODYNAMIC PROPERTIES OF BIOFUEL COMPONENTS

- fluids from South Russia. Kayakent and Kizlyar hot sources, In: Heat- Mass Transfer and Geodynamics of the Lithosphere, ed. Dr. V. Svalova, Springer, 2021, pp. 275-301.
- [11] *I.M. Abdulagatov, G.B. Badavov, L.A.Akhmedova-Azizova, R.M. Aliev.* Thermodynamic properties of geothermal fluids from South Russia: Izberbash and Ternair hot sources, In: Heat- Mass Transfer and Geodynamics of the Lithosphere, ed. Dr. V. Svalova, Springer, 2021, pp.303- 333.
- [12] *K. Moodley.* Density, Speed of Sound, and Refractive Index Data for Butan-1-ol (1) + Butane- 1,4-diol (2)/Butane-2,3-diol (2) Mixtures at T= (298.15–338.15) K and 0.101 MPa. *J. Chem. Eng.Data*, 2021, 66, 12, 4391–4403.
- [13] *L.A. Akhmedova-Azizova, M.A. Mammedova, G.N. Nazhafov, I.M. Abdulagatov, M.A.Talybov,* Measurements and reference correlation of the density and speed of sound and derived thermodynamic properties of methyl laurate and methyl stearate. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2022, 67(3), 580-593

KINETICS OF STRUCTURAL TRANSFORMATIONS IN A MONOCRYSTAL $K_{0,940}Ag_{0,060}NO_3$

N.M. NAMAZOVA, V.I. NASIROV
Azerbaijan State Pedagogical University
Az-1000, Uzeyir Hajibeyov 68
E-mail: natella.namazova.adpu@gmail.ru

Radiation of structural transformations in alkali metal nitrates has of great practical importance. This process is closely related to the technology of obtaining monocrystals of solid solutions with polymorphism.

Keywords. Polymorphism, monocrystal, modification, hexagonal, structural transformations
PACS: 61.50.Ks

In addition, these compounds are used in pyrotechnics, explosives technology, medicine, and also in the electro-vacuum industry [1].

Numerous works have been devoted to the study of the mechanism of polymorphic transformations in alkali metal nitrates [2-5]. To clarify the effects of partial replacement of K^+ ions with Cs^+ , Rb^+ , Ag^+ ions on the mechanism of polymorphic transformation, we planned and conducted certain experimental works [6,7].

To clarify the mechanism of structural transformations, measuring the rate of crystal growth during polymorphic transformations as a function of temperature is of great importance. In this work, we measured the growth rate of crystal II (orthorhombic modification) modification into hexagonal III modification in the $K_{0,940}Ag_{0,060}NO_3$ monocrystal. The measurements were carried out according to the method proposed in [8].

The conditions under which crystal growth occurs in the solid phase are fundamentally different from those for the growth of crystals from a solution, melt, or vapor. In this case, the edges of the growing crystal do not collide with free atoms and molecules, but must capture particles from the adjacent layers of the surrounding matrix, which has a crystalline structure, in which each of the atoms or molecules occupies a very specific position. As a result, crystal growth occurs due to the constant movement of the boundary between two non-conjugated lattice regions. The moving layer for such movement helps to reduce the surface free energy. The experimental data obtained from 6 crystals were processed using the MATLAB program, which gives a functional dependence of the growth rate of the III-hexagonal phase on temperature during the II→III transformation in the form

$$v = (0,2815\Delta T + 0,4484\Delta T^2 + 0,0081\Delta T^3) \cdot 10^2 \frac{cm}{s}$$

Where $\Delta T = T_{tr} - T_0$, T_{tr} is the transformation temperature, T_0 is the phase equilibrium temperature. Figure 1 shows a graph of the growth rate of the new phase as a function of temperature, constructed from experimental data and data obtained by the experimental formula.

The conducted experiments show that two groups of surface defects should be distinguished. When a new phase grows with a clear linear boundary, only a relatively small number of localized disturbances are observed, the impact on growth may

remain the same over time. Minor disturbances to this thin structure result in minor changes in growth rate.

During repeated transformation, the accumulation of voltage and deformation bends the linear phase boundary. Depending on the nature of the counter defect, the movement of the phase boundary may even stop. There have also been cases where a visible curvature of the phase interface occurs and more and more new nuclei are formed in front of it, as a result of which the growth rate of the crystal increases.

- | | |
|---|---|
| <p>[1] P.U. Sastry, P.S. R Krishna., L. Pakicer. Shinde A.B., I. Phys Indian Acad. Sci, 2008, v.71, p.929</p> <p>[2] Yu.G. Asadov, V.I. Nasirov. Crystallography, 1972, v. 17., p. 991</p> <p>[3] Yu.G. Asadov, V.I. Nasirov, G.A. Jabrailova. J. Cryst Growth. 1972, v. 15, p. 45</p> <p>[4] J.K. Nimmo, B.W. Lukas. Acta Cryst B 1976, V. 32. p. 1968</p> | <p>[5] M. Shamsuzzova, B.W. Lukas, J. Cavad. Chem. 1988, v.66, p.819</p> <p>[6] V.I. Nasirov, R.B. Bairamov, I. Amirasanov. Cryst. Reports 2018, v. 63, p.1143</p> <p>[7] V.I. Nasirov, R. Bairamov, E.V. Nasirov. J Phys. Baku Eng. Inst. 2017, v. 1, p. 186</p> <p>[8] V.I. Nasirov. Polymorphism in optically transparent crystals Baku, 1997, 165 pp.</p> |
|---|---|

A COMPARISON OF BASIC ELECTRICAL PARAMETERS OF THE Al/SiO₂/p-Si (MIS) STRUCTURE OBTAINED BY THERMIONIC EMISSION (TE), AND CHEUNG FUNCTIONS

I.M. AFANDIYEVA, E.R. BAKHTIYARLI
Baku State University, AZ1148, Baku, Azerbaijan

In the present paper electrical characteristics of Al/SiO₂/p-Si MIS structure was measured in the range of voltage $\pm 4V$. Silicon layer SiO₂ on the semiconductor wafer was obtained by thermal oxidation of Si. The Al/SiO₂/p-Si (MIS) structures were constructed on p-type (boron-doped) single-crystal silicon wafers with a (100) surface orientation. The thickness of wafer is 350 μm , a diameter of 2 inches, and a resistivity of 1 $\Omega \cdot cm$. The thickness of SiO₂ layer in the MIS structure is 60 nm. On the basis of measured characteristics have been obtained basic parameters of structure such as potential barrier height (ϕ_{B0}), ideality factor (n) and series-resistance (R_s). For the calculating of parameters have been used two methods - thermionic-emission (TE) theory and Cheung's functions. The results obtained by both methods were compared. The identified differences are due to the presence of inhomogeneities at the interface and in the volume.

Keywords: Schottky diode; Thermionic emission; Cheung's functions; Surface state density, Metal- insulator- semiconductors (MIS); SiO₂

PACS:73.30+y, 73.20.At, 73.40.Ns

INTRODUCTION

The functioning of most modern electronic devices relies on a metal-semiconductor contact structure featuring a Schottky barrier (SB). Schottky diodes operate quickly because they eliminate diffuse and recombination processes that require additional time and the injection of minority charge carriers [1-3]. More than 99% of all semiconductor devices are made using silicon (Si). Silicon is widespread in nature and its processing technology has been well studied.

A silicon dioxide layer is easily created in silicon by conventional thermal oxidation. The thickness of this dielectric is usually 0.3-1.5 microns. But this layer is enough to protect silicon from the diffusion of impurities and provide better dielectric protection. In this regard, the growth of the oxide layer on the semiconductor is a more important step in the production process of MIS or MOS devices [2-4]. The generalized model of the contact structure takes into account the presence of a dielectric gap. It should be noted that the presence of a dielectric gap in the metal-oxide-semiconductor contact structure affects the distribution, concentration and activation of surface states, as well as the charge transfer mechanism [1-12]. The most common MOS (metal oxide semiconductor) structures on silicon with a layer of SiO₂, which is obtained by thermal oxidation of Si. Thermal silicon oxide SiO₂ is a key dielectric in silicon devices. As it is known from the scientific literature, to create a perfect interface, a layer of SiO₂ with a thickness ≈ 5 Å is grown on silicon, and then a layer of high-k dielectric with a thickness of ≈ 50 Å is deposited [4,12].

The electronic structure of SiO₂ has been intensively studied experimentally and theoretically for many years [13-15]. Despite this, some features of the electronic structure of SiO₂ have remained unclear over the past 50 years. In connection with the use of SiO₂ and contact structures with a dielectric gap in

microelectronics, the study of MOS structures with a thin layer of Silicon Oxide is of practical interest.

In order to study the influence of surface states on the characteristics of the contact structure, the characteristics of MIS structures with various interfacial layers, such as SiO₂, SnO₂, Al₂O₃, ZrO₂, HfO₂ and organic layers, were investigated and analyzed [16-19].

In recent years, many studies have been carried out on the main parameters characterizing the processes at the interface between Si and thermally grown SiO₂. [12,20-22]. However, the mechanisms of current flow, key parameters of these structures, and their dependence on factors such as oxide layer thickness, the selection of contacting metal and semiconductor, as well as the impact of the manufacturing process, have yet to be thoroughly clarified. As is known from scientific literature the insulator thickness in these studies was in the range of 40-60 Å, 50-826 Å. In the presented article, the thickness of SiO₂ in the MIS structure is 60 nm. It is known that the dependence of the characteristics of a contact structure on frequency is determined by various processes: the inertia of the passage of charge carriers through the space charge region of the semiconductor (1E-11 sec ÷ 1E-13 sec), recharging of surface electronic states (1E-6 sec) and inertia associated with circuit reasons (1E-8 sec) [1-3]. In this regard, preference was given to the study of electrical parameters of Al/SiO₂/p-Si from measurements of the static current-voltage characteristic. Thus, the purpose of the presented article is to study the main parameters of the Al/SiO₂/p-Si MIS structure (thickness of the dielectric gap of thermal SiO₂ is 60nm) using current-voltage characteristics measured at T=300K.

The Al/SiO₂/p-Si (MIS) structures were constructed on p-type (boron-doped) single-crystal silicon wafers with a (100) surface orientation. These wafers had a thickness of 350 μm , a diameter of 2

inches, and a resistivity of 1 Ω.cm. Initially, the wafers were degreased using organic solvents and then rinsed in de-ionized water with a resistivity of 18 MΩ.cm for 10 minutes. Oxide layers, 60 nm thick, were grown at 750°C for 1.5 hours and 900°C for 4 hours, respectively. After the oxidation step, circular aluminum dots with a purity of 99.999%, a diameter of 1.2 mm, and a thickness of about 2000 Å were deposited as rectifying contacts on the oxidized surface, using a Si shadow mask in a vacuum system with a liquid nitrogen trap, maintaining a pressure of ~1E-7 Torr. Following this, aluminum with a thickness of ~2000 Å was thermally evaporated onto the entire back side of the wafer, after the oxide layer (SiO₂) had been etched away using HF, to create ohmic/back contacts. The thickness of the metal layers and their deposition rates were measured using a quartz crystal thickness monitor. Finally, I–V measurements were carried out at room temperature using a Keithley 2400 I–V source meter.

RESULTS AND DISCUSSIONS

Figure 1 presents the typical forward and reverse-bias semilogarithmic I–V characteristics of the Al/SiO₂/p-Si MIS structure measured at room temperature. As depicted in the figure, the semilogarithmic I–V plot demonstrates clear rectifying behavior, with an exponential increase in forward

current (IF) and a weak voltage dependence in the reverse current (IR). The rectification ratio (RR) for this structure is calculated as $RR = I_f/I_r = 3.88$. It is noticeable that the reverse current gradually increases with applied reverse bias, without showing any signs of saturation. This slight non-saturation or ‘soft’ behavior observed in the reverse-bias region of the experimental I–V plot may be attributed to spatial inhomogeneity within the contact structure [12, 23, 24]. In the case of inhomogeneous Schottky barrier (SB) contacts, the reverse current is likely dominated by current flowing through regions with lower Schottky barrier height (SBH).

For forward bias conditions ($V \geq 3kT/q$), the current through the SB can be described by the thermionic emission (TE) theory, is given by

$$I = I_0 \exp\left(\frac{q(V - IR_s)}{nkT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{q(V - IR_s)}{kT}\right)\right] \quad (1)$$

where I_0 is the reverse saturation current, where q is the electronic charge, A^* is the effective Richardson constant and is equal to $120A \text{ cm}^{-2}\text{K}^2$ for p-type Si, A is the effective diode area, k is the Boltzmann constant, T is the absolute temperature in K, ϕ_{B0} is the zero-bias barrier height and n is the ideality factor .

The reverse saturation current can be described as

$$I_0 = AA^*T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{B0}}{kT}\right) \quad (2)$$

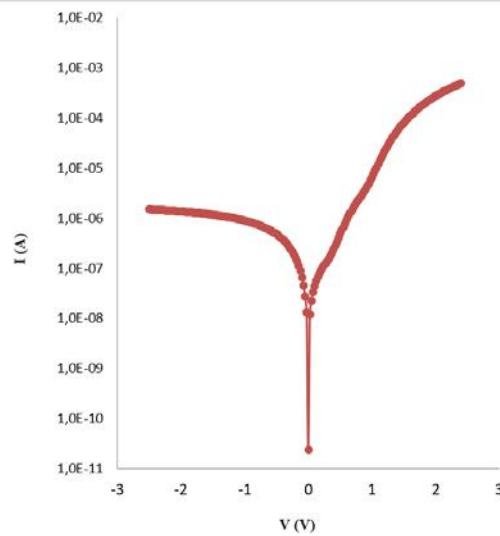


Fig.1. Semilogarithmic I–V plots for Al/SiO₂/p-Si MIS structure.

Once the applied voltage exceeds $3kT/q$, the primary electrical properties of these Schottky diodes (SDs) can be extracted from the linear region using thermionic emission (TE) theory, as depicted in Figure 2 [1, 3, 11, 13]. The forward-bias $\ln(I)$ – V plots for the fabricated Al/SiO₂/p-Si MIS structure, shown in Figure 2, exhibit strong rectifying behavior, where the current rises almost exponentially with increasing voltage at moderate voltage levels. The ideality factor, which provides insight into the diode's performance, is calculated from the slope of the linear region in the

forward-bias $\ln(I)$ – V plot. According to equation (1), it can be expressed as follows:

$$n = \frac{q}{kT} \left(\frac{d(V - IR_s)}{d(\ln I)}\right) \quad (3)$$

The zero-bias barrier height ϕ_{B0} determined from the extrapolated I_0 and is given by

$$\phi_{B0} = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{AA^*T^2}{I_s}\right) \quad (4)$$

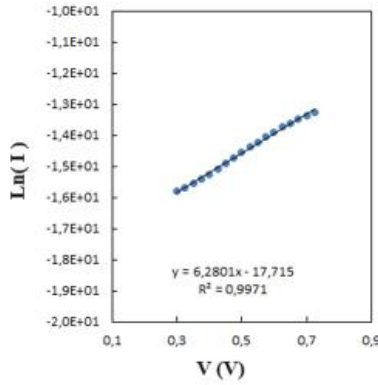


Fig. 2 Semilogarithmic ln(I)-V plots of Al/SiO₂/p-Si MIS structure.

The values of the ideality factor (n) and saturation current (I_s) for the Al/SiO₂/p-Si MIS structure were determined from the slope and intercept of the ln(I) vs. V graph (Fig. 2b). Using the calculated I_s and the diode area (A), the barrier height (Φ_{B0}) was then computed according to Eq. 4. The potential barrier height (Φ_{B0}) and ideality factor (n) for the Al/SiO₂/p-Si MIS structure were found to be 0.75 eV and 5.24, respectively, while the saturation current (I₀) was calculated as 2.025E-8 A. The electrical characteristics of the structure are influenced by both the series resistance (R_s) and shunt resistance (R_{sh}). These values were calculated based on the basic application of Ohm's law (R_i = dV/dI) at both reverse and forward biases, as illustrated in Figure 3. The extracted values for R_{sh} and R_s were 2.15 MΩ and 5.13 kΩ, respectively.

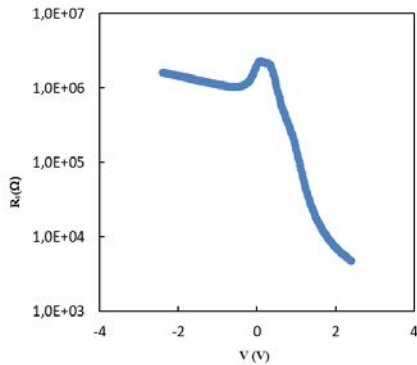


Fig. 3. The voltage dependent profile of resistance (R_i) plot for Al/SiO₂/p-Si contact structure.

To investigate more clear electrical properties, electrical parameters (n, I₀, Φ_B) were extracted from following Cheung's methods Eq. 2(a-b) [25]:

$$\frac{dV}{d(\ln I)} = IR_s + \frac{nkT}{q} \quad (2a)$$

$$H(I) = V - \frac{nkT}{q} \ln\left(\frac{I}{AA^*T^2}\right) = IR_s + n\phi_B \quad (2b)$$

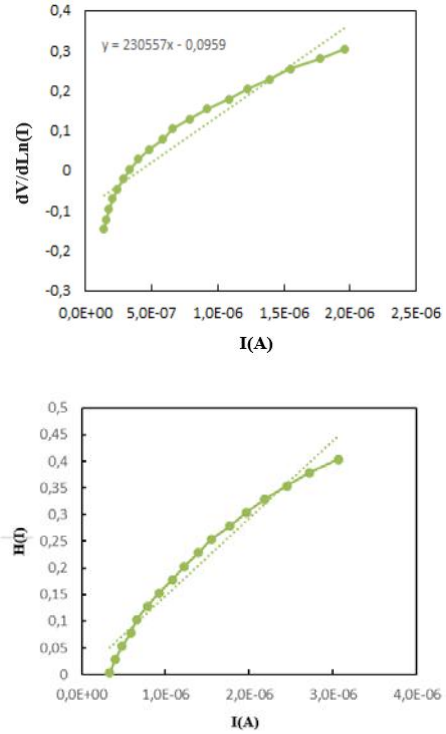


Fig 4. a) dV/dln(I) – I and b) H(I)-I plots for

From these functions, the series resistance (R_s) and ideality factor (n) can be derived from the slope and intercept of the dV/dln(I) vs. I plot. Similarly, R_s and the barrier height (Φ_{B0}) can be obtained from the slope and intercept of the H(I) vs. I plot. Figure 4a and 4b illustrate both the dV/dln(I) vs. I and H(I) vs. I graph, respectively, providing a visual representation of these relationships. Barrier height, ideality factor and series resistance shown in Table 1.

Table 1.

Basic electrical parameters of Al/SiO₂/p-Si MIS structure

parameters	From Thermionic Emission Theory	Cheung's functions (dV/d(lnI)-I)	Cheung's functions (H(I)-I)
Φ _{B0} (eV)	0.75	0.672	0.697
n	5.24	6.43	7.43
R _s (kΩ)	5.13	7.21	7.84

As observed from the results, discrepancies exist in the parameter values calculated using different methods. These differences can be attributed to factors

such as the presence of surface states, local inhomogeneities both in the bulk and on the contact surface, and the mismatch of crystal lattice parameters

between contacting materials. These factors introduce some distortion in the accurate determination of the main parameters. Consequently, the values obtained for the primary parameters of the Al/SiO₂/p-Si MIS structure should be considered effective values rather than exact ones.

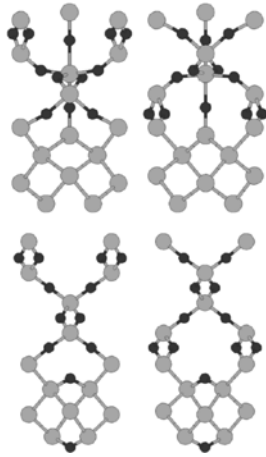


Fig. 5. xz - (a, c) and yz -projections of the relaxed structure of the Si/SiO₂ superlattice for various models.

It is widely understood that the main characteristics of the electronic structure are primarily governed by the types of atoms involved in forming chemical bonds [26,27]. Studies on the equilibrium structure of Si/SiO₂ superlattices reveal that structural

optimization leads to significant atomic rearrangement from the original lattice models due to atom redistribution near the interfaces. Figure.5 illustrates two initial model structures that, after relaxation, produce distinct interface structures, which are likely to result in variations in their physical properties. Furthermore, research indicates that the thickness of both Si and SiO₂ layers can impact not only the vibrational properties of the superlattices but also the atomic structure at the interfaces.

CONCLUSION

The parameters of the Al/SiO₂/p-Si MIS structure were analyzed based on I-V measurements. The key parameters were calculated using two different methods: thermionic emission (TE) theory and the Cheng method. Upon analyzing and comparing the values of parameters such as the barrier height (Φ_B), ideality factor (n) and the series resistance (R_s) obtained through these methods, only minor differences were observed. These deviations from ideal values are primarily due to the presence of inhomogeneities at the interface between the contacting materials. Both calculation methods are limited in their ability to accurately account for lattice mismatches, surface and bulk inhomogeneities, and the imperfections that can arise spontaneously during the fabrication process. As a result, these methods cannot fully capture the complexities of the material structure, leading to slight discrepancies in the calculated parameter values.

-
- [1] S.M. Sze. Physics of Semiconductor Devices, second ed., Wiley, New York, 1981.
 - [2] V.I. Strikha. Theoretical bases of metal–semiconductor contact’s work. Kiev: Naukova Dumka; 1974 [in Russian].
 - [3] E.H. Rhoderich. Metal–semiconductor contacts. Moscow: Radio I svyaz; 1982 [in Russian]. R. Castagne, A. Vapaille, Surface Science 28(1), 157 (1971).
 - [4] J.M. Poate, K.N. Tu, J.W. Mayer. Thin films – interdiffusion and reactions. Moskow: Mir; 1982 [in Russian].
 - [5] E.V. Buzanyova. Microstructures of integrated electronics. Moscow, Radio i Svyaz, 1990.
 - [6] U. Kelberlau, R. Kassing. Solid-State Electron. 24, 321 (1981).
 - [7] N. Konofaos, E.K., Evangelou, Zhongchun Wang, V. Kugler, U. Helmerson. Journal of Non Crystalline Solids. 303, 185 (2002).
 - [8] E.J. Miller, X.Z. Dang, H.H. Wieder, P.M. Asbeck, E.T. Yu, G.J. Sullivan, J.M. Redwing. J. Appl. Phys., 87(11), 8070 (2000).
 - [9] Ş. Altındal, H. Kanbur, İ.Yücedağ, A. Tataroğlu. Microelect. Eng. 85, 1495 (2008).
 - [10] A. Tataroğlu, Ş Altındal. Microelect. Eng.85, 2256 (2008).
 - [11] M. Kuhn. Solid State Electron. 13(6), 873 (1970).
 - [12] Ş. Altındal, Y. Şafak Asar, A. Kaya, Z. Sönmez. Investigation of interface states in Al/SiO₂/p-Si (MIS) structures with 50 and 826 Å SiO₂ interfacial layer using admittance spectroscopy method/Journ. of optoelectronics and advanced materials, vol. 14, № 11- 12, 2012, p. 998 – 1004.
 - [13] E.H. Nicollian, J.R. Brews. MOS (metal/oxide/semiconductor) Physics and Technology, John Wiley & Sons, New York (1982).
 - [14] A. Tataroğlu, Ş Altındal. Microelect. Eng. 85, 2256 (2008).
 - [15] W. Mönch. Semiconductor Surfaces and Interfaces, third ed. Springer Verlag Pres, 2001.
 - [16] M. Çakar, A. Türüt. Synthetic Metals, 13, 549 (2003).
 - [17] Y. Çağlar, M. Çağlar, S. Ilican, F. Yakuphanoğlu. Microelect. Eng., 86, 2072 (2009).
 - [18] L. Truong, Y. G. Fedorenko, V.V. Afanasev, A. Stesmans. Microelectronics Reliability, 45, 823 (2005).
 - [19] A. Tataroğlu. J. Optoelectron. Adv. Mater.13(8), 940 (2011).
 - [20] E.H. Nicollian, A. Goetzberger. Bell Syst.Tech. J. 46, 1055 (1967).
 - [21] K.K. Hung, Y.C. Cheng. Appl. Surf. Sci., 30, 114 (1987).
 - [22] E.H. Nicollian, A. Goetzberger, A.D. Lopez. Solid-State Electron. 12, 937 (1969).
 - [23] C.N. Berglund. IEEE Trans. Nucl. Sci. ED-13(10), 701 (1966).

- [24] A. Tataroğlu, Ş. Altındal, M.M. Bülbül. Microelect. Eng. 81, 140 (2005).
- [25] S.K. Cheung, N.W. Cheung. 1998. Extraction of Schottky diode parameters from forward current-voltage characteristics. Applied Physics Letters, 49, 85.
- [26] P.M.X. Исхакзай, В.Н. Кручинин, В.Ш. Алиев, В.А. Гриценко, Е.В. Дементьева, М.В. Заморянская. Транспорт заряда в нестехиометрическом SiO_x, полученном обработкой термического SiO₂ в водородной плазме электронно-циклотронного резонанса. Микроэлектроника, 2022, Т. 51, № 1, стр. 28.
- [27] С.С. Некрашевич, В.А. Гриценко. Электронная структура оксида кремния (Обзор) Физика твердого тела, 2014, том 56, вып. 2, с.209-223.

MÜNDƏRİCAT

1. Bioloji mayelərin induktiv əlaqəli plazma kütlə spektrometri vasitəsilə analizi zamanı meydana çıxan matris effektləri
N.Ş. Cəfər 3
2. Maqnetron tozlandırılması metodu ilə çökdürülmüş ZnO:Al təbəqələrinin elektrik və optik xassələrinə termik işlənmə temperaturunun və rütubətin təsiri
Ç.E. Səbzəliyeva, N.N. Mursakulov, N.N. Abdulzadə 9
3. Qamma şüalanmış YSPE/GaAs və YSPE/GaAs<Te> kompozitlərin quruluşu
N.N. Hacıyeva, G.B. Əhmədova, R.A. Məmmədov 13
4. Optik peyk sistemlərinin global iqlim dəyişikliyinə rolu
E.Ö. Mansurova 15
5. Pambıq çiyidlərinin impulsu elektrik qaz boşalması ilə əkinqabağı emalının ekoloji cəhətdən təmiz, qənaətcil və səmərəli üsulunun işlənilib hazırlanması
F.Ş. Cəfərova, Z.A. Tağıyeva, S.A. Hüseynova, S.S. Əhədova, V.M. Hacıyeva 18
6. Aşağıölçülü sistemlərdə yükdaşıyıcıların səpilməsi və işığın udulması
H.B. İbrahimov, R.Z. İbayeva 24
7. CVD ZnSe polikristallarının elektrofiziki xassələrinin impedans spektroskopiyası
C.İ. Hüseynov, H.A. Aslanov, G.Ə. Qaraşova, İ.İ. Abbasov 30
8. $K_{1-x}Na_xNO_3$ ($x=0.035, 0.045$) kristallarında polimorf çevrilmələr
A.F. Kazımova, V.İ. Nəsirov 34
9. Kleyn-Fok-Qordon tənliyinin Hülten və Yukava sinif potensialların xətti kombinasiyası üçün analitik həlli
M.V. Qocayeva 37
10. Elektron materialşünaslığında yeni tendensiyalar
Vüqar Əmir oğlu Əliyev 45
11. $In_{1-x}Er_xSe$ ($x=0; 0,0001; 0,0003; 0,0005; 0,0007$) $In_{1-x}Sm_xSe$ ($x=0; 0,01; 0,03; 0,05; 0,07$) kristallarının elektrik xassələrinin tərkibdən asılılığı
P.H. İsmayılova, A.Ə. İsmayılov, Ə.Ə. İsmayılov, X.Ş. Vəlibəyov 47
12. Keçid metalı Ni ilə aşqarlanmış TlGaS₂ monokristallarının optik xassələri
P.H. İsmayılova, N.Z. Həsənov, A.Ə. Hacıyeva, M.C. Nəcəfzadə 50
13. Perovskitəbənzər layli Nd₂Ti₂O₇ birləşməsində yüksək təzyiqlərdə vibrasiya modalarının tədqiqi
A.G. Asadov, A.İ. Məmmədov, D.P. Kozlenko, S.E. Kiçanov, R.Z. Mehdiyeva, E.V. Lukin, O.N. Lis, R.E. Hüseynov, E.R. Hüseynova, X.İ. Əhmədov 53

14. As-Se, As-Se-S, As-Se-Te xalkogenid şüşəvari sistemlərində optik udulmanın tədqiqi S.İ. Mehdiyeva, A.İ. İsayev, A.Z. Abasova, R.İ. Ələkbərov	58
15. CdGa ₂ Te ₄ kristalının dinamik xassələrinin ab-initio tədqiqi Z.A. Cahangirli, B.Q. Mehdiyev, R.G. Seyidov, T.O. Bayramova	64
16. Ehtimal və L. Zadəninin qeyri-səlis çoxluqlar nəzəriyyələrinin müqayisəsi E.A. İsayeva	67
17. Boşluqda yayılan dalğa enerjisinin udulması E.R. Həsənov, Ş.G. Xəlilova, R.K. Mustafayeva	72
18. Maqnetron çökdürülmə üsulu ilə alınmış indium qalay oksid (ITO) təbəqəsinin elektrofiziki və optik xassələri Ə.Ə. Rəcəbli	75

CONTENTS

1. Effective role of volumetric collisions in breakdown at atmospheric pressure in semiconductor gas discharge system
E. Koç, M.M. Shirinov and B.G. Salamov 3
2. High pressure effect on 3D topologically nontrivial systems with magnetic impurities
I.K. Kamilov, L.A. Saypulaeva, N.V. Melnikova, A.I. Ril, S.F. Marenkin, Sh.M. Aliyev 7
3. Determination of the magnetic anisotropy constant in microparticles of powder-based permanent magnets by Mössbauer spectroscopy
Sh.M. Aliyev, Zh.G. Ibaev 14
4. Thermoelectrical properties of Mn-doped n-Cd₃As₂
I.K. Kamilov, L.A. Saipulaeva, N.V. Melnikova, A.I. Ril, S.F. Marenkin 17
5. Elastic properties of Ni-Cu-Zn ferrite nanopowders
I.F. Yusibova, Sh.N. Aliyeva 24
6. Phase transitions and thermophysical properties of Ni_{50.2}Mn_{39.8}In₁₀ Geissler alloy
I.K. Kamilov, A.B. Batdalov, L.N. Khanov, A.A. Mukhuchev, A.V. Mashirov, A.M. Aliyev 27
7. Gamma-resonance studies of rocks near the east (Kingdom Saudi Arabia, Turkey)
Magomed Magomedovich Guseynov, Ibragimkhan Kamilovich Kamilov 32
8. Study of the response of semiconductor structures to external perturbations
Ibragimkhan K. Kamilov, Naida S. Abakarova 37
9. Transport phenomena and dielectric properties of multicomponent (TiGaSe₂)_{1-x}(TiGaS₂)_x ($x = 0 - 1.0$)
S.N. Mustafaeva, S.M. Asadov 40
10. Dielectric and transport properties of (TlInS₂)_{1-x}(TiGaSe₂)_x in alternating electric fields
S.N. Mustafaeva, S.M. Asadov, M.M. Godjaev 43
11. Electrical properties of solid solutions of the Sb₂Te₃-Bi₂Te₃ system doped with gadolinium impurity
M.M. Tagiyev, R.Y. Aliyev, A.M. Mammadzadeh, Kh.F. Aliyeva, K.I. Magerramova 46
12. Formation of TiGaSe₂ amorphous films under the effect of Ge atoms
E.Sh. Alekperov, G.B. Ibragimov, A.M. Nazarov, A.M. Narimanzade 50
13. Synthesis methods of carbon nanotubes (review article)
A.M. Aliyeva 53

14. The influence of structural defects on the electronic and adhesive processes at the interface of the $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ solid solution with contact alloys
M.M. Tagiyev, G.D. Abdinova, I.A. Abdullaeva, Kh.F. Alieva, T.I. Pirieva 60
15. Influence of copper and selenium atoms on the crystal structure of $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$ with partial replacement of gallium and sulfur atoms by copper and selenium atoms
M.G. Kyazumov 64
16. Sonochemical synthesis and characterization of nanosized copper aluminate spinel
N. Musayeva, H. Khalilova, I. Amiraslanov, B. Izzatov, M. Alizada 67
17. Features of transmission spectra of GaSe thin films and nanoparticles synthesized by laser ablation
V.M. Salmanov, A.G. Huseynov, G.B. Ibragimov, R.M. Mamedov, T.A. Mamedova, F.Sh. Akhmedova 71
18. Dielectric relaxation of the absorption spectrum in chlorobenzene – benzene and chlorobenzene – hexane solutions
Samir Azizov 74
19. Temperature dependence of the kinetic coefficients of bismuth rich semimetallic Bi-Sb alloys
A.A. Musayev, E.R. Yuzbashov 78
20. Thermodynamic properties of biofuel components
L.A. Akhmedova-Azizova, I.M. Abdulagatov, M.A. Mammedova, G.N. Najafov, M.A. Talybov 85
21. Kinetics of structural transformations in a monocrystal $K_{0.940}\text{Ag}_{0.060}\text{NO}_3$
N.M. Namazova, V.I. Nasirov 90
22. A comparison of basic electrical parameters of the Al/SiO₂/p-Si (MIS) structure obtained by thermionic emission (TE), and Cheung functions
I.M. Afandiyeva, E.R. Bakhtiyarli 91



www.physics.gov.az