

RbNO₃ KRİSTALLARINDA ATOM DİNAMİKASININ RAMAN SPEKTROSKOPİYASI METODU İLƏ TƏYİNİ

A.F. KAZIMOVA¹, V.İ. NƏSİROV²

¹Elm və Təhsil Nazirliyi H.M.Abdullayev adına Fizika İnstitutu,
Az-1143, Bakı, H.Cavid prospekti 131

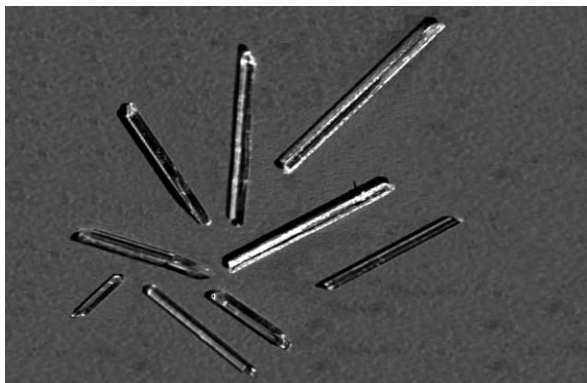
²Azərbaycan Ali Hərbi Dənizçilik məktəbi
E-mail: aygun-kazimova-1981@mail.ru

Təqdim olunmuş işdə RbNO₃ və onun bərk məhlul kristallarında rentgenoqrafik üsulla quruluş faza keçidləri öyrənilmiş, bununla yanaşı tədqiqatlarımızı daha da zənginləşdirmək məqsədi ilə Raman spektroskopiyası üsulu vasitəsilə kristalların atom dinamikası öyrənilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, $\nu_1 = 106 \text{ sm}^{-1}$, $\nu_2 = 64 \text{ sm}^{-1}$, $\nu_3 = 724 \text{ sm}^{-1}$, $\nu_4 = 1369 \text{ sm}^{-1}$ tezliklərdə spektrdə maksimumlar alınır. Raman spektroskopiyası üsulu ilə alınmış nəticələr və müqayisə olunan ədəbiyyat materialları onu deməyə əsas verir ki, müxtəlif tezliklərdə təyin olunan maksimumlar qələvi metal nitratlara və onların bərk məhlul kristallarına xas olan xüsusiyyətdir.

Açar sözlər: polimorf çevrilmə, rentgenoqrafik, modifikasiya, izotermik, Raman spektroskopiyası
PACS: 61.50.Ks

Ədəbiyyat məlumatlarına [1-4] əsasən demək olar ki, RbNO₃ kristallarında müxtəlif temperaturalarda morfoloji və rentgenoqrafik üsullarla tədqiqatlar aparılmış və maraqlı nəticələr alınmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, RbNO₃ otaq temperaturundan ərimə temperaturuna kimi dörd polimorf modifikasiyaya malikdir.

Tədqiq olunan kristallar “XЧ” markalı RbNO₃-ün suda məhlulundan izotermik kristallaşma, yəni həlledicinin sabit temperaturda buxarlandırılması yolu ilə alınmışdır. Həmin üsulu tətbiq etməklə müxtəlif ölçülü lövhəvari və böyüməsi [001] kristalların *c* oxu istiqamətində olan iynəvari kristallar alınmışdır. Tədqiqat aparmaq üçün 1×0,5×15mm ölçülü prizmatik kristallardan istifadə olunmuşdur. Şəkil 1-də tədqiq olunan məhlul kristallarından *x*=0.05 at.%-ə uyğun olanlar göstərilmişdir. Aparılmış tədqiqatlar nəticəsində RbNO₃ və onun bərk məhlul kristallarının morfolojiyası öyrənilmişdir [5-8]. Ədəbiyyat materialları ilə yanaşı, tədqiqatlarımızın nüfuzunu artırmaq məqsədi ilə RbNO₃ və onun bərk məhlul kristallarında quruluş faza keçidləri rentgenoqrafik üsulla da tədqiq edilmişdir. Müəyyən olunmuş tədqiqat üçün monokristallar alınmış və onların monokristallığı rentgenoqrafik olaraq sübut olunmuşdur. Tədqiqatın bu hissəsi “Bruker” firmasının D8 ADVANCE markalı ovuntu rentgendifraktometrində aparıldığından aldığımız monokristallar ovuntu şəklinə salınmışdır.



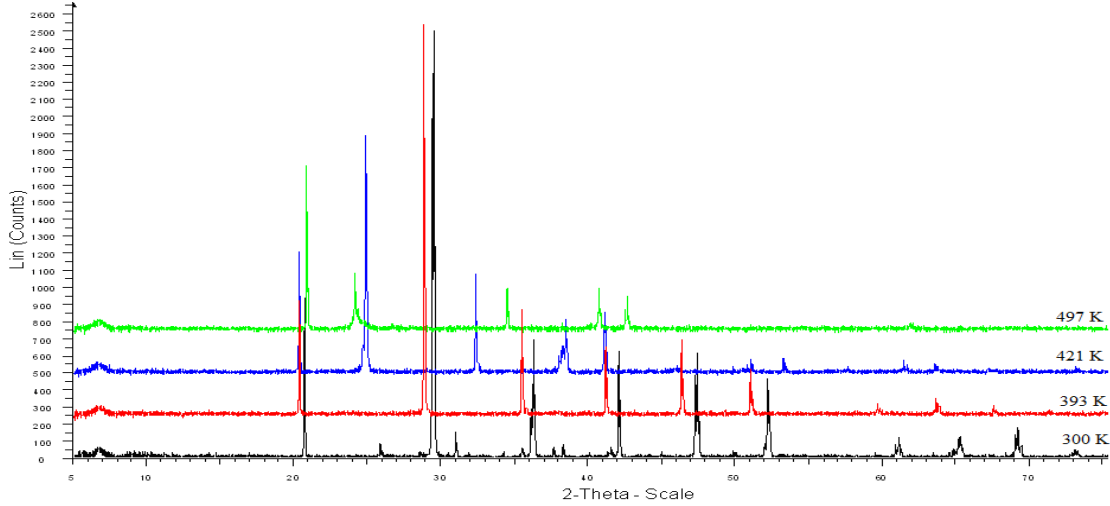
Şəkil 1. RbNO₃ monokristallarının vizual görünüşü.

Tədqiqatlar difraktometrin 40kV, 40mA, CuK_α($\lambda=1.54051\text{Å}$) şüalanma rejimində 300K<T<723K temperatur intervalında işləyən TTK450 yüksək temperatur kamerasında aparılmışdır. Tədqiqatın nəticələri cədvəl 1-də verilmişdir. RbNO₃ birləşməsinin kristalları üçün alınan nəticələr ədəbiyyat materialları ilə müqayisə edilmiş və müəyyən edilmişdir ki, ana kristal olan üçün alınan kristalloqrafik nəticələr ədəbiyyat materiallarından fərqlənir [9-10].

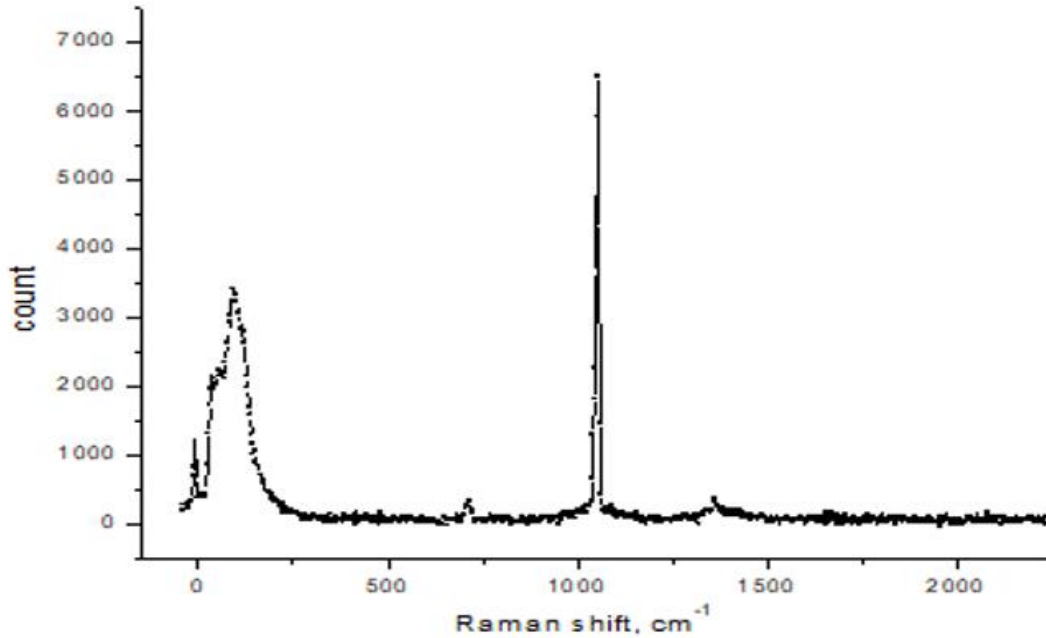
RbNO₃ və onun bərk məhlul kristallarında quruluş faza keçidlərinin xarakterini həm mikroskopik, həm də rentgenoqrafik üsulla müəyyən etdikdən sonra quruluş faza keçidlərinin mötəbərliyini artırmaq məqsədi ilə Raman spektroskopiyası üsulundan da istifadə edilmişdir. Bərk cisimlərin atom dinamikasını təcrübi metodlarla, Raman spektroskopiyası və infraqırmızı spektroskopiyaya ilə tədqiq etmək mümkündür. Bu metodlar arasında ən geniş istifadə ediləni Raman spektroskopiyası metodudur. FT-IR texnologiyasının tamamlayıcısı olan Raman Spektroskopiyası-kimyəvi maddə molekullarının qarşılıqlı hərəkətinin düşən lazer şüalarını müxtəlif tezlikdə yaymasını qeyd edərək, naməlum kimyəvi maddələri təyin edən bir texnikadır. Hər bir metoddə olduğu kimi, Raman spektroskopiyası metodunda da üstün və çatışmayan cəhətləri vardır. Bu metodun əsas üstünlüyü ondan ibarətdir ki, tədqiqat obyektinin formasından (monokristal, polikristal, bərk, maye və s.) asılı olmayaraq normal şəraitdə, temperatur və təzyiqin təsiri ilə atom dinamikasını və quruluş faza keçidlərini tədqiq etməyə imkan verir. Çatışmayan cəhət ondan ibarətdir ki, Raman spektri ilə kristal quruluşda mövcud olan bütün rəqsləri müşahidə etmək mümkün olmur. Kristal quruluşun simmetriyası yüksəldikcə müşahidə edilən maksimumların sayı da azalır. Bu metodun əsas üstünlüklərindən biri də odur ki, tədqiqat obyektinin formasından asılı olmayaraq həm kristal, həm ovuntu halında obyektləri, hətta mayeləri də tədqiq etmək mümkündür. Bizim apardığımız metod tədqiqat obyektinin kristal halıdır.

RbNO₃-də polimorf modifikasiyaların qəfəs parametrləri və onların mövcudolma temperatur intervalı

Maddə	Modifikasiya	Simmetriya	Qəfəs parametrləri			Fəza qrupu	Mövcudolma temperatur intervalı, K
			a, Å	b, Å	c, Å		
RbNO ₃	I	Kubik	7,37			Fm3m	564-587
	II	Tetraqonal	3,94		8,76	I4	492-564
	III	Kubik	4,37			Pm3m	437-492
	IV	Romboedrik	10,48		7,45	P31	aşağı 437



Şəkil 2. RbNO₃ kristalında müxtəlif temperaturlarda difraksiya mənzərəsi.



Şəkil 3. RbNO₃ kristalları üçün Raman spektri.

RbNO₃ kristallarının atom dinamikası Raman spektroskopiyası metodu ilə otaq temperaturunda “Nanofinder 30” Raman spektrometrində 0–850 sm⁻¹ tezlik intervalında yerinə yetirilmişdir. Bu Raman spektrometrində həyəcanlandırma mənbəyi kimi λ=532nm, maksimal gücü 10mVt parametrlərə malik olan Nd:YAG lazerindən istifadə edilmişdir. Spektral

ayrıdetmə 0,5 sm⁻¹-dir. Tədqiq olunan kristalların Raman spektri şəkil 3-də verilmişdir.

RbNO₃ kristalları üçün onların atom dinamikasının nəzəri və təcrübi tədqiqatları aparılmamışdır. Ona görə də alınmış nəticələr qələvi metal nitratlarının bərk məhlulları üçün alınmış nəticələrlə müqayisə edilmişdir. RbNO₃ kristalları üçün alınmış Raman

spektrindəki maksimumlar analiz edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, $\nu_1=106 \text{ sm}^{-1}$, $\nu_2= 64\text{sm}^{-1}$, $\nu_3=724 \text{ sm}^{-1}$ $\nu_4=1369\text{sm}^{-1}$ tezliklərdə spektrdə maksimumlar verir. Raman spektroskopiyaya üsulu ilə alınmış nəticələr və müqayisə olunan ədəbiyyat materialları onu deməyə əsas verir ki, müxtəlif tezliklərdə təyin olunan

maximumlar qələvi metal nitratlara və onların bərk məhlul kristallarına xas olan xüsusiyyətdir. Aparılan təcrübi nəticələr qələvi metal nitratların bərk məhlul kristalları üçün alınmış ədəbiyyat məlumatları ilə uyğundur [7, 8].

- [1] *R.N. Brown, A.C. McLaren.* The thermal transformation in solid rubidium nitrate and tallium nitrate Acta Gryst., 15 p.977, 1962.
- [2] *R.N. Brown, A.C.Mclaren.* On the mechanism of the thermal transformation in solid rubidium. Proc. Roy. Sos. A266, p. 329, 1962.
- [3] *U.Korhonen.* On the crystal structure of the high temperature form of rubidium nitrate. Ann. Acad. Sci. Fennical., A1 p.37, 1951.
- [4] *J. Pohl, D. Pohl, G. Adiwidjaja.* Phase transition in RbNO₃ at 346K and structure at 296, 372, 413 and 437K. Acta.Cryst.,1992, B48, p.160-166.
- [5] *В.И. Насиров, А.Ф. Хазиева, Ю.Г. Асадов, А.С.Амиров, Ю.И.Алыев.* «Получение кристаллов Rb_{0.90}Cs_{0.10}NO₃ и их рентгенографические исследования». Кристаллография, 2012, Т.57, №6, с. 964-967.
- [6] *А.Ф. Хазиева, Ю.Г. Асадов, В.И. Насиров, Ю.И. Алыев., А.О. Даудемиров., С.Г. Джабаров.* Rb_{1-x}Cs_xNO₃(x=0,025;0,05;0,1) монокристаллы и их исследование методом высокотемпературной рентгенографии. Физика и техника полупроводников, 2018, том 52, вып.6, стр.565-571.
- [7] *Kangcheng Xu.* Raman spectroscopic studies of phase equilibria in binary monovalent metal nitrates. Bibliography, 1997, Canada, 238-246.
- [8] *Kangcheng Xu.* Application of Raman in phase equilibrium studies: the structures of substitutional solid solutions of KNO₃ by RbNO₃. Journal of Materials Science, 1999, v.34, pp. 3447-3453.

A.F. Kazymova, V.I. Nasirov

DETERMINATION OF ATOMIC DYNAMICS IN RbNO₃ CRYSTALS BY RAMAN SPECTROSCOPY

In the present work, the structural-phase transitions in RbNO₃ and its crystals of solid solutions were studied by the X-ray method, and to further enrich our studies, the atomic dynamics of the crystals was studied by the Raman spectroscopy method. It was established that the maxima in the spectrum were obtained at frequencies $\nu_1= 106 \text{ cm}^{-1}$, $\nu_2= 64 \text{ cm}^{-1}$, $\nu_3= 724 \text{ cm}^{-1}$, $\nu_4=1369 \text{ cm}^{-1}$. The results obtained by the method of Raman spectroscopy and comparable literature data indicate that the maxima determined at different frequencies are characteristic of alkali metal nitrates and their crystals of solid solutions.

А.Ф. Казымова, В.И. Насиров

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМНОЙ ДИНАМИКИ В КРИСТАЛЛАХ RbNO₃ МЕТОДОМ КОМБИНАЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

В представленной работе структурно-фазовые переходы в RbNO₃ и его кристаллах твердых растворов изучались рентгеновским методом, а для дальнейшего обогащения наших исследований атомная динамика кристаллов изучалась методом Рамановской спектроскопии. Установлено, что максимумы в спектре получены на частотах $\nu_1= 106 \text{ см}^{-1}$, $\nu_2= 64 \text{ см}^{-1}$, $\nu_3= 724 \text{ см}^{-1}$, $\nu_4= 1369 \text{ см}^{-1}$. Результаты, полученные методом Рамановской спектроскопии, и сопоставимые литературные материалы свидетельствуют о том, что максимумы, определяемые на разных частотах, характерны для нитратов щелочных металлов и их кристаллов твердых растворов.

Qəbul olunma tarixi: 04.09.2023