

Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası
Fizika-Riyaziyyat və Texnika Elmləri Bölməsi
Fizika İnstitutu

1

Fizika

Cild

XIV

2008

Bakı * Elm

KINEMATIC ELECTRON DIFFRACTION STUDY OF CRYSTALLIZATION KINETICS OF AMORPHOUS $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ NANOTHICK FILMS

E. Sh. HAJIYEV

*Institute of Physics, Academy of Sciences of Azerbaijan,
33 H. Javid, Baku Az – 1143, Azerbaijan*

The crystallization kinetics of ternary $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ amorphous thin films has been investigated by kinematic electron diffraction method. It is shown that crystallization takes place in accordance with Avrami – Kolmogorov law. The kinetics parameters and the growth dimensionality of the crystallization have been determined.

The systems on base of chalcogenide glasses containing the rare – earth elements have been widely studied last years. In these systems, it is established that formation of ternary compounds which can be applied in devices controlled by external magnetic field. Amorphous alloys containing rare – earth elements represent a new class of amorphous materials [1]. The main interest in these materials is the environment of $\text{As}_2\text{Te}_3 - \text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x$ ($x=0.2$ at. %) system is one of these classes of above-mentioned materials. According to state diagram, the $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$, $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{Te}_4$ and $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_9$ ternary compounds are formed in this system. Thin films of $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ with thickness ~ 30 nm obtained by vacuum evaporation and deposition on substrates of fresh cleavage surfaces of NaCl , KCl crystals and amorphous celluloid at room temperature were amorphous. Amorphous phase is formed on NaCl up to $T_s=523\text{K}$. Using electron diffraction method we have investigated the structure of obtained films. The electron diffraction pattern shows seven diffuse diffraction ring corresponding $S=4\pi\sin\theta/\lambda=20.3; 33.0; 51.7; 71.4; 96.0; 119.0; 152.0 \text{ nm}^{-1}$. Amorphous films crystallization at $T=523\text{K}$ results in the formation of $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ polycrystalline with parameters of the rhombic lattice rhombic unit cell with $a=1.214$; $b=1.470$; $c=0.410$ nm. This is agreement the data of ref: 4

The general form describing the kinetics of growth is written as [5,6]

$$V_t = V_o[1 - \exp(-kt^m)] \quad (1)$$

where V_t is volume of substance transforming to t time, V_o is initiation volume of substance, k is reaction rate constant. “ m ” quantity is different for variety transformation types and is depend on growth measure. To obtain reliable results using this theory, it is need to have exact experimental data for V_t . Studying of crystallization processes depending on temperature and time gives information about mechanism of growth and crystal growth rate on depended temperature.

To determine the kinetic parameters of crystallization of $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ amorphous films we have used kinematic electron diffraction method from amorphous films with thickness ~ 30 nm, at $T=523\text{K}$, $T=548\text{K}$, $T=573\text{K}$ temperatures [7]. It is quite clear, that much more temperature, than fast occurs the crystallization process.

Electron diffraction pattern taken from annealing samples shows how diffuse rings relating to amorphous phase are disappearance and the lines of the polycrystalline phase of $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ are occur. There is the area where crystal and amorphous phases exist together.

Intensities of lines of the $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ polycrystalline phase were measured by micro photometric method. The intensities of diffraction lines with h, k, l index were

the rare – earth atom because it determines the electric, optic and magnetic properties of these materials. The structure and crystallization of some ternary compounds of system containing rare-earth elements have been investigated in the film state before [2-3]. Therefore, the purpose of the present work is study crystallization of $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ amorphous nanothick films.

determined depending on annealing time. To get quantity of crystallized matter we use standardization method taking account of intensity of scattering of electrons is proportional to the volume of scattering matter [8].

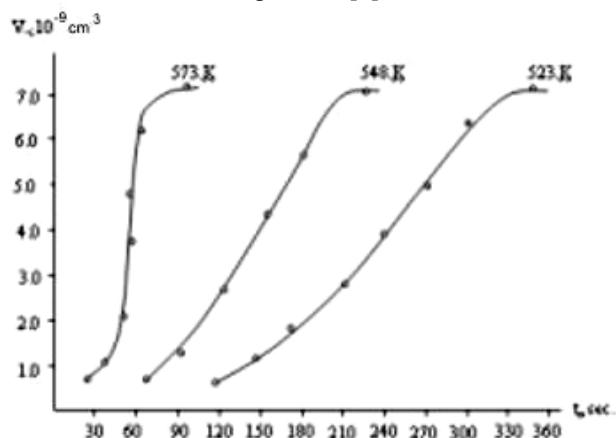


Fig. 1. The kinetic curves of crystallization of $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ amorphous films.

In investigation interval of temperature the kinetic curves of crystallization of $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ amorphous films have been calculated i.e. the curves of the crystallized volume as a function of the time for variety temperatures. (fig. 1).

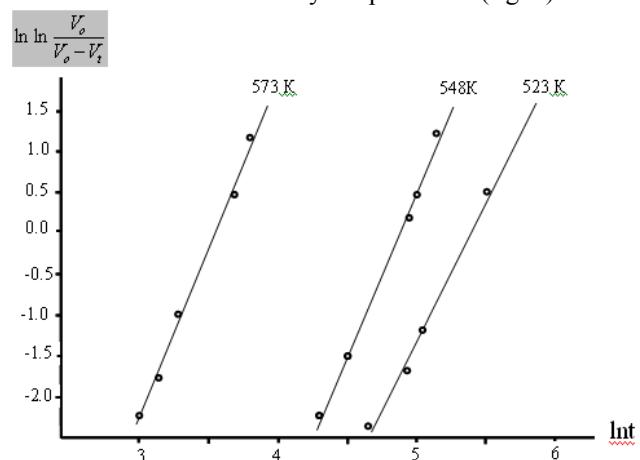


Fig. 2. The $\ln \ln(V_o/(V_o - V_t))$ dependence on $\ln t$ for $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$.

The $\ln(\ln(V_0/(V_0 - V_t)))$ dependences on $\ln t$ were calculated at $T=523\text{K}$, $T=548\text{K}$, $T=573\text{K}$ temperatures. The lines drawing through the experimental points are straight lines for all temperatures (fig.2).

The value of “ m ” in (1) form determined from slope is equal to about 4 ($m=3,80$ at 573 K; $m=3,95$ at 548 K; $m=3,93$ at 523 K). That is witness for the three-dimensionality growth of crystals at investigation temperatures.

$\ln k$ dependence on $1/T$ is linear . The nucleation rate and crystal growth rate are described by Arrhenius form

$$\begin{aligned} v_n &= C e^{-\frac{E_s}{RT}} \\ v_g &= C e^{-\frac{E_p}{RT}} \end{aligned} \quad (2)$$

where v_n is the formation rate of the nucleation centre and determined as number of nucleus creating in unit time in unit

volume of metastable phase; v_g is crystal growth linear rate and determined as the change rate of linear sizes of growing crystal of the new phase.

Summary nucleation activation energy - E_s is determined from slope of the $\ln k$ curve as function $1/T$ and equal to 79,6 kcal/mol. The nucleation activation energy is calculated from slope of the $1/\tau_o$ curve as a function $\ln t$ (where τ_o is experimental beginning time of crystallization) and equal to 26,2 kcal/mol. E_g is crystal growth activation energy is determined by $E_g = (E_s - E_n)/3$ and equal to 17,8 kcal/mol.

In this work we also investigated the crystallization of $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ amorphous films obtained in condition of electric field action ($U=3000 \text{ V/cm}$).It is shown that the influence of electric field on crystallization process leads to an increasing of nucleation (v_n) and growth (v_g) rate, that is , decreasing of activation energies about 10-12% [Table 1].

Table 1

Amorphous compound	Electric fields (U)	m	activation energy		
			E_s kcal/mol	E_n kcal/mol	E_g kcal/mol
$\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$	$U=0$	3	79,6	26,2	17,8
	$U=3000 \text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}$	3	70,8	23,1	15,9

-
- | | |
|---|---|
| [1] I.V. Zolotukhin. Fizicheskie svoystva amorfnykh metallicheskikh materialov, Metallurgiya, Moscow (1986) 176.
[2] E.Sh. Hajiyev. Kinematic electron diffraction study of crystallization kinetics of amorphous YbAs_4Te_7 nanothick films. Izv.AN Az. ser.fiz.-tekhn. i mat. nauk XXVII, №2,s.105-107,2007.
[3] E.Sh. Hajiyev. Electron diffraction study of short-range order parameters in new semiconductor amorphous films of $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ compound. Izv. AN Az. ser.fiz.-tekhn. i mat. nauk. XXVII, №5, s. 84-86, 2007. | [4] P.G. Rustamov, T.M. Ilyasov, A.I. Mamedov. Zh. Neorg.Khim. 30 (1985) 769.
[5] A. N. Kolmogorov. Izv. AN SSSR. Ser. Matem. 1937. №3. s.355.
[6] M. Avrami. J. Chem. Phys. 1940. v.8. №2. p.212.
[7] R. B. Shafizade, F. I. Aliev, D.I. Ismailov. Doklady AN Az. SSR 1988, t. 64, №6, s. 21.
[8] B.K. Vaynshteyn. Strukturnaya elektronografiya (Electron diffraction study of structure), Izd.vo AN SSSR, M. 1956. |
|---|---|

E.Ş. Hacıyev

KINEMATIK ELEKTRONOQRAFIYA METODU ILƏ NANOQALINLIQLI AMORF $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ TƏBƏQƏLƏRİN KRİSTALLAŞMA KİNETİKASININ TƏDQIQI

Kinematik elektronografiya metodu ilə $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ üçqat birləşməsinin nanoqalınlıqlı amorf təbaqələrinin kristallaşma kinetikası tədqiq edilmişdir. Göstərilmişdir ki, kristallaşma prosesi Avrami – Kolmoqorov qanuna uyğunluğu ilə baş verir. Kristallaşmanın kinetik parametrləri və kristallik rüseyimlərin böyümə ölçüsü müəyyən edilmişdir.

E.Ш. Гаджиев

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ АМОРФНЫХ НАНОТОЛЩИННЫХ ПЛЕНОК $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$ МЕТОДОМ КИНЕМАТИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНОГРАФИИ

Методом кинематической электронографии исследована кинетика кристаллизации тройных аморфных нанотолщинных пленок $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Te}_7$. Показано, что кристаллизация происходит по закономерностям, установленным Аврами – Колмогоровым. Определены значения кинетических параметров и мерность роста.

Received: 16.01.08

NOVEL COLLOID-LIQUID CRYSTALLINE COMPOSITES ON THE BASE OF POLYMERS

T.D. IBRAGIMOV

*Institute of Physics of National Academy of Sciences,
AZ1143, H. Javid ave., 33, Baku, Azerbaijan*

G.M. BAYRAMOV, A.R. IMAMALIEV

Baku State University, AZ1143, Z. Khalilov str., 23, Baku, Azerbaijan

In the work it is noted about the creation of novel small particles-liquid crystalline composites showing three-dimensional network formation. The first experimental data are presented.

Unique properties of liquid crystals (LC) are widely used in the modern engineering including furnishings. Functioning of LC displays, switches of frequency, converters of radiation, and others is based on numerical electrooptic effects in LCs. The basic direction in the investigation of LCs connects with obtaining of the novel compounds with improved operated parameters. On the other hand, a perspective direction of modern science and engineering is to study and to use the properties of very small particles (SP). Christiansen and other effects providing strong dependence of SP properties upon surrounding medium, in combination with numerous optic and electrooptic phenomena (Fredericksz effect, twist and guest -host effects, electrohydrodynamic instability, selective reflection, memory, and ferroelectricity) in different LCs will allow not only for improving the operated parameters but also for building-up novel types of photonic devices.

Recently, researchers from Institute of Liquid Crystals (Kent University, the USA) and Collaborative Optical Spectroscopy Micromanipulation and Imaging Center (University of Edinburgh, Scotland) have found out that at slow cooling through the isotropic-nematic transition of the mechanical mixture of polymethylmethacrylate particles and pentylcyanobiphenyl (liquid crystal 5CB) the particles are expelled by the LC, forming a three dimensional network structure [1-5]. At that case, the composite has unusual soft solid state characterized with significant storage modulus. The birefringent soft solid is potentially important as a switchable electrooptic material that can be readily handled and processed. Researchers focus on the kinetics of the phase transition and viscosity properties of this material. In particular, they have found out that the three dimensional structure varies with the course of time. This fact does not allow wholly using this composite for application.

The purpose of the work is the creation of novel colloid-liquid crystalline composites forming the network with stable characteristics.

At selection of LC and polymer we were guided by following general requirements:

- a melting point of polymer (T_m) and a clarify point of LC (T_{ni}) should be close to each other;
- a density of LC and polymer should be close;
- a polymer should not be dissolved in LC;
- there should be a stabilizer interfering aggregation of polymeric particles at mixing.

The following materials are used for development of composite gels:

- liquid crystals 4-pentylcyano-4'-biphenyl (5CB), 4-methoxybenzilidene - 4' – butylaniline (MBBA), 4-ethoxybenzilidene-4'-butylaniline (EBBA), the mixture of MBBA and EBBA with molar ratio of 1:1 (commercial mark H-37) and 1:3 (commercial mark H-8);

- polymers poly(methylmethacrylate) (PMMA), poly(2-methyl-5-vinylpyridine) (PMVP), poly(ethyleneglycol) (PEG), poly(vinylalcohol) (PVA);

- the stabilizer heptylbenzoic acid (HOBA) which also posses mezogene properties.

At first the mixture of polymer and LC was heated above T_m and T_{ni} in the proposed method. At that case, both components are in the state of a transparent liquid. At intermixing with frequency of 1000 revolutions/minute the micron-size drops of polymer in isotropic LC are formed. These drops are transformed to the solid balls at slow cooling of the mixture lower T_m . This transition is accompanied by primary turbidity of the liquid. The isotropic-nematic transition is occurred at further cooling lower T_{ni} which is accompanied the strong turbidity of the mixture. When the mixture cools down to room temperature it assumes the soft solid state.

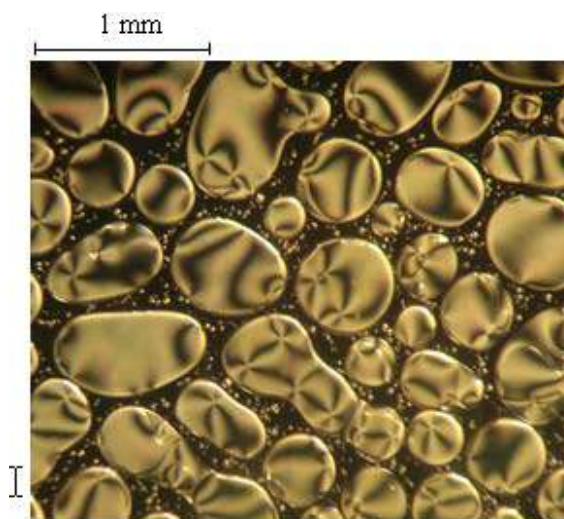


Fig. 1. The texture of H-37 + PMVP with a weight ratio of 11:1 at room temperature and 300-fold magnification.

The electrooptic cell consists of two conductive glasses filled by obtained composites. The thickness of the cell is regulated by the dielectric gasket. The cell has the heating system which allows regulating the rate of temperature change. The magnitude of temperature is indicated by

copper-constantan thermocouple with an accuracy of 0.1 degrees. The obtained textures are examined under polarized microscope.

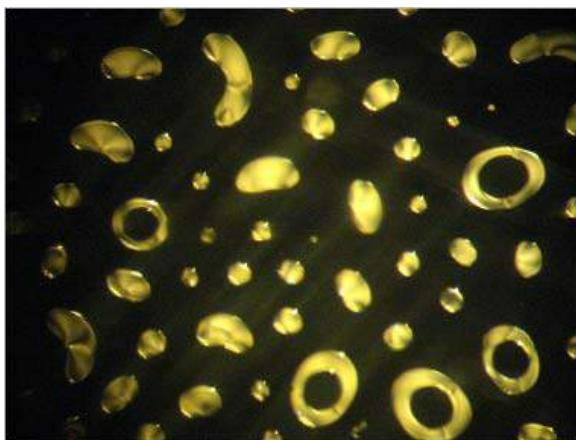


Fig. 2. Ring-like areas of LC at heating of H-37 + PMVP (a weight ratio of 11:1) below nematic-isotropic phase transition.

The study of obtained composites shows that the most stable of them is H-37 + PMVP with a weight ratio of 11:1 and containing 1% of HOVA. In the order to stabilize other composites it is necessary to add greater quantity of the stabilizer and greater time for mixing. In particular, for stabilization of the composite H-8 + PEG is required to add NOVA with quantity of 4%.

The texture of H-37 + PMVP with a weight ratio of 11:1 at room temperature and 300-fold magnification is presented in the Fig.1. Apparently, areas with LC are divided from each other by polymeric walls being a part of unified network. Processing the substrate surfaces of the LC cell by appropriate way it is possible to obtain any initial texture of LC inside these areas. The Shirlen's texture of LC shown in Fig.1 corresponds to weak anchoring of LC molecules with substrate surfaces. At large thickness of the electrooptic cell these LC areas can be imposed. At slow heating of indicated composite near the nematic-isotropic transition the LC areas form ring-like structure inside the dark background (Fig.2). Formation of these rings is connected by that the nematic-

isotropic transition begins in the center of them and the transition is complicated on the area edges because of orienting influence of surface forces. Electrooptic properties of the nematic LC little differ from the ordinary LC cell inside indicated areas. In particular, applying the voltage about 2 V onto the cell the planar-homeotropic transition (S-effect) can be observed, William's domens are occurred as strips at the voltage of 10-15 V (Fig.3), and above 20 V – turbulent movement (electrohydrodynamic instability) accompanied strong light scattering.

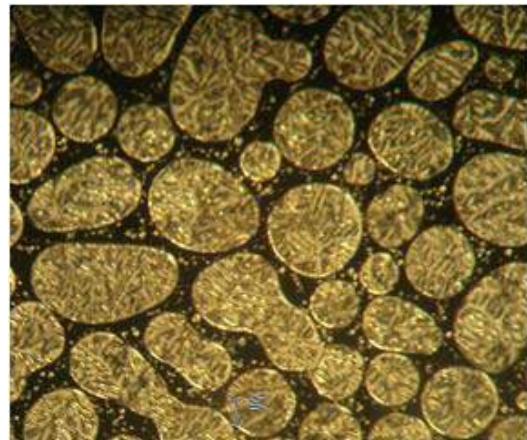


Fig. 3. William's domens in H-37 + PMVP (a weight ratio of 11:1).

These values of voltage almost coincide with corresponding ones for the pure LC H-37. At increasing of polymer concentration the LC area dimensions decrease that result in small increasing of threshold voltage of the specified electrooptic effects owing to increasing of contribution of surface effects.

Thus, proposed method of phase separation allows creating novel small particles-liquid crystalline composites by a variation of type and concentration of LC and polymer, and also regime of mixing and cooling.

The work is supported by Science and Technology Center in Ukraine (grant No 4172).

-
- [1] D. Vollmer, G. Hinze, B. Ullrich, W. Poon, M. Cates, A. Schofield. Langmuir, 2005, v.21, p.4921-4930.
 - [2] J. Cleaver, D. Vollmer, J. Crain, W. Poon. Mol. Cryst. Liq. Cryst. 2004, v. 409, p.59-68.
 - [3] D. Vollmer, G. Hinze, J. Cleaver, M. Cates. J. Phys.: Cond. Matter. 2004, v.16, p.227-233.
 - [4] J. West, K. Zhang, G. Liao, A. Glushenko, Yu. Resnikov, D. Andrienko, M. Allien. Mol.Cryst. Liq.Cryst., 2004, v. 410, p. 611-621.
 - [5] S.P. Meeker, W. Poon, J. Crain and E.M. Terentiev, Phys.Rev. E, 2000, v. 61, p.R6083-R6086.

T.C. İbrahimov, G.M. Bayramov, A.R. İmamaliyev

POLİMERLƏR ƏSASINDA YENİ KİÇİK HİSSƏCİK - MAYE KRİSTAL KOMPOZİTLƏRİ

Məqalədə üç ölçülü fəza torunu birüzə verən yeni kiçik hissəcik-maye kristal kompozitlərin yaradılması barədə məlumat, həmçinin təcrübə nəticələri verilmişdir.

Т.Д. Ибрагимов, Г.М. Байрамов, А.Р. Имамалиев

НОВЫЕ КОМПОЗИТЫ МАЛЫЕ ЧАСТИЦЫ - ЖИДКИЙ КРИСТАЛЛ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРОВ

В работе сообщается о создании новых композитов: малые частицы - жидкий кристалл, проявляющие трехмерную пространственную сетку. Приведены первые экспериментальные данные.

Received: 17.01.08

QUANTUM MECHANICAL CALCULATION OF ELECTRONIC STRUCTURE OF MOLECULE C₆₀H

M.A. RAMAZANOV, F.H. PASHAEV, N.S. NABIEV, A.G. GASANOV
Baku State University, AZ-1148, Z. Khalilov str., 23

In the work by method of Wolfsberg - Helmholtz (VH) has carried out the quantum mechanical calculation of electronic structure of nano-dimensional C₆₀H - molecule in basis of Slater functions. Are determined, that in molecule C₆₀H effective charges of atoms of carbon identical. Values of electronic energy, potential of ionization, effective charges of atoms of carbon and hydrogen of a molecule C₆₀H are found.

In work the quantum mechanical calculation of electronic structure nano-electronic structure nano-dimensional molecule C₆₀H by method Wolfsberg - Helmholtz (WH) it is carried out. The molecule C₆₀H presents the closed sphere, consisted of twenty correct hexagons and twelve correct pentagons in the tops of which there are atoms of carbon [1, 2]. The atom of hydrogen is in the center of sphere (Fig. 1).

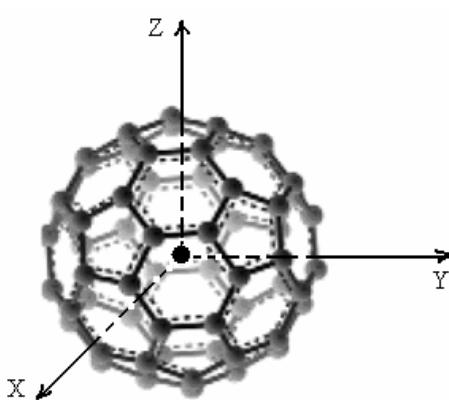


Figure 1. A molecule C₆₀H.

It is known, that method WH is one of simple semi-empirical variants of a molecular orbital (MO) method. It is considered that everyone electron in a molecule in MO method moves in the definite effective field, created by nucleus and other electrons independently of others. The states of electrons in a molecule are described by the one-electronic wave function named by molecular orbital. It is multicentered function, i.e. distances of electron from various nuclear of atoms are included in it. There are different variants of molecular orbital search. One of them is the search of molecular orbitals U_i in the form of linear combinations of atomic orbitals, included in a molecule (method MO LCAO):

$$U_i = \sum_{q=1}^m C_{qi} \chi_q \quad (1)$$

where C_{qi} are unknown coefficients, χ_q are atomic orbitals, chosen as basic functions. In the work the essential Slater atomic orbitals are used in the capacity of basic functions (SAO) [3]:

$$\chi_q \equiv \chi_{nlm}(\xi, \vec{r}) = \frac{(2\xi)^{\frac{n+1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\xi r} S_{lm}(\theta, \varphi). \quad (2)$$

where S_{lm}(θ, φ) are essential spherical functions. The following formulas are used for calculation of exponential parameter ξ [4]:

$$\xi_i = \frac{Z - \gamma_i}{n} \quad (3)$$

$$\gamma_i = \sum_{j \neq i}^N \left\{ 1 + \left(\frac{3n_j^2 - \ell_j(\ell_j + 1)}{3n_i^2 - \ell_i(\ell_i + 1)} \right)^2 \right\}^{-3/2} \quad (4)$$

where Z is serial number of atom, N is number of electrons in atom, n_i and ℓ_i are principal and orbital quantum numbers of considered electron, n_j and ℓ_j are the principal and orbital quantum numbers of the other electrons.

In quantum mechanical calculations of electronic structure of molecules we are usually limited by consideration of atom valent electrons and molecular orbitals are presented in the form of linear combinations SAO of these valent electrons. In the work 2s -, 2p_x -, 2p_y -, 2p_z - SAO of carbon atoms and 1s - of hydrogen atom are used for construction molecular orbitals of molecule C₆₀H. Thus, m=4×60+1=241 of essential SAO are used in the capacity of basic functions. Using formulas (2), (3) and (4) the analytical expressions of basic SAO are defined:

$$\chi_1 = 2s(C_1) = \frac{1,015141}{\sqrt{\pi}} \cdot re^{-1,456771r} \cos \theta \quad (5)$$

$$\chi_2 = 2p_x(C_1) = \frac{1,090819}{\sqrt{\pi}} \cdot re^{-1,682113r} \sin \theta \cos \varphi \quad (6)$$

$$\chi_3 = 2p_y(C_1) = \frac{1,090819}{\sqrt{\pi}} \cdot re^{-1,682113r} \sin \theta \sin \varphi \quad (7)$$

$$\chi_4 = 2p_z(C_1) = \frac{1,090819}{\sqrt{\pi}} \cdot re^{-1,682113r} \cos \theta \quad (8)$$

$$\chi_5 = 1s(H) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-r} \quad (9)$$

In formulas (5) - (9) r, θ, φ - spherical coordinates of electron.

Coefficients C_{qi} in the formula (1) are found by the solution of the following system of equations:

$$\sum_q (H_{pq} - \varepsilon_i S_{pq}) C_{qi} = 0 \quad (10)$$

Here the following designations are used:

$$H_{pq} = \int \chi_p^* \hat{H}_{ef} \chi_q dV \quad (11)$$

$$S_{pq} = \int \chi_p^* \chi_q dV \quad (12)$$

S_{pq} are overlap integrals between atomic orbitals χ_p and χ_q . \hat{H}_{ef} is the effective Hamilton operator for one electron, moving in the definite effective field independently on other electrons:

$$\hat{H}_{ef} = -\frac{1}{2} \nabla^2 + U(r) \quad (13)$$

Obvious expression of the effective Hamilton operator is unknown, that's why values of matrix elements H_{pq} can't be calculated and they are estimated by different methods. The values of potentials of atom ionization are used in WG method for H_{pq} estimation. Diagonal elements H_{qq} of this matrix are taken by equal potentials of ionization of corresponding valency atom states. Nondiagonal elements are calculated, using the following expression [5]:

$$H_{pq} = 0.5 \cdot K \cdot S_{pq} (H_{pp} + H_{qq}) \quad (14)$$

The value of coefficient K is found by the comparison with experimental data or theoretically from the condition of minimum of molecule electronic energy.

As it is seen from formulas (10) and (14) for quantum mechanical calculation of molecules by method WH, it is necessary to know the values of overlap integrals. The formulas, known from the corresponding scientific literature [6, 7] are used for calculation of overlap integrals. It is necessary to introduce the quantum numbers n, ℓ, m of corresponding atomic orbitals, the values of exponential parameter ξ and Cartesian coordinates of atoms in molecular system of coordinates for carrying out of computer calculations of overlap integrals on these formulas. For calculation of matrix elements H_{pq} the following values of

ionization potentials of valency states $2s$ - $2p$ - atoms of carbon and $1s$ - atom of hydrogen are used [8].

$$(2s/C/2s) = -0,772096 \text{ a.u.},$$

$$(2p/C/2p) = -0,419161 \text{ a.u.},$$

$$(1s/H/1s) = -0,4997861 \text{ a.u.}$$

Knowing values of matrix elements H_{pq} and S_{pq} , it is possible to solve equation system (10) and to calculate orbital energies ε_i , electronic energy $E = \sum_i \varepsilon_i$, values of ionization potential I of molecule $C_{60}H$ and values of coefficients C_{qi} in approximation WH. Using values of coefficients C_{qi} , it is possible to calculate the effective atom charges in a molecule $C_{60}H$ with the help of the following formula [9]:

$$q_A = n_A^o - \sum_i n_i \sum_{q \in A} |C_{qi}|^2. \quad (15)$$

Here n_A^o is positive charge of A atom after giving the valency electrons for band formation (for carbon atoms: $n_A^o = 4$, for hydrogen atom $n_A^o = 1$), n_i is number of electrons on i -th molecular orbital. Summation on i is carried out on molecular orbital, captured by electrons.

The values of electronic energy, value of potential of ionization, value of effective charges of carbon and hydrogen atoms of molecule $C_{60}H$ are found with the help of computer calculations. It is defined, that values of effective charges of carbon atoms are approximately identical:

$$E = -137,851353 \text{ a.u.},$$

$$I = 11,339642 \text{ eV},$$

$$q_A(C) = 0,8383 \text{ a.u. } (A = 1 \div 60)$$

$$q_{61}(H) = 0,4104 \text{ a.u.}$$

Quantum mechanical calculation of electronic structure of molecule $C_{60}H$ is carried out by the program, developed by employees of Department of Chemical Physics of Nanomaterials of Baku States University in Delphi Studio, working in operational system MS Windows XP.

-
- [1] A.M. Magerramov, M.A. Ramazanov, L.I. Velieva. Nanotechnology, Baku, 2007, 231p.
 - [2] I.P. Suzdalov. Namotechnology: physical - chemistry nanoclusters, nanostructures and nanomaterials, M., the House the Book, 2006, 592p.
 - [3] V.I. Minkin, V.Y. Simkin. Theory of a structure of molecules, M., HS, 1979, 407p.
 - [4] N. Bassis and G. Bassis. J. Chem. Phys., 1981, v. 74 (6), p. 3628-3631.
 - [5] G.A. Shembelov, etc. Quantum Chemistry methods of calculation of molecules, M., Chemistry, 1980, 255p.
 - [6] I.I. Guseinov, T.M. Mursalov, F.G. Pashaev, B.A. Mamedov, N.A. Allahverdiev. J. Strukt. Chemistry, 1989, v.30, pp. 183-185.

QUANTUM MECHANICAL CALCULATION OF ELECTRONIC STRUCTURE OF MOLECULE C₆₀H

- [7] I.I. Guseinov, M.G. Gamzaev, T.M. Mursalov, R.M. Veliev, B.A. Mamedov, F.G. Pashaev. J. Strukt. Chemistry, 1991, v. 32, pp. 135-139.
- [8] C. Hinze, H.H. Caffe, C. Amer. Chem., 1962, v. 84, pp. 540-546.
- [9] I.S. Dmitriev. Elektron eyes of the chemist, L., Chemistry, 1986, 225p.

М.А. Рамазанов, Ф.Г. Паشاев, Н.С. Набиев, А.Г. Гасанов

C₆₀H - MOLEKULUNUN ELEKTRON QURULUŞUNUN KVANT MEXANİKİ HESABLANMASI

İşdə nanoölçülü C₆₀H - molekulunun elektron quruluşu Volfsberg - Helmhols (VH) metodу ilə Sleyter funksiyaları bazisində kvant mexaniki hesablanmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, C₆₀H molekulunda karbon atomlarının effektiv yüksəkləri təqribən eynidir. C₆₀H molekulunun elektron enerjisi, ionlaşma potensialının qiyməti, karbon və hidrogen atomlarının effektiv yüksəklərinin qiymətləri tapılmışdır.

М.А. Рамазанов, Ф.Г. Пашаев, Н.С. Набиев, А.Г. Гасанов

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ C₆₀H

В работе с помощью метода Вольфсберга – Гельмгольца проведен квантовомеханический расчет электронной структуры наноразмерной молекулы C₆₀H в базисе Слейтеровских функций. Определено, что в молекуле C₆₀H эффективные заряды атомов углерода одинаковы. Найдены значения электронной энергии, потенциал ионизации, эффективные заряды атомов углерода и водорода молекулы C₆₀H.

Received: 12.12.07

INVESTIGATION OF PHOTO-GENERATION PROCESSES IN SEMICONDUCTIVE POLYMERS

A.A. BAYRAMOV, N.N. MURSAKULOV, N.A. SAFAROV, H.M. MAMEDOVA

Institute of Physics National Academy of Sciences of Azerbaijan

AZ1143, H. Javid Ave., 33, Baku

B.A. MAMEDOV

Institute of Polymer Materials National Academy of Sciences of Azerbaijan

In article the perspective of researches semi-conductor polymers for creation of photo-electric converters is considered. The processes of photo-generation of charge carriers in a molecular solid state are investigated. The role of the weak intermolecular interaction causing process of photo-generation of charge carriers through a status of the coulomb connected pair is shown. The first results of semi-conductor polymers-silicon systems investigations were reported. Such as of polymer composite materials we have used oligohydroquinone, oligo- α -naphthol, oligo- β -naphthol, oligo-amino-phenylen. Current-voltage characteristics of these polymer-silicon heterojunctions were investigated. The structural regularities of change of the photoeffect quantum efficiency in semiconductive polymers and their molecular complexes are investigated.

1. Introduction

Photo-electric converters on the basis of solid-state semiconductor elements (Si, CdTe, etc.) have received a wide spreading all over the world. However the basic lack of these converters - high cost of received electric energy. Therefore, recently scientists began to study in more detail applied aspects of perspective semi-conductor polymers with the purpose of reception of cheap energy [1,2,3].

Photosensitive polymeric semiconductors due to combination protosemiconductive properties with thermostability, mechanical and other specific properties of polymers became irreplaceable at creation photovoltaic elements for converters of a solar energy. Scopes of photosensitive polymers are caused by features of intermolecular interaction and an opportunity of formation in them donor-acceptor (DA) complexes with of charge transfer (CCT). Ability to complexing and effective transfer of a charge in molecules of complexes results in their polarizability under action of light and, hence, photopolarization of medium, and also caused by it photovoltaic and to nonlinear-optical properties.

The developed principles of achievement of high quantum efficiency η of photophysical processes, in particular photo-generation of the charge carriers and creation on their basis high-resolution molecular medium with high photosensitivity $S \propto \alpha \cdot \eta$ (α is a factor of absorption) in visible spectrum can be used at a choice and synthesis of materials with components CCT for converters of a solar energy. Development of photosensitive polymers is carried out in two directions: synthesis of polymers with the polyconnected system and creation of systems on the basis of formation in polymers of complexes with charge transfer. The last can be formed as in polymers monomeric part of which are a complex, and at of introduction in polymer of low-molecular substances (for example, dye). They interact with polymer and results as in increase in value of its photosensitivity, and to expansion of spectral region of absorption and sensitivity.

2. Mechanisms of photo-generation of charge carriers

Let's consider features of molecular medium and photophysical processes in them. Molecular medium (both

organic crystals, and polymers and a films, containing molecules of CCT) are solid-state systems which are formed due to intermolecular interaction. Intermolecular structure of the covalently connected atoms in a molecule (crystal) or structure CCT, formed due to DA interactions (in solid solutions of polymeric complexes), practically do not change at formation of a solid. Depending on electronic structure of a molecule and the parameters connected to it (polarizability, the dipole moments, DA properties) energy of intermolecular interaction can change over a wide range - from 10^{-3} eV (for Van der Waals interactions) up to units eV (in a case DA connections) [4].

Now we shall consider features of the mechanism of photo-generation of charge carriers. Weak intermolecular interaction in a solid results in strongly defined localization of charge carriers on separate molecules (time of localization $\tau_{loc}=10^{-12} \div 10^{-14}$ s) [4]. It causes electronic polarization of a lattice by the charge carrier (time of polarization $\tau_{pol}=10^{-15} \div 10^{-16}$ s), time of the carrier transfer between the adjacent located states (time of carrier hop $\tau_{hop}=10^{-12}$ s). In result

$$\tau_{hop} > \tau_{loc} > \tau_{pol}$$

and the carriers transfer is described of not coherent jumps between the located states.

The following formula describing the rate of transitions between two jumps centers with distance of r_{ij} and a difference of connection energy of electron of $\Delta_{ij}E$ [5] is put in a basis of phenomenological model of jump mobility:

$$\Gamma_{ij} = \Gamma_0 \exp[-2\gamma r_{ij} - (\Delta_{ij}E/kT)\Theta(\Delta_{ij}E)]$$

Here: γ is a constant of attenuation of wave function of located electron which is accepted as spherically symmetric; $\Theta(x)$ is a unit stepped function. If the spatial arrangement the jump centers and the type of distribution of connection energy are set then we have a problem about casual wanderings of electron on a spatial lattice of the low-energy centers. This problem is known in the literature as a problem r - E -lattice percolation.

A stage of transfer, and also processes of photons absorption by molecules of complexes usually describe by concept of a state with of a charge transfer (CT-charge

transfer states) - excitations of neutral states of complexes in which (as opposed to excitons where electron and hole are located on one molecule with distance between them independent of time) excited electron passes to the molecule nearest or following it, but remains coulomb connected with the hole. Energy E_{CT}^i and E_{CP} (CP-charge pair) of these ionic states are below of conductivity zone. At absorption of a photon by a molecule of a solid occurs or autoionization (Franck-Condon transition from the basic state in one of excited), or direct excitation of CT- states therefore the status of the coulomb connected pair (a so-called CP-state) and then there can be free charge carriers are formed.

3. Mathematical models of photo-generation of charges carriers

Photo-generation of charge carriers in medium with weak intermolecular interaction occurs through a state of the coulomb connected pair carriers of an opposite sign. Process of charge separation of such pair in external electric field ε includes two stages: a stage thermalization of a charge carrier connected in a pair and a stage of thermal-field dissociation of the connected pair charges. On the first stage connected electron loses the excess of kinetic energy, coming in balance with phonons on some distance between the charges, called of radius carrier thermalization r_t . This stage is characterized by a quantum efficiency of connected pairs formation η_0 . On the stage of thermal-field dissociation the thermalized connected pairs are separated owing to interaction with phonons. This stage is described by probability of dissociation $f_d(r, d, E_f)$. From here

$$\eta = \eta_0 f_d(r, \theta, E_f) g(r, \theta) dr^3, \quad (1)$$

Here: $g(r, \theta)$ is a function of pairs on value of radiiuses r and their orientations relative to a direction of field E_f , θ is a corner between vectors r and E . At $r < 10^{-8}$ m $g(r, \theta) = \delta(r - r_t)$ and expression (1) passes in $\eta = \eta_0 f_d(r_t, E_f)$.

In a stationary state of isotropic system of the noninteracting pairs which are in balance with medium with constant dielectric permeability ε and at constant temperature T , the probability of dissociation of the pairs charges $f_d(r_t, E_f)$ is defined by three-dimensional Onsager model [6]:

$$f_d = \left(1 - \frac{kT}{eE_f r_t}\right) \sum_j \frac{eE_f r_t}{kT} I_c\left(\frac{e^2}{\varepsilon r_t kT}\right),$$

Here: e is the electron charge;

$$I_j(x) = I_{j-1}(x) - \frac{x_j}{j! e^x}, \quad j > 1 \quad I_0(x) = 1 - e^{-x}.$$

This Onsager model most correctly reflects physics of process for thermalized pairs.

Thus, the features of molecular mediums are connected to weak intermolecular interaction in them, resulting, first, to molecular character of light absorption and the photo-generation of charge carriers following it through a state a coulomb connected pair; second, to localization of charge carriers on separate charges and their low mobility (in

comparison with semiconductors, where $\mu \approx 1 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$). Weak intermolecular interaction and strong localization of charge carriers on separate molecules in a solid cause process of photo-generation of charge carriers through a state of the coulomb connected pair, formed as a result of molecular absorption of a photon with possible direct excitation of CT-states.

4. Physical models of photo-generation of charges carriers

Physical models of photo-generation differ with the processes resulting to separate of pairs on distance r_t . In various jump models [7,8] such process is a jump of the carrier from the excited molecule of a complex on the next intermediate state. In dissociation-jump models [9] these are jumps on the located states with dissociation on model of the Pool - Frenkel [10].

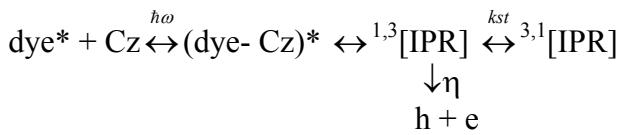
In molecular crystals (homomolecular mediums) 3 models was development: "optical transitions" [11], "ballistic" [12] and "eximer" [13]. For polyvinyl-carbazole PVC it is shown, that in the region of singlet absorption band the quantum efficiency η grows in discrete steps with growth of radiation energy $\hbar\omega$ so, that in each strip η and r_t are constant. For crystals of polyacen, in near-threshold region of absorption with growth of number of aromatic rings η grows from 10^{-3} up to 5.

Process of photo-generation in molecular crystals progresses through the CT-states formed at absorption of a photon owing to excess oscillatory energy $\sim (0,3 \div 0,4)$ eV. This energy is lost on interaction with lattice photons for 80-100 collisions on dependent on a voltage of field ε on distance of $r_t(T) = (6 \div 10) \cdot 10^{-9}$ m [4]. In result the state of the connected pair formed with radius r_t (a so-called CP-state), absorbed additional energy from medium can form free charges carriers. In considered model η and r_t depend on energy of a photon [4]. At large energy a process of autoionization can be occurring.

For molecular mediums on basis of DA complexes besides jump [4] and dissociation-jump [8] models can be selected exciplex [14] at structurally-chemical sensitizing of photoeffect and ion - radical [15] at a spectral sensitization by dyes.

In accordance with exciplex model, photo-generation occurs in process thermal-field dissociation of nonrelaxed state of exciplex $Cz^+-(D^+A^-)^{**}$, formed at absorption the photon by a molecule of the donor (carbazole fragment of PVC Cz) [16] or a acceptor molecule (intermolecular CCT) and the subsequent electron thermalization [14]. In the given model radius $r_t = (2 \div 3) \cdot 10^{-9}$ m cannot depend from ε and $\hbar\omega$ in a absorption band as a result of the fast intermolecular relaxation absorbed a photon of a molecule.

At a spectral sensitization of a photoeffect the process of photo-generation is carried out from a state of the connected ion - radical pair $^{1,3}[\text{IPR}]$, arising of exciplex state of the absorbed a photon molecule dye* and carbazole groups of polymer Cz. Primarily formed from of a state (dye-Cz)* the state $^{1,3}[\text{IPR}]$ dissociates on free carriers, and arising in result singlet-triplet conversion with a constant k_{st} , dependent on intensity of a magnetic field [14] state $^{1,3}[\text{IPR}]$ gives neutral products [16,17]:



The listed physical models of photo-generation in molecular mediums on basis CCT do not give the dependences connecting value and spectrum η with structure of molecules CCT. For the molecular mediums containing CCT, it was possible to connect parameters of the photophysical processes proceeding after a photon absorption by a molecule, with parameters of chemical structure of molecules of complexes.

For molecular crystals the correlation of η with energy gap width has been found. As opposed to this, the class of mediums on basis CCT is more extensive and in him there is an opportunity to choose series of naturally changeable structures of complexes.

As transport of the photogenerated charge carriers in such mediums is carried out as a result of noncoherent jumps between the located states, the establishment of connection of photo-generation parameters and structure demands methods of measurement η , allowing to take into account or exclude influence of a stage of transport on measured values.

5. Experiment and first results

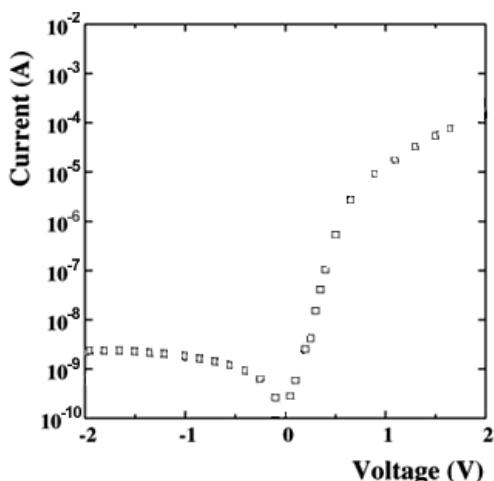


Fig.1. The current-voltage characteristic of the heterojunction silicon-polymer diode.

We have carried out experiments on formation and investigation of semiconductive composite polymers and of silicon-polymer structures. Such as of polymer composite

materials we have used oligohydroquinone, oligo- α -naphthol, oligo- β -naphthol, oligo-amino-phenylen. Polymer-silicon heterojunctions were made by electrochemically deposited method. A 40 nm layer of polyaniline was deposited onto a n-type silicon (100) substrate of resistivity of 1 Ω ·cm.

Current-voltage characteristics of these devices were investigated. The size of sensors was 10x10 mm and thickness was 300 microns. The devices present good electrical characteristics, with apparent barrier high of 0,59 V, reverse bias current of 5 nA and rectifying ratio of ~50 at $\pm 1,0$ V. The current voltage characteristic of the heterojunction silicon-polymer diode is shown in fig.1.

6. Conclusion

The established structural regularities of change of quantum efficiency of a photoeffect in polymeric semiconductors and their molecular complexes have shown that existing classes of photosensitive materials now differ with character of interaction in mediums:

- ionic and covalent (energy of interaction $E > 1$ eV) - in molecules of dyes and polymers;
- donor-acceptor ($E = 0,05 \div 1$ eV) - at formation by polymers of molecular complexes with low-molecular additives;
- hydrogen ($E = 0,04 \div 0,2$ eV) - at formation supramolecular structures.

These regularities have defined requirements to structures of molecules of complexes with high quantum efficiency of photoprocesses: donor fragments or molecules should have low potentials of ionization ($< 7,4$ eV), and acceptor one should have high energy of electron affinity (more than 1,0 eV). The following still requirements are necessary for achievement of higher quantum efficiency of photo-generation:

- 1) The molecule of the donor with the specified potentials of ionization of aromatic fragments (or an acceptor with the specified electron affinity) should be polymeric with number of fragments not less than 5, and periodically located with distance between them $0,7 \cdot 10^{-9}$ m $< l < 1,5 \cdot 10^{-9}$ m;
- 2) Molecules of the donor and an acceptor, a forming molecular complex, should form polymer with the size of the monomeric link limited in thermalization radius $(1,5 \div 3,5) \cdot 10^{-9}$ m.

The formulated requirements allow to predict limiting quantum efficiency of photoprocesses and to choose photosensitive components of molecular complexes.

Current-voltage characteristics of semiconductive composite polymers and of silicon-polymer structures were investigated.

-
- [1] A.A. Bayramov, A.M. Hashimov, N.A.Safarov, F.J. Safarova. A solar power plant with a high performance solar cells and thin concentrators made of aluminum-backed epoxy coated polymers. Proc. TPE-2006, 29-31 May 2006, Ankara, TURKEY, pp.1037-1039.
 - [2] A.A. Bayramov, N.A. Safarov. Polymer matrix sensors. Book of Abstracts. The 3-rd International Congress of Nanotechnology 2006, October 30- November 2, San Francisco, USA.
 - [3] A.A. Bayramov, N.A. Safarov. Matrix sensor of stream on the bases of composite materials. Jour. ICCEs, vol.1, № 1, pp.1-5, 2007.
 - [4] M.V. Kurik, E.A. Silinsh., V. Chapek. Electron processes in organic molecular crystals. Znaniye, Riga, 1988.
 - [5] A.P. Tutnev. Jump conductivity in semiconductive polymers. High energy chemistry. 30 (1), 5 (1996).
 - [6] P.M. Borsenberger, A.I. Ateya. J. Appl. Phys., 49 (7), 4035, (1978).
 - [7] J. Hirch. J. Phys. C.: Sol. St. Phys., 12, 321 (1979).
 - [8] V.I. Gaydalis. Lit. Phys. Proc. 25 (1), 87 (1985).
 - [9] V.M. Komko, N.G. Kuvshinski e.a. Ukr. Phys. Jour. 30 (3), 441 (1985).
 - [10] J. Frenkel. Phys. Rev. B, 54, 647 (1938).

INVESTIGATION OF PHOTO-GENERATION PROCESSES IN SEMICONDUCTIVE POLYMERS

- [11] *P.J. Bounds, W. Siebrand, I. Eisensttin.* Chem. Phys., 95, 197 (1985).
- [12] *E.A. Silinsh, A.J. Yurgis.* Chem. Phys., 94 (12), 77 (1985).
- [13] *P.M. Borsenberger, L.E. Contois, D.S. Hoesterey.* Phys. Chem. Lett., 56 (3), 574 (1978).
- [14] *K. Okamoto, A. Itaya.* Bull. Chem. Soc. Japan, 57 (6), 1626 (1984).
- [15] *B.M. Rumyantsev, e.a.* Progress of scientific photography. 22, 161 (1984).
- [16] *D. Kadyrov, B. Rumyantsev, E. Frankevich.* Polym. Photochem., 2 (3), 243 (1982).
- [17] *E.L. Frankevich.* Chemical Physics. 3(7), 964 (1984).

A.A. Bayramov, N.N. Mursakulov, N.Ә. Səfərov, H.M. Məmmədova, B.A. Məmmədov

YARIMKEÇİRİCİ POLİMERLƏRDƏ FOTOGENERASIYA PROSESİNİN TƏDQİQİ

Məqalədə fotoelektrik çeviricilərin yaradılması üçün yarımkəçirici polimerlərin tədqiqatı perspektivliyinə baxılır. Molekulyar bərk cismində yükdaşıyıcıların fotogenerasiya proseslərinin xüsusiyyətləri tətqiq edilmişdir. Kulon rabitəli cütlərin həli ilə yükdaşıyıcıların fotogenerasiya prosesini səciyyələndirən zəif molekullararası qarşılıqlı əlaqənin rolü göstərilmişdir. Yarımkəçirici polimer-silisium sistemlərin aşdırılmasının birinci nəticələri verilmişdir. Oligohydroquinone, oligo- α -naphthol, oligo- β -naphthol, oligo-amino-phenylen polimerlər kompozit materiallar kimi istifadə olunmuşdur. Polimer-silisium geterostrukturların cərəyan-gərginlik xarakteristikləri tətqiq olunmuşdur. Molekulyar komplekslərdə və polimer yarımkəçiricilərdə fotoeffektin kvant çıxışlarının struktur dəyişməsinin qanunları tətqiq edilmişdir.

A.A. Байрамов, Н.Н. Мурсакулов, Н.А. Сафаров, Н.М. Мамедова, Б.А. Мамедов

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОТОГЕНЕРАЦИИ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПОЛИМЕРАХ

В статье рассмотрена перспективность исследований полупроводниковых полимеров для создания фотоэлектрических преобразователей. Исследованы процессы фотогенерации в полупроводниковых полимерах, и показаны особенности механизма фотогенерации носителей заряда в молекулярном твердом теле. Показана роль слабого межмолекулярного взаимодействия, обуславливающего процесс фотогенерации носителей заряда через состояние кулоновски связанный пары. Представлены первые результаты исследований систем: полупроводниковый полимер-кремний. В качестве полимерных композитных материалов использованы полимеры oligohydroquinone, oligo- α -naphthol, oligo- β -naphthol, oligo-amino-phenylen. Исследованы вольт-амперные характеристики гетероструктур полимер-кремний. Исследованы структурные закономерности изменения квантовых выходов фотоэффекта в полимерных полупроводниках и их молекулярных комплексах.

Received: 19.12.07

B-BARYON POLARIZATION IN SEMI-INCLUSIVE REACTIONS

$$\nu_\mu(\bar{\nu}_\mu)N \Rightarrow \mu^-(\mu^+)BX, \mu^-(\mu^+)N \Rightarrow \nu_\mu(\bar{\nu}_\mu)BX$$

S.K. ABDULLAYEV, A.I. MUKHTAROV

Baku State University, AZ-1148, Z. Halilov str., 23

The common expressions for effective cross-sections of semi-inclusive reactions $\nu_\mu(\bar{\nu}_\mu) + N \Rightarrow \mu^-(\mu^+) + B + X$ and $\mu^-(\mu^+) + N \Rightarrow \nu_\mu(\bar{\nu}_\mu) + B + X$ in the limits of quark-parton model are obtained. The longitudinal polarization degree of Λ^0 -hyperon is defined. It is shown, that longitudinal polarization of Λ^0 -hyperon is only z function and doesn't depend on x and y variables, if it is possible to disregard the antiquark contribution in fragmentation functions. The dependence of longitudinal polarization degree of Λ^0 -hyperon on z variable in the different variants of fragmentation function choice of polarized quark into polarized Λ^0 -hyperon is investigated.

As it is known, the weak neutral currents (WMC) were firstly observed in the processes of deep-inelastic scattering (DIS) by neutrino (antineutrino) nucleons $\nu_\mu(\bar{\nu}_\mu) + N \Rightarrow \nu_\mu(\bar{\nu}_\mu) + X$. The study of these and another lepton-nucleon processes allows us to obtain the information about structure of WMC leptons and hadrons and about distribution functions of quarks and gluons in nucleons.

Last years the new class of processes, which are semi-inclusive hadron creation in DIS of polarized leptons on polarized nucleons [1-4], the study of which is the information source about distribution and fragmentation functions of polarized quarks and gluons, has been well discussed.

Here B-baryon polarization in semi-inclusive reactions is considered

$$\nu_\mu + N \Rightarrow \mu^- + B + X, \quad (1)$$

$$\bar{\nu}_\mu + N \Rightarrow \mu^+ + B + X, \quad (2)$$

$$\mu^- + N \Rightarrow \nu_\mu + B + X, \quad (3)$$

$$\mu^+ + N \Rightarrow \bar{\nu}_\mu + B + X, \quad (4)$$

where the initial nucleon is longitudinal polarized (or unpolarized), neutrino is always polarized (neutrino spirality is $\lambda_\nu = -1$, and antineutrino helicity is $\lambda_{\bar{\nu}} = +1$), B is emphasized inclusive baryon with measured longitudinal polarization h_B .

The differential cross-section of semi-inclusive reactions (1)-(4) in the framework of quark-parton model can be written in the following form:

$$\frac{d\sigma}{dxdydz} = \sum_{q,h_q} \sum_{q',h'_q} f_{q(h_q)}^{N(h_N)}(x) \frac{d\hat{\sigma}}{dy} D_{q'(h'_q)}^{B(h_B)}(z) \quad (5)$$

Here $f_{q(h_q)}^{N(h_N)}(x)$ is distribution function of polarized quark in polarized nucleon; $D_{q'(h'_q)}^{B(h_B)}(z)$ is fragmentation function of polarized quark in polarized baryon B ; $\frac{d\hat{\sigma}}{dy}$ is differential cross-section of parton subprocess; x, y and z are ordinary kinematic variables of DIS.

The negative muon forms in semi-inclusive reaction (1) at neutrino scattering that's why the parton electric charge (quark or antiquark) should increase on the one unit. The positive muon forms at antineutrino scattering and therefore the parton electric charge should decrease on the one unit. Thus, neutrino can interact with d - and s -quarks, which transform to u -quark or with \bar{u} -quark, which transforms to \bar{d} - or antiquark (only contributions of u -, d - and s -quarks are taken into consideration for simpleness):

$$\begin{aligned} \nu_\mu + q &\Rightarrow \mu^- + q', \text{ where } q = d; s; q' = u, \\ \nu_\mu + \bar{q} &\Rightarrow \mu^- + \bar{q}', \text{ where } \bar{q} = u; \bar{q}' = d; \bar{s}. \end{aligned} \quad (6)$$

Analogically, neutrino can interact with u -quark which transforms to d - and s -quark, and also with \bar{d} - and \bar{s} -antiquarks, which transform to \bar{u} -antiquark:

$$\begin{aligned} \bar{\nu}_\mu + q &\Rightarrow \mu^+ + q', \text{ where } q = u; q' = d; s, \\ \bar{\nu}_\mu + \bar{q} &\Rightarrow \mu^+ + \bar{q}', \text{ where } \bar{q} = \bar{d}; \bar{s}; \bar{q}' = \bar{u}. \end{aligned} \quad (7)$$

As quark spirality keeps in disregard of their masses, then elementary subprocesses (6) and (7) are defined by only one spiral amplitude: $\hat{M}_{\lambda_\mu, \lambda_{q'}; \lambda_\nu, \lambda_q}$

$$\hat{M}_{L,L;L,L}^{\nu_\mu q \Rightarrow \mu^- q'} = \hat{M}_{R,R;R,R}^{\bar{\nu}_\mu \bar{q} \Rightarrow \mu^+ \bar{q}'} = \frac{4\pi\alpha \cdot U_{qq'}}{x_w} \cdot \frac{xs}{xys + M_W^2}, \quad (8)$$

$$\hat{M}_{L,R;L,R}^{\nu_\mu \bar{q} \Rightarrow \mu^- \bar{q}'} = \hat{M}_{R,L;R,L}^{\bar{\nu}_\mu \bar{q} \Rightarrow \mu^+ \bar{q}'} = \frac{4\pi\alpha \cdot U_{qq'}}{x_w} \cdot \frac{xs(1-y)}{xys + M_W^2}, \quad (9)$$

where $x_w = \sin^2 \theta_w$, $U_{ud} = \cos \theta_C$, $U_{us} = \sin \theta_C$; θ_w is Weinberg angle; θ_C is Cabibbo angle; M_w is mass of W^\pm

Bose particle, s is square of sum energy of initial particles in c.m.system.

Let's give the cross-sections of parton processes at definite spiralities of initial and final particles:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\sigma}(\nu_L q_L \Rightarrow \mu_L^- q'_L)}{dy} &= \frac{d\hat{\sigma}(\bar{\nu}_R \bar{q}_R \Rightarrow \mu_R^+ \bar{q}'_R)}{dy} = \pi\alpha^2 xs F_{LL}^2, \\ \frac{d\hat{\sigma}(\nu_L \bar{q}_R \Rightarrow \mu_L^- \bar{q}'_R)}{dy} &= \frac{d\hat{\sigma}(\bar{\nu}_R q_L \Rightarrow \mu_R^+ q'_L)}{dy} = \pi\alpha^2 xs F_{LL}^2 \cdot (1-y)^2, \end{aligned} \quad (10)$$

where the designation $F_{LL} = \frac{U_{qq'}}{x_w} (xys + M_W^2)^{-1}$ is introduced.

From formula (10) it is seen, that neutrino and antineutrino

interact only with right polarized quarks and left polarized antiquarks.

For differential cross-sections of semi-inclusive processes (1) and (2) on the base of formulae (5) and (10) we have the following expressions:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\nu_\mu N)}{dxdydz} &= \frac{\pi\alpha^2 xs}{2} \sum_{q,q'} F_{LL}^2 \left\{ f_q^N D_{q'}^B + f_{\bar{q}}^N D_{\bar{q}'}^B (1-y)^2 - h_N [\Delta f_q^N D_{q'}^B - \Delta f_{\bar{q}}^N D_{\bar{q}'}^B (1-y)^2] - \right. \\ &\quad \left. - h_B [f_q^N \Delta D_{q'}^B - f_{\bar{q}}^N \Delta D_{\bar{q}'}^B (1-y)^2] + h_N h_B [\Delta f_q^N \Delta D_{q'}^B + \Delta f_{\bar{q}}^N \Delta D_{\bar{q}'}^B (1-y)^2] \right\}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\bar{\nu}_\mu N)}{dxdydz} &= \frac{\pi\alpha^2 xs}{2} \sum_{q,q'} F_{LL}^2 \left\{ f_q^N D_{q'}^B (1-y)^2 + f_{\bar{q}}^N D_{\bar{q}'}^B - h_N [\Delta f_q^N D_{q'}^B (1-y)^2 - \Delta f_{\bar{q}}^N D_{\bar{q}'}^B] - \right. \\ &\quad \left. - h_B [f_q^N \Delta D_{q'}^B (1-y)^2 - f_{\bar{q}}^N \Delta D_{\bar{q}'}^B] + h_N h_B [\Delta f_q^N \Delta D_{q'}^B (1-y)^2 + \Delta f_{\bar{q}}^N \Delta D_{\bar{q}'}^B] \right\}, \end{aligned} \quad (12)$$

where

$$\begin{aligned} f_q^N &= f_{q(+1)}^N + f_{q(-1)}^N, \quad \Delta f_q^N = f_{q(+1)}^N - f_{q(-1)}^N, \\ D_{q'}^B &= D_{q'(+1)}^B + D_{q'(-1)}^B, \quad \Delta D_{q'}^B = D_{q'(+1)}^B - D_{q'(-1)}^B. \end{aligned}$$

Here the longitudinal polarization degree of inclusive B baryon interests us:

$$P_B(h_N) = \frac{d\sigma(h_N; h_B=1) - d\sigma(h_N; h_B=-1)}{d\sigma(h_N; h_B=1) + d\sigma(h_N; h_B=-1)}, \quad (13)$$

which can be measured on angular distribution of decay products in $B \Rightarrow N + \pi$ reaction. Summing on quark flavor, for longitudinal polarization degree of baryon we have the expressions:

1) In semi-inclusive reaction $\nu_\mu + N \Rightarrow \mu^- + B + X$:

$$\begin{aligned} P_B^{\nu_\mu N}(h_N) &= \left\{ -f_d^N - Rf_s^N + h_N (\Delta f_d^N + R\Delta f_s^N) \right\} \Delta D_u^B + (1-y)^2 (f_u^N + h_N \Delta f_u^N) \\ &\quad \times (\Delta D_d^B + R\Delta D_s^B) \} \times \left\{ f_d^N + Rf_s^N - h_N (\Delta f_d^N + R\Delta f_s^N) \right\} D_u^B + (1-y)^2 (f_u^N + h_N \Delta f_u^N) \\ &\quad \times (D_d^B + RD_s^B) \}^{-1}; \end{aligned} \quad (14)$$

2) In semi-inclusive reaction $\bar{\nu}_\mu + N \Rightarrow \mu^+ + B + X$:

$$\begin{aligned} P_B^{\bar{\nu}_\mu N}(h_N) &= \left\{ (-f_u^N - h_N \Delta f_u^N)(\Delta D_d^B + R\Delta D_s^B)(1-y)^2 + \right. \\ &\quad \left. [f_d^N + Rf_s^N + h_N (\Delta f_d^N + R\Delta f_s^N) \Delta D_u^B] \right\} \times \left\{ (f_u^N - h_N \Delta f_u^N)(D_d^B + RD_s^B)(1-y)^2 + \right. \\ &\quad \left. [f_d^N + Rf_s^N + h_N (\Delta f_d^N + R\Delta f_s^N) D_u^B] \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (15)$$

where $R \equiv \tan^2 \theta_C \approx 0.056$.

Particularly, if the initial nucleon isn't polarized then the longitudinal polarization degrees (14) and (15) have the form:

$$P_B^{\nu_{\mu}N}(h_N) = -\frac{(f_d^N + Rf_s^N)\Delta D_u^B - (1-y)^2 f_u^N(\Delta D_d^B + R\Delta D_s^B)}{(f_d^N + Rf_s^N)D_u^B + (1-y)^2 f_u^N(D_d^B + RD_s^B)}, \quad (16)$$

$$P_B^{\bar{\nu}_{\mu}N}(h_N) = -\frac{f_u^N(\Delta D_d^B + R\Delta D_s^B)(1-y)^2 - (f_d^N + Rf_s^N)\Delta D_u^B}{f_u^N(D_d^B + RD_s^B)(1-y)^2 + (f_d^N + Rf_s^N)D_u^B}. \quad (17)$$

The above mentioned formulae for longitudinal polarization degree (14)-(17) are true in the case of creation of arbitrary baryon B with spin $\frac{1}{2}$. For example, let's consider the semi-inclusive creation of Λ^0 -hyperon in $\nu_\mu + N \Rightarrow \nu_\mu + \Lambda^0 + X$ and $\bar{\nu}_\mu + N \Rightarrow \bar{\nu}_\mu + \Lambda^0 + X$ reactions. In this case we can neglect the fragmentation functions of antiquarks in Λ^0 -hyperon, as the contribution is small at big x and z .

Then we obtain the simple expressions for longitudinal polarization degree of Λ^0 -hyperon:

$$P_{\Lambda}^{\nu_{\mu}N}(h_N = \pm 1) = P_{\Lambda}^{\bar{\nu}_{\mu}N} = -\frac{\Delta D_u^\Lambda(z)}{D_u^\Lambda(z)} \quad (18)$$

$$P_{\Lambda}^{\bar{\nu}_{\mu}N}(h_N = \pm 1) = P_{\Lambda}^{\nu_{\mu}N} = \frac{\Delta D_d^\Lambda(z) + R\Delta D_s^\Lambda(z)}{D_d^\Lambda(z) + RD_s^\Lambda(z)}. \quad (19)$$

As it is seen, the longitudinal polarization of Λ^0 -hyperon is only z function and doesn't depend on variables x and y . The study of this polarization can give the valuable

information about fragmentation function of polarized quark in polarized baryon.

The analogous results are obtained in semi-inclusive processes $\mu^- + N \Rightarrow \nu_\mu + B + X$, $\mu^+ + N \Rightarrow \bar{\nu}_\mu + B + X$. The formulae:

$$\begin{aligned} \mu^- + q &\Rightarrow \nu_\mu + q', \text{ where } q = u, q' = d, s; \\ \mu^- + \bar{q} &\Rightarrow \nu_\mu + \bar{q}', \text{ where } \bar{q} = \bar{d}, \bar{s}, \bar{q}' = \bar{u}; \\ \mu^+ + q &\Rightarrow \bar{\nu}_\mu + q', \text{ where } q = d, s, q' = u; \\ \mu^+ + \bar{q} &\Rightarrow \bar{\nu}_\mu + \bar{q}', \text{ where } \bar{q} = \bar{u}, \bar{q}' = \bar{d}, \bar{s}. \end{aligned} \quad (20)$$

are parton subprocesses of these reactions.

The differential cross-sections of these subruns are defined by the same expressions as the subprocess cross-sections are defined $\nu_\mu q \Rightarrow \mu^- q'$, $\nu_\mu \bar{q} \Rightarrow \mu^- \bar{q}'$, $\bar{\nu}_\mu q \Rightarrow \mu^+ q'$, $\bar{\nu}_\mu \bar{q} \Rightarrow \mu^+ \bar{q}'$. Then we obtain the expression for longitudinal polarization of baryon:

1) in $\mu^- + N \Rightarrow \nu_\mu + B + X$ reaction

$$\begin{aligned} P_B^{\mu^-N}(h_N) &= \left\{ (-f_u^N + h_N \Delta f_u^N)(\Delta D_d^B + R\Delta D_s^B) + \right. \\ &+ (1-y)^2 \Delta D_u^B \left[f_d^N + Rf_s^N + h_N (\Delta f_d^N + R\Delta f_s^N) \right] \left. \right\} \times \left\{ (f_u^N - h_N \Delta f_u^N)(D_d^B + RD_s^B) + \right. \\ &+ (1-y)^2 D_u^B \left[f_d^N + Rf_s^N + h_N \Delta f_d^N + R\Delta f_s^N \right] \left. \right\}^{-1}; \end{aligned} \quad (21)$$

2) in $\mu^+ + N \Rightarrow \bar{\nu}_\mu + B + X$ reaction

$$\begin{aligned} P_B^{\mu^+N}(h_N) &= \left\{ -(1-y)^2 \Delta D_u^B \left[f_d^N + Rf_s^N - h_N (\Delta f_d^N + R\Delta f_s^N) \right] + \right. \\ &+ (\Delta D_d^B + R\Delta D_s^B)(f_u^N + h_N \Delta f_u^N) \left. \right\} \times \left\{ (1-y)^2 D_u^B \left[f_d^N + Rf_s^N - h_N (\Delta f_d^N + R\Delta f_s^N) \right] + \right. \\ &+ (D_d^B + RD_s^B)(f_u^N + h_N \Delta f_u^N) \left. \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (22)$$

If nucleon isn't polarized, then longitudinal polarization degree of baryon has the form:

$$P_B^{\mu^-N} = \frac{-f_u^N(\Delta D_d^B + R\Delta D_s^B) + (1-y)^2 \Delta D_u^B(\Delta f_d^N + R\Delta f_s^N)}{f_u^N(D_d^B + RD_s^B) + (1-y)^2 D_u^B(f_d^N + Rf_s^N)}, \quad (23)$$

$$P_B^{\mu^+N} = \frac{-(1-y)^2 \Delta D_u^B(f_d^N + Rf_s^N) + f_u^N(\Delta D_d^B + R\Delta D_s^B)}{(1-y)^2 D_u^B(f_d^N + Rf_s^N) + f_u^N(D_d^B + RD_s^B)}. \quad (24)$$

The obtained expressions for longitudinal polarization degree of baryon are essentially simplified, if we can neglect the antiquark contribution in fragmentation functions:

$$P_{\Lambda}^{(\mu^-N)}(h_N = \pm 1) = P_{\Lambda}^{(\mu^-N)} = \frac{-\Delta D_d^{\Lambda}(z) - R\Delta D_s^{\Lambda}(z)}{D_d^{\Lambda}(z) + R D_s^{\Lambda}(z)}, \quad (25)$$

$$P_{\Lambda}^{(\mu^+N)}(h_N = \pm 1) = P_{\Lambda}^{(\mu^+N)} = \frac{-\Delta D_u^{\Lambda}(z)}{D_u^{\Lambda}}. \quad (26)$$

It is seen, that baryon longitudinal polarization doesn't depend on x and y variables in this approximation.

According to [4,5], fragmentation functions of polarized quarks in polarized Λ^0 -hyperon can be parametrized in the form:

$$\begin{aligned} \Delta D_s^{\Lambda}(z, Q^2) &= z^{\alpha} D_s^{\Lambda}(z, Q^2), \\ \Delta D_u^{\Lambda}(z, Q^2) &= \Delta D_d^{\Lambda}(z, Q^2) = N_u \Delta D_s^{\Lambda}(z, Q^2), \end{aligned} \quad (27)$$

α and N_u parameters are chosen as follows:

Parameter	Variant 1	Variant 2
α	0.27	1.66
N_u	-0.2	1

The dependence of longitudinal polarization degree of Λ^0 -hyperon (18) and (19) on z variable is given on the fig.1. As it is seen, the longitudinal polarization degree of Λ^0 -hyperon is positive one in variant 1 and monotonically increases when z variable increase (in this variant the main contribution in polarization of Λ^0 -hyperon is made by s -quark, the contribution of u - and d -quarks in polarization is about 20%). The polarization of Λ^0 -hyperon in variant 2 is negative one, increases on module when z increases and achieves 1 value in the spectrum end (in this variant the contributions in polarization of Λ^0 -hyperon of u -, d - and s -quarks are similar: $\Delta D_u^{\Lambda} = \Delta D_d^{\Lambda} = \Delta D_s^{\Lambda}$). Note, that in this case the polarization of Λ^0 -hyperon is similar in all reactions.

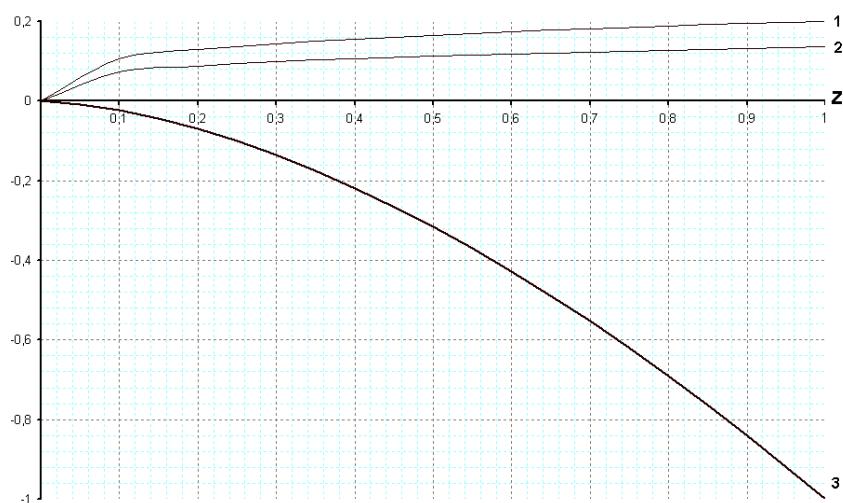


Fig.1. The dependence of Λ^0 -hyperon on z variable in $\nu_{\mu}N \Rightarrow \mu^- \Lambda^0 X$ (curves 1 and 3) and $\bar{\nu}_{\mu}N \Rightarrow \mu^+ \Lambda^0 X$ (curves 2 and 4).

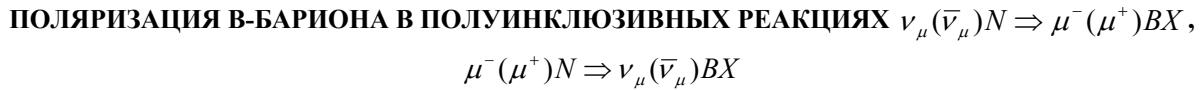
-
- | | |
|---|--|
| [1] S.K. Abdullayev, A.I. Mukhtarov, M.Sh. Godjayev. Fizika, 2003, №1, p.38. | [3] S.K. Abdullayev, A.I. Mukhtarov, S.M. Ragimova. Fizika, 2005, №3, p53. |
| [2] S.K. Abdullayev, A.I. Muktarov, M.S. Qocayev. Baki Universitetinin xekerleri, 2002, №4 s.5. | [4] Y. Koike, J. Nagashima. hep-ph/0302061, 2003. |
| | [5] D. De Florian, M. Stratmann, W. Vogelsang. Phys. Rev. D, 1998, №9, p.5811. |

S.Q. Abdullayev, A.I. Muxtarov

YARIMINKLÜZİV $\nu_{\mu}(\bar{\nu}_{\mu})N \Rightarrow \mu^-(\mu^+)BX$, $\mu^-(\mu^+)N \Rightarrow \nu_{\mu}(\bar{\nu}_{\mu})BX$ PROSES'LƏRİNĐƏ B-BARIÖNUN POLYARİZASİYASI

Kvark-parton modeli çərçivəsində yarımkıluziv $\nu_{\mu}(\bar{\nu}_{\mu}) + N \Rightarrow \mu^-(\mu^+) + B + X$ və $\mu^-(\mu^+) + N \Rightarrow \nu_{\mu}(\bar{\nu}_{\mu}) + B + X$ proseslərinin effektiv kəsikləri üçün ümumi ifadələr alınmışdır. Λ^0 -hiperonun uzununa poliarizasiya dərəcəsi təyin edilmişdir. Göstərilmişdir ki, fragmentasiya funksiyalarına antikvarkların payı nəzərə alınmazsa, Λ^0 -hiperonun uzununa poliarizasiya dərəcəsi yalnız z dəyişənin funksiyası olub, x və y dəyişənlərindən asılı deyildir. Poliarizasiya olunmuş kvarkların poliarizasiya olunmuş Λ^0 -hiperonu fragmentasiya funksiyalarını müxtalif şəkildə seçməklə, Λ^0 -hiperonun uzununa poliarizasiya dərəcəsinin z dəyişənindən asılılığı tədqiq edilmişdir.

С.К. Абдуллаев, А.И. Мухтаров



В рамках кварк-парточной модели получены общие выражения для эффективных сечений полуинклюзивных реакций $\nu_\mu(\bar{\nu}_\mu) + N \Rightarrow \mu^-(\mu^+) + B + X$ и $\mu^-(\mu^+) + N \Rightarrow \nu_\mu(\bar{\nu}_\mu) + B + X$. Определена степень продольной поляризации Λ^0 -гиперона. Показано, что если пренебречь вкладом антикварков в функции фрагментации, то продольная поляризация Λ^0 -гиперона является функцией только z , а от переменных x и y она не зависит. Исследована зависимость степени продольной поляризации Λ^0 -гиперона от переменной z в различных вариантах выбора функций фрагментации поляризованного кварка в поляризованный Λ^0 -гиперон.

Received: 12.12.07

THE INFLUENCE OF ELECTROTREATMENT ON MECHANICAL AND ELECTRIC DURABILITIES OF COMPOSITIONS ON THE BASE OF POLYMERS AND PIEZOCERAMICS

S.A. ABASOV, H.S. IBRAGIMOVA

Institute of Physics of NAS of Azerbaijan, Baku, AZ-1143, H. Javid av., 33

M.A. RAMAZANOV

Baku State University, AZ-1148, Z. Halilov str., 23

The influence of preliminary electrotreatment on mechanical and electric composition durabilities on the base of polyethylene (PE), polyvinylidene fluoride (PVDF) and piezoceramic (PCR5) is investigated. It is shown, that mechanical and electric durabilities of PE+30vol%PCR5 and PVDF +30vol%PCR5 compositions increase at first and then decrease in the dependence on electric field intensity of E_{treat} electrotreatment, that is connected with increase and decrease of interphase interactions.

The study of electrotreatment influence on composition strength properties on the base of polymers and piezoceramics presents the scientific and practical interest as they are the main elements in the devices of different sensing elements and transformers and are treated by the influence of external factors, including electric field [1-3].

In the given work the investigation results of electrotreatment influence on mechanical and electric durabilities of PE+30vol%PCR5 and PVDF+30vol%PCR5 compositions are presented.

PCR5 piezoceramics has the content of zirconatotitanate-lead (ZTL) and the rhombohedral structure.

The compositions are prepared by the method of hot pressing of mechanical mixture from piezoceramics powders PCR5 and PE and PVDF polymers separately at melting point of polymer matrix under the pressure 150 MPa during 10 min with the postcooling.

The logarithm dependence of mechanical durability $\lg \tau_\sigma$ on mechanical bursting stress σ for PE+30vol%PCR5, preliminary treated by electrotreatment at different values of electric field intensity E_{treat} are presented on the fig. 1. It is seen, that $\lg \tau_\sigma$ linearly decreases in the dependence on σ in all cases, i.e. the exponential dependence takes place

$$\tau_\sigma = A e^{\alpha \sigma}, \quad (1)$$

where A and α are parameters, depending on the nature of investigated material and test temperature on mechanical durability.

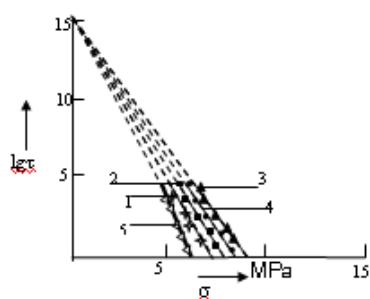


Fig. 1. The dependence of mechanical durability of PE+30vol%PCR5 compositions preliminary treated by electrotreatment on the mechanical bursting stress: 1- $E=0$; 2- $E=10$; 3- $E=11$; 4- $E=12$; 5- $E=14 \cdot 10^6$ V/m.

From the fig.1, it is also seen, that the mechanical durability $\lg \tau_\sigma$ of PE+30vol%PCR5 compositions increases at first and then decreases in the dependence on electrotreatment E_{treat} intensity at other equal conditions.

The dependences of logarithm of electric durability $\lg \tau_E$ on breakdown electric field intensity E for PE+30vol%PCR5 compositions, preliminary treated by electrotreatment at different values of electric field intensity E_{treat} are given on the fig.2. It is seen, that here the exponential dependence is also carried out:

$$\tau_E = B e^{-\beta E}, \quad (2)$$

where B and β are parameters, depending on the nature of investigated material and test temperature on electric durability.

From the fig. 2 it is also seen, that here the electric durability $\lg \tau_E$ of PE+30vol%PCR5 compositions in the dependence on electrotreatment E_{treat} intensity firstly increases, and further decreases at other conditions.

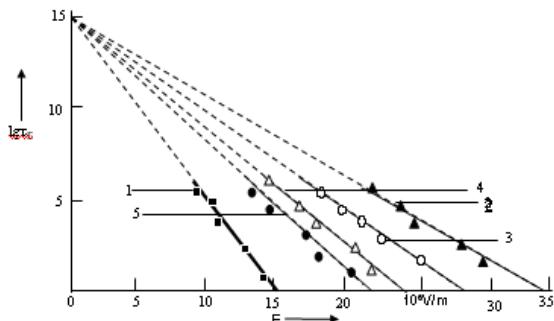


Fig. 2. The dependence of electric durability of PE+30vol%PCR5 compositions preliminary treated by electrotreatment on electric field intensity; 1- $E_{treat}=0$; 2- $E_{treat}=10$; 3- $E_{treat}=11$; 4- $E_{treat}=12$; 5- $E_{treat}=14 \cdot 10^6$ V/m.

The dependences of $\lg \tau_\sigma$ on σ and $\lg \tau_E$ on E for PVDF+30vol%PCR5 compositions preliminary treated by electrotreatment at different values of electric field intensity E_{treat} are shown on the figures 3 and 4. It is seen, that the exponential dependences (1) and (2) take place for PVDF+30vol%PCR5 compositions. By other hand, as it is seen from the figures 3 and 4, the mechanical durability $\lg \tau_\sigma$ and electric one $\lg \tau_E$ of PVDF+30vol%PCR5 compositions in

the dependence of electrotreatment E_{treat} intensity increase at first and then decrease at other equal conditions.

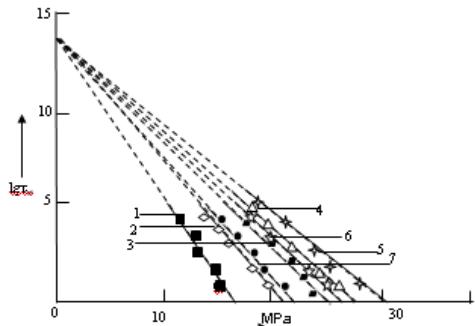


Fig. 3. The dependence of mechanical durability of PVDF+30vol%PCR5 compositions preliminary treated by electrotreatment on mechanical bursting stress;
1- $E_{treat} = 0$; 2- $E_{treat} = 3$; 3- $E_{treat} = 5$; 4- $E_{treat} = 8$; 5- $E_{treat} = 10$; 6- $E_{treat} = 12$; 7- $E_{treat} = 15 \cdot 10^6 \text{ V/m}$.

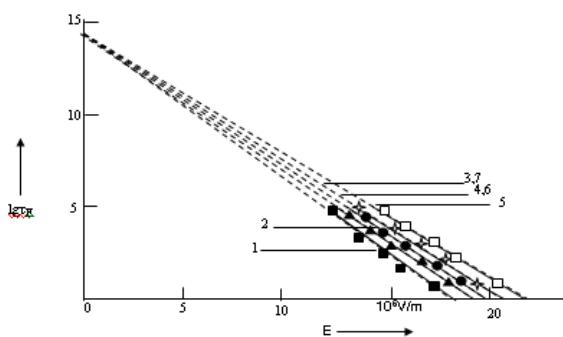


Fig. 4. The dependence of electric durability of PVDF+30vol%PCR5 compositions preliminary treated by electrotreatment on electric field intensity;
1- $E_{treat} = 0$; 2- $E_{treat} = 3$; 3- $E_{treat} = 5$; 4- $E_{treat} = 8$; 5- $E_{treat} = 10$; 6- $E = 12$; 7- $E_{treat} = 15 \cdot 10^6 \text{ V/m}$.

The fact, that dependences $\lg \tau_\sigma$ on σ and $\lg \tau_E$ on E at extrapolation $\sigma=0$ and $E=0$ cross at a point of ordinate axis on the figures 1,2,3 and 4, pays attention. By other words, A and B parameters in formulae (1) and (2) are constant, and changes of strength properties (of mechanical and electric durabilities) reflect in changes of α and β parameters.

It is known, that temperature-force dependence of mechanical durability $\tau_\sigma=f(T, \sigma)$ of polymer compositions is expressed by Jurkov's formula [4]:

$$\tau_\sigma = \tau_0 e^{\frac{U_0 - \gamma\sigma}{KT}} \quad (3)$$

and temperature-field dependence of electric one $\tau_E=f(T, E)$ of polymer compositions is expressed by formula, which is analogical to Jurkov's one:

$$\tau_E = \tau_0 e^{\frac{W_0 - \chi E}{KT}}. \quad (4)$$

Here U_0 and W_0 parameters are activation energies of processes of mechanical and electric destructions, and χ and γ are structural-sensitive coefficients, correspondingly. From the comparison of formula (1) with formula (2) and formula (2) with formula (4) we can write the following expressions:

$$A = \tau_0 e^{\frac{U_0}{KT}}, \quad \alpha = \frac{\gamma}{KT}$$

$$B = \tau_0 e^{\frac{W_0}{KT}}, \quad \beta = \frac{\chi}{KT}$$

From the figures 1-4 it is followed that $A=const$ and $B=const$ at $T=const$, therefore $U_0=const$ and $W_0=const$. This means, that the changes of mechanical and electric durabilities of PE+30vol%PCR5 and PVDF +30vol%PCR5 compositions in the dependence on intensity E_{treat} at their electrotreatment don't reflect in changes of U_0 and W_0 , i.e. they stay constant (permanent) and these changes are connected with the ones of structural-sensitive coefficients χ and γ , since α and β parameters change at that. Consequently, the values of activation energies of mechanical destruction U_0 and electric one W_0 stay constant at preliminary electrotreatment of PE+30vol%PCR5 and PVDF +30vol%PCR5 compositions, and changes of their strength properties in the dependence on E_{treat} are connected with the ones of physical structure, that reflects in the changes of structural-sensitive coefficients γ and χ .

The observable changes (increase and decrease) of mechanical and electric durabilities of investigated compositions in the dependence on electrotreatment E_{treat} intensity, probably, are connected with the ones (amplification and weakening) of interphase interactions.

- [1] S.A. Abasov, M.A. Ramazanov, Kh.S. Ibragimova, Z.E. Mustafaev. Fizika i Khimiya obrabotki materialov, 2003, №5, c.87-88. (in Russian)
- [2] Kh.S. Ibragimova, M.A. Ramazanov, S.A. Abasov. Problemi energetiki, 2004, №2, c. 26-29. (in Russian)
- [3] M.A. Ramazanov, Kh.S. Ibragimova, S.A. Abasov,

- A.M. Gasanov. Elektronnaya obrabotka materialov. 2005, №4, c.57-61. (in Russian)
- [4] S.N. Churkov, S.A. Abasov. Visokomolek. soed., 1961, t.3, №3, c.441-449. (in Russian)
- [5] S.A. Abasov, Z.Ch. Efendiyeva. Problemi energetiki. 2000, №1, c. 80-86. (in Russian)

S.A. Abasov, M.Ə. Ramazanov, H.S. İbrahimova

POLİMERLƏR VƏ PYEZOKERAMİKA ƏSASINDA ALINMIŞ KOMPOZİSİYALARIN MEXANIKİ VƏ ELEKTRİK YAŞAMA MÜDDƏTLƏRİNƏ ELEKTRİK SAHƏSİNDE İŞLƏNMƏNİN TƏSİRİ

Polietilen (PE), polivinilidenftorid (PVDF) və PKR5 pyezokeramikası əsasında alınmış kompozisiyaların mexaniki və elektrik yaşama müddətlərinə onların əvvəlcədən elektrik sahəsində işlənmənin təsiri tədqiq edilmişdir. Göstərilmişdir ki, elektrik sahəsində işlənmənin E_{isl}

intensivliyindən asılı olaraq PE+30h%PKR5 və PVDF+30h%PKR5 kompozisiyalarının mexaniki və elektrik yaşama müddətləri əvvəlcə artır və sonradan isə azalırlar. Bu isə fazalararası qarşılıqlı təsirin artması və azalması ilə əlaqədardır.

С.А. Абасов, М.А. Рамазанов, Х.С. Ибрагимова

**ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРООБРАБОТКИ НА МЕХАНИЧЕСКУЮ И ЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ ДОЛГОВЕЧНОСТЬ
КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРОВ И ПЬЕЗОКЕРАМИКИ**

Исследовано влияние предварительной электрообработки на механическую и электрическую долговечность композиций на основе полиэтилена (ПЭ), поливинилиденфторида (ПВДФ) и пьезокерамики ПКР5. Показано, что в зависимости от напряженности электрического поля электрообработки $E_{\text{обр.}}$ механическая и электрическая долговечности композиций ПЭ+30об.%ПКР5 и ПВДФ+30об.%ПКР5 сначала увеличиваются, а затем уменьшаются, что связано с усилением и ослаблением межфазных взаимодействий.

Received: 16.01.08

ZƏİF LEGİRƏ OLUNMUŞ *n*-Si ALTLIQINDA FORMALAŞDIRILMIŞ MAKROMƏSAMƏLİ SİLİŞİUMDA XÜSUSİ MÜQAVİMƏT VƏ HOLL EFFEKTİ

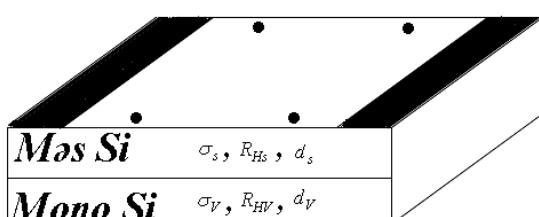
H.Ə. HƏSƏNOV

MTN-in H. Əliyev adına Akademiyası

Məqalə fosforla zəif legirə olunmuş *n*-Si altlığında formalasdırılmış makroməsaməli silisiumda xüsusi müqavimət və Holl effektinin temperatur asılılıqlarının tədqiqinə həsr olunmuşdur. MS-in formalasdırılması prosesində yaranan hidrogen atomları tərəfindən aşqar atomlarının passivlaşdırılməsi prosesinin xarakteri təhlil edilmişdir. Məsamə divarlarında yaranan yoxsullaşmış oblastların MS-in elektrik xassələrinə təsiri tədqiq edilmişdir.

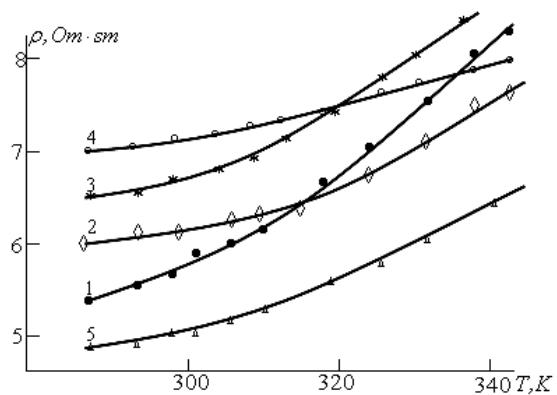
Təqdim olunmuş işdə məqsəd-silisium altlıq/məsaməli silisium (MS) sistemində (silisium altlıq xüsusi müqaviməti $4,5 \text{ Om} \cdot \text{sm}$ və konsentrasiyası $n=10^{15} \text{ sm}^{-3}$ olan (100) orientasiyalı fosforla legirə olunmuşdur) xüsusi müqavimət və Holl effektinin tədqiq olunmasıdır. MS təbəqələri plavik turşusunun 48%-li məhlulunda $10 \frac{\text{mA}}{\text{sm}^2}$ cərəyan sıxlığında alınmışdır. Anodlaşma müddətinin 10 dəqiqədən 60 dəqiqəyə qədər dəyişməsi MS təbəqənin qalınlığını 25mkm-dan 100mkm-ya qədər, çəki məsaməliliyini isə 5%-dən 10%-ə qədər artırır. Rastr elektron və akustik mikroskopların köməyiylə aparılan tədqiqatlar göstərir ki, MS strukturun səthi (100) oxuna paralel yönələn, bir-birindən $3 \div 10 \text{ mkm}$ məsafədə yerləşən, diametri $1,5 \text{ mkm}$ olan iri silindrik məsamələrlə xarakterizə olunur. MS səthindəki amorf təbəqə yüksəkzellikli boşalmanın karbonfluor-oksigen plazmasında plazma-kimyəvi aşılama metodu vasitəsilə ləğv edilmişdir. Tədqiq olunan nümunələrin xarici görkəmi 1 sayılı şəkildəki təsvirə uyğundur. Al/MS kontaktindəki omikliyin tədqiqi göstərdi ki, kiçik sürüşmələr oblastında kontakt kvaziomikdir və keçid xüsusi müqaviməti $0,2 \div 12 \text{ Om} \cdot \text{sm}^2$ -na bərabərdir.

2 və 3 sayılı şəkillərdə iki təbəqəli MS/ silisium altlıq strukturu üçün xüsusi müqavimət və Holl əmsalının temperatur asılılıqları göstərilmişdir. 2 sayılı şəkildən görünür ki, otaq temperaturları oblastında anod emalı müddətinin artması iki təbəqəli strukturun xüsusi müqavimətini artırır. Temperatur artdıqca ikitəbəqəlt strukturun xüsusi müqaviməti əvvəlki ki-mi ilkin monosilisiumun xüsusi müqavimətindən çox olsa da, onun temperatur asılılığının xarakteri bir qədər dəyişir. Holl əmsali ilkin monosilisiumun Holl əmsalından böyük olur və otaq temperaturunda $(6,9 \div 7,9) \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{Kl}$ -a bərabər olur.

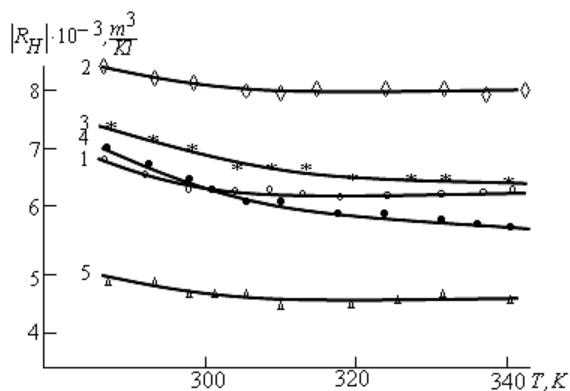


Şək. 1. Holl effektinin ölçüləsi üçün ikitəbəqəli məsaməli Si/Si strukturu

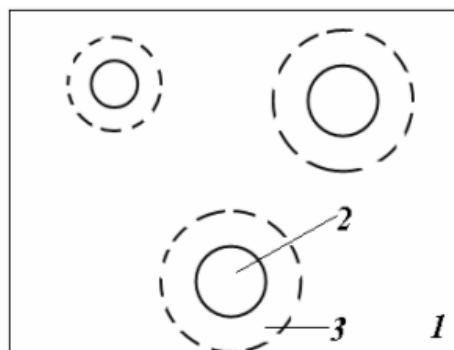
Alınmış eksperimental nəticələri təhlil etmək üçün Petris modelindən istifadə olunmuşdur. Bu model MS həcmimin orta qiymətinə görə P_{MS} xüsusi müqaviməti və R_{HMS} Holl əmsalını təyin etməyə imkan verir.



Şək. 2. Ilkin silisium (5) və ikitəbəqəli strukturların (1-4) müxtəlif anodlaşma müddətlərində xüsusi müqavimətlərinin temperatur asılılıqları. $t_\alpha = 1 \div 20; 2 \div 30; 3 \div 40; 4 \div 60$;



Şək. 3. Ilkin silisium (5) və ikitəbəqəli strukturların (1-4) Holl əmsallarının temperatur asılılıqları. Nümunələrin nömrələri 2 sayılı şəkildəki nömrələrə uyğundur.



Şək. 4. Məsamələr ətrafındakı yoxsullaşmış oblastlar. 1- monokristallik matris, 2-məsamə, 3- yoxsullaşmış oblast.

Hesablamalar zamanı ilkin silisium partiyasının xüsusi müqavimətinin 15%-lik kənara çıxmaları nəzərə alınmışdır. Hesablamaların 1 sayılı cədvəldə göstərilən nəticələri sübut edir ki, MS təbəqəsinin orta xüsusi müqaviməti monosilisium müqavimətindən $1,5 \div 15$ dəfə böyükdür.

Cədvəl 1

Petrisin ikitəbəqəli modelinə əsasən aparılan hesablamaların nəticələri

Nümunənin nömrəsi	t_α dəq.	d_{MS} mkm	P_{MS} , Om·sm	R_{HMS} , m ³ /Kl
1	20	48	$7,2 \div 9,5$	$(-0,03 \div 0,04)$
2	30	56	$12,4 \div 24,2$	$(-0,23 \div 0,28)$
3	40	67	$27,2 \div 62,6$	$(-0,69 \div 0,72)$
4	60	100	$26,6 \div 69$	$(-0,40 \div 0,48)$

Yoxsullaşmış oblastların peyda olması faktını eksperimental Holl ölçmələri təsdiq edir. Məlumdur ki, elektronların konsentrasiyası ilə Holl əmsalı arasında

$$n = \frac{A_1}{e \cdot R_{HMS}} \quad (1)$$

münasibəti doğrudur. Burada $A=1$, e -elektronun yüküdür. 1 sayılı cədvəldən göründür ki, məsaməli silisiumdakı Holl əmsalının qiyməti monokristalltk silisiumdakından bir neçə tərtib böyük olur. Silindrik boşluqlara malik olan yarımkərəcicilər modelinə əsasən hesablanmış Holl əmsalı monoristallik silisiuma aiddir. Beləliklə, MS-in monokristallik matrisində yüksəkşəhiyicilərin yoxsullaşması faktı mövcuddur. Elektron konsentrasiyalarının matrisin həcmində görə orta qiyməti anod emalı müddəti 20 dəqiqə olduqda $(1,6 \div 2,1) \cdot 10^{14} \text{ sm}^{-3}$, anod emalı müddəti 30÷60 dəqiqə olduqda isə $(0,9 \div 2,7) \cdot 10^{13} \text{ sm}^{-3}$ tərtibində olur. Anod emalının böyük müddətlərində MS-dəki elektron konsentrasiyası monosilisiumdakı elektron konsentrasiyasından təqribən 2 tərtib kiçik olur. Elektronların Holl ölçmələrindən

$$\mu_{MS} = \frac{R_{HMS}}{\rho_{MS}} \quad (2)$$

düsturu ilə təyin olunan yüvrülüyü ilkin silisiuma nəzərən anomal böyük olur ($10^3 \div 10^4 \frac{\text{sm}^2}{V \cdot \text{san}}$). Bu fakt MS matrisinin qeyri-bircins olmasına şəhadət verir. 4 sayılı şəkildə təsvir olunan modelə əsasən belə sistemlərdə Holl əmsali yüksəkşəhiyiciliyinə sahələrlə müəyyən edilir. Ona görə də belə sistemlərdə yüksəkşəhiyicilərin yüvrülünü (2) düsturuna əsasən hesablamalı olmaz. Holl effekti və elektrik keçiriciliyinin eksperimental qiymətləri 4 sayılı şəkildə göstərilmiş modelin düzgünlüyünü sübut edir. Beləliklə, eksperimentlərdən aydınlaşdırılmışdır ki, MS-də hər bir məsamənin ətrafında elektron konsentrasiyası monokristallik matrisin digər sahələrində olduğundan iki tərtib az olan yoxsullaşmış oblastlar yaranır.

Məsamələr ətrafında yoxsullaşmış oblastların yaranması mülahizəsi MS-yə həsr olunmuş [3,4] sayılı işlərdə də qeyd olunmuşdur. Belə oblastların mövcud olması mülahizəsi həm məsamənin yaranmasına həsr olunmuş modellərdə [3], həm də MS təbəqələrinin yüksək xüsusi müqavimətə malik olması

faktını izah etmək üçün istifadə edilmişdir. Yoxsullaşmış oblastların yaranması səbəbi kimi həm azməsaməli, həm də çoxməsaməli materiallarda mümkün ola bilən bir neçə fiziki hadisə nəzərdən keçirilmişdir.

İndi azməsaməli MS-də mümkün ola bilən fiziki hadisələrə baxaq. Ədəbiyyatda azməsaməli silisium üçün aşağıda qeyd olunanları mümkün sayırlar:

- Yüksəkşəhiyicilərin məsamə səthindəki «tələlər»də tutulması [4,5]. ([5] sayılı işdəki hesablamalara görə MS-də «tələ»lərin konsentrasiyası $\approx 10^{19} \text{ sm}^{-3}$ tərtibində olub, aşqar atomların sayına təqribən bərabər olur.

- Aşqar atomlarının matrisdən elektrolitə və məsamə divarına keçməsi,

- Aşqar atomlarının müxtəlif təsirlər, o cümlədən, hidrogen atomlarının passivləşdirici təsiri hesabına passivləşməsi [5,6],

- Məsamə kənarında zonaların əyilməsi nəticəsində aşqar atomların MS/ silisium altlıq sərhədindən məsamənin divarına keçməsi və ya altlığın dərinliyinə nüfuz etməsi [2].

Sadalanan səbəblərin hər biri məsamə ətrafında yüksəkşəhiyiciliyin yoxsullaşmış oblastların yaranmasını təsvir edə bilər. Lakin son vaxtlar [6,7] dəqiq isbat olunmuşdur ki, monokristallik matrisdə legirəedici atomların sayı dəyişilməz qalır. Ona görə də ikinci səbəb haqqında danışmaq mənasız olur.

Məlumdur ki, silisiuma atomar hidrogenin daxil edilməsi elektrik cəhətdən aktiv olan aşqar atomlarının passivləşməsi və qeyri-aktiv elektrik halına keçməsinə səbəb olur [8-13]. Bu effekt legirəedici aşqar atomlarının 99%-nin qeyri-aktiv elektrik halına keçdiyi akseptor (B, Al) passivləşməsində daha parlaq müşahidə olunur. Donorlarda (P, As, Sb) passivləşmə zəif olsa da, müəyyən şəraitdə silisiumu arsenlə zəif legirə etdikdə passivləşmə səviyyəsi 80%-ə [12,14], fosforla zəif legirə etdikdə isə 90%-ə çatır. Atomar hidrogenin passivləşdirici təsiri aşqar atom-silisium-hidrogen mürəkkəb kompleksinin yaranması ilə əlaqələndirilir. Komplekslərin konfiqurasiyası və rəbitələrin növləri donor və akseptor aşqarlar üçün fərqlidir.

MS-in formalışı prosesində hidrogenin mənbəyi elektrolit (HF) olduğundan, məsaməli təbəqənin həcmində kifayət qədər hidrogen olur. İkinci ion mass-spektroskopiyası və elastiki səpilmə metodları [15] ilə müəyyən olunmuşdur ki, məsaməlilik dərəcəsi və məsamə morfolojiyasından asılı olaraq, MS-də H/Si nisbəti 0,1÷0,6-ya çatır. [7] sayılı işdə p-Si alıqlı MS üçün infraqırmızı buraxma spektrindən hidrogenin konsentrasiyası üçün 10^{19} sm^{-3} tərtibi alınmışdır. Şübəhəsiz, hidrogenin müəyyən hissəsi məsamə divarlarında, o cümlədən, məsamələrin divarına çökmiş elektrokimyəvi reaksiya məhsullarının tərkibindədir. Lakin onun müəyyən hissəsi kristalltk matris həcmimin dərinliklərinə də nüfuz edə bilər. Bu versiyanın ilkin dolayı isbatti tutum ölçmələrinin təhlili sayəsində [16] sayılı işdə verilmişdir. İkinci ion mass-spektroskopiya və krater dərinliyinin ölçüləməsi metodları vasitəsilə aparılan tədqiqatlar hidrogenin məsamə divarına nüfuz etməsi versiyasını təsdiq etdi. Hidrogenin silisiuma daxil edilməsinin məsamə yaranması prosesinə təsiri [17,18] sayılı işlərdə araşdırılmışdır. Ona görə də MS-də ən geniş yayılan aşqar olan hidrogenin (50%-ə qədər) rolü və anodlaşmadada məsamə yaranması prosesi zamanı aşqar atomlarının hidrogenin təsiri ilə passivləşməsinin tədqiq edilməsi elmi və praktiki əhəmiyyətə malikdir. Eksperimental nəticələrin aşqar atomlarının hidrogenə passivləşdirilməsi modeli çərçivəsində təhlili aşağıda göstərilən qaydada aparılmışdır. Nəzərə alınmışdır ki, məsamələr diametri 0,8 mkm olan sütunvari

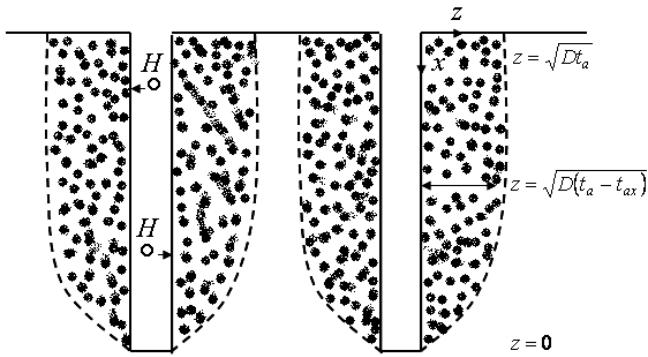
görünüşə malikdirlər və MS qalınlığının anodlaşma müddətindən asılılığı

$$d_{MS} \sim t_a \frac{1}{2} \quad (3)$$

qanunu ile verilir. Hidrogen silsium matrisə formalşmaqdə olan məsamədən radial istiqamətdə keçir. Bu prosesin dava-metmə müddəti məsamə səthindəki həmin nöqtənin anod emalı müddətinə uyğun olur (Şək. 5). Məsamənin mənbəyin-dəki nöqtələr üçün diffuziya müddəti bütöv MS təbəqəsinə formalşdırıran anod emalının tam müddətinə bərabər olur. Məsamə səthində mənbədən x məsafəsində yerləşən nöqtələr üçün t diffuziya müddəti, t_{ax} müddəti çıxılmaqla, anod emali-nin tam müddətinə bərabər olur. t_{ax} - məsamənin kristalın x dərinliyinə nüfuzetmə müddətidir. Hidrogenin silisiuma daxilolma dərinliyi z [19] sayılı işdə olan ifadəyə əsasən

$$z = (Dt)^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

düsturu vasisəsilə hesablanır. Burada, D - hidrogenin silisiuma diffuziya əmsali, t - diffuziyanın müddətidir.



Şək. 5. MS-in formalaşması prosesində hidrogenin məsamədən monokristallik matrişə keçidini təsvir edən model

Ədəbiyyat məlumatlarında hidrogenin silisiuma diffuziya əmsali üçün alınmış qiymətlərdə müəyyən səpilmə vardır [8,19]. Səpilmə hidrogenin atomar və ya molekulyar şəkildə diffuziya etməsi ilə yanaşı, silisiumdakı defektlər və aşqar atomları konsentrasiyasının diffuziya prosesinə həssas olması faktları ilə izah olunur. Hazırda zəif legirə olunmuş silisiumda atomar hidrogenin diffuziyasını hesablamaq üçün (məsələn, 8, 15-17 işlərində) Vieringen-Varmolts düsturundan istifadə edilir:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) = 9,4 \cdot 10^{-3} \exp\left(-\frac{0,48}{kT}\right), \frac{sm^2}{san}. \quad (5)$$

Burada, $0,48\text{-}eV$ -lərlə ifadə edilmiş E_α aktivləşmə enerjisi-
dir. Bu düstura əsasən $300K$ anodlaşma temperaturunda

diffuziya əmsali $D = 8,4 \cdot 10^{-11} \frac{sm^2}{san}$ olur. Bu o deməkdir ki,

10 dəqiqə diffuziya müddətində hidrogenin nüfuzetmə dərinliyi $z=2,2$ mkm, 30 dəqiqəlik diffuziya müddətində isə $z=3,9$ mkm olur.

Məsamə divarlarında z dərinliyinə nüfuz edən hidrogen asqar fosfor atomlarını passivləşdirir və nəticədə məsamə

divarlarında $z(x)$ səthi ilə məhdudlaşan yoxsullaşmış oblast yaranır. Ona görə də MS-də iki yüksəkomlu faza- məsamələr oblastı və məsamə ətrafindakı yoxsullaşmış oblast yaranır. Bunun üçün effektiv mühitlər modelində elektrik keçiriciliyi nöqtəyi-nəzərdən hər iki yüksəkomlu fazanın nəzərə alınması, yəni P məsaməlilik göstəricisi əvəzinə bu fazaları nəzərə ala bilən P_1 effektiv məsaməlilik göstəricisindən istifadə etmək lazımdır. P məsaməliliyi

$$P = \frac{n \cdot V_0}{V} \quad (6)$$

düsturuna əsasən hesablanır. Burada, $V-n$ sayıda məsaməyə malik olan konkret həcm, V_0-l tutduğu həcmidir. P_1 məsaməliliyi

$$P_1 = \frac{nV_1}{V} = \frac{n \cdot (V_0 + V^*)}{V} \quad (7)$$

düsturuna əsasən təyin olunur. Burada, V_{l-} - məsamə və onun ətrafındaki yoxsullaşmış oblastın tutduğu həcm, V_0 - bir məsamə ətrafındaki yoxsullaşmış oblastın tutduğu həcmidir. Verilmiş hal üçün

$$\frac{P_1}{P} = \frac{(V_0 + V^*)}{V_0} \quad (8)$$

düsturu doğrudur.

Bələliklə, (8) düsturunun köməyi ilə məsələnin konkret şərtlərində (silindrik məsamələrin radiusu $0,8\text{mkm}$, $T = 300K$, $D = 8,4 \cdot 10^{-11} \frac{\text{sm}^2}{\text{san}}$) P_1 effektiv məsaməli- liyini hesablamaq olar. Hesablamaların nəticələri 2 sayılı cədvəldə göstərilmişdir. Cədvəldən görünür ki, tədqiq olunan MS nümunələrində effektiv məsaməlilik çəki məsaməliyindən bir neçə dəfə artıqdır. 3 və 4 sayılı nümunələrdə effektiv məsaməlilik 70%-dən çoxdur və konkretləşdirilmir, çünki effektiv mühitlər modeli üçölçülü sistemda başvermənin astanasi ilə (70%) məhdudlaşır.

Cədvəl 2

Nümunənin nömrəsi	t_{α} , dəq.	d_{MS} , mkm	$P_0, \%$	$P_I, \%$	$P_2, \%$
1	20	48	5	31	23÷35
2	30	56	6	53	45÷68
3	40	67	7	>70	71÷86
4	60	100	9	>70	71÷87

Indi P_1 qiymətlərini effektiv məsaməliliyin elektrofiziki ölçmələrdən alınan P_2 qiymətləri ilə müqayisə edək. MS təbəqələrinin xüsusi müqavimətlərinin qiymətləri (cədvəl 1) və

$$\frac{\rho_{mes.S}}{\rho_{monoS}} = \frac{(1-P_2)}{(1+P_2)} \quad (9)$$

düsturuna əsasən P_2 -nin qiymətləri təyin edilmişdir. (9) düsturu effektiv mühitlər nəzəriyyəsində silindrik məsamələrə malik olan məsaməli varımcıcının (1) düsturuna

uyğundur. Effektiv məsaməliliyin P_1 nəzəri və P_2 eksperimental qiymətləri üst-üstə düşür. Deməli, aşqar atomlarının hidrogen tərəfindən passivləşdirilməsi nəzəriyyəsi tədqiq olu-

nan nümunələrin elektrik keçiriciliyinin eksperimental nəticələrini kəmiyyətcə yaxşı izah edir.

- [1] *П. Блад, Дж.В. Ортон.* Методы измерения электрических свойств полупроводников. Зарубежная радиоэлектроника. 1981, т.1, с.3-50.
- [2] *M.I.J.Beale, J.D.Bendjamin, M.J. Uren et al.* An experimental and theoretical study of the formation and microstructure of porous silicon. *J. Cryst. Growth.* 1985, V.73, P. 622-636.
- [3] *R.C. Anderson, R.S. Muller, C.W. Tobias.* *J. Electrochem. Soc.,* 1991, V.138, P.,3406-3411.
- [4] *D. Stievenard, D. Deremes.* *Appl. Phys. Lett.,* 1995, V.67, P. 1570-1572.
- [5] *M. Ben-Chorin.* Resistivity of porous silicon. In: Properties of porous silicon. Ed. by Canham L., DERA. 1997, P. 165-175.
- [6] *A. Grosman, C. Ortega.* Dopants in porous silicon. In: Properties of porous silicon. Ed. by Canham L., DERA. 1997, P. 328-335.
- [7] *G. Polisski, G. Dollinger, A. Bergmaier et al.* Acceptor depletion in p-type porous silicon. *Phys. Stat. Sol. (a).* 1998, V. 168, P. R1-R2.
- [8] *S.J. Pearton, J.W. Corbett, T.S. Shi.* Hydrogen in crystalline semiconductors. *Appl. Phys. A.* 1987, V.43, P. 153-195.
- [9] *B.L. Sopori, X. Deng, J.P. Benner et al.* Solar Energy Materials and Solar Cells. 1996, V.41/42, P. 160-169.
- [10] *N.S. Ritova.* FTP, 1991, T.25, S. 316-322. (in Russian)
- [11] *J.I. Pankove, P.J. Zanzucchi, C.W. Magee et al.* Hydrogen localization near boron in silicon. *Appl. Phys. Lett.* 1985, V.46, P. 421-423.
- [12] *N. Fukata, S. Sasaki, S. Fujimura et al.* *Jpn. J. Appl. Phys.* 1996, V.35, Part 1, P. 3937- 3941.
- [13] *Б.Н. Мукашев, М.Ф. Тамендаров, С.Ж. Токмолдин* ФТП, 1992, т.26, с. 1124-1134.
- [14] *K. Yokoto, K. Hosokawa, K. Terada et al.* *Jpn. J. Appl. Phys.* 1997, V.36, Part 1, P. 4355- 4358.
- [15] *A. Grosman, C. Ortega.* Chemical composition of fresh porous silicon. In: Properties of porous silicon. Ed. by Canham L., DERA. 1997, P. 145-154.
- [16] *P. Allongue, C. Henry de Villeneuve, L. Pinsard et al.* *Appl.Phys.Lett.,* 1995, V.67, P. 691
- [17] *P. Allongue, C. Henry de Villeneuve, M.C. Bernard et al.* Thin Sol.Films. 1997, v.297, p. 1
- [18] *S. Fellah, N. Gabouze, F. Ozanam et al.* *Phys. Stat. Sol. (a),* 2000, V.182, P.31-36.
- [19] *В.Б. Болмакс* Диффузия в полупроводниках.- М.: Наука, 1962, 412с.

G.A. Gasanov

**HALL EFFECT AND RESISTIVITY OF WEAKLY ALLOYED MACROPOROUS SILICON
FORMED ON n-Si BASE**

This article is dedicated to the research of temperature dependence of Hall effect and resistivity in macroporous silicon which is weakly alloyed with phosphorus and formed on *n*-Si base. The character of passivation process of admixture atoms via generated hydrogen atoms during MS formation process was investigated. The degraded range occurring on pore walls' influence on electrical properties of MS has been researched.

Г.А. Гасанов

**УДЕЛЬНОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ И ЭФФЕКТ ХОЛЛА В МАКРОПОРИСТОМ КРЕМНИИ,
ПОЛУЧЕННОМ НА СЛАБОЛЕГИРОВАННЫХ ПОДЛОЖКАХ n-Si**

Статья посвящена изучению температурных зависимостей удельного сопротивления и эффекта Холла в макропористом кремнии, полученном на слаболегированных подложках *n*-Si. Анализирован характер процесса пассивации примесных атомов атомами водорода выделившиеся из электролита в ходе формирования пористой структуры. Изучено влияние обедненных областей на электрические свойства пористого кремния.

Received: 16.01.08

ELEKTRİK QAZBOŞALMASININ TƏSİRİ ŞƏRAİTİNDƏ REALLAŞAN ADSORBSİYA PROSESLƏRİNİN FİZİKİ ANLAYIŞLARI

A.M. HƏŞİMOV, H.C. HÜSEYNOV, K.B. QURBANOV

Azərbaycan MEA Fizika Institutu, AZ-1143, Bakı ş., H.Cavid pr.33

R.A. MURADOVA

Azərbaycan Dövlət Neft Akademiyası, AZ-0010, Bakı, Azadlıq pr., 20

Məqalədə istilik elektrik stansiyalarında əsas yanacaq olaraq istifadə olunan təbii qazın zərərləri qaz qarışıqlarından təmizlənməsi üzrə işlənilmiş yeni effektiv üsul şərh olunur. Göstərilmişdir ki, elektrik qazboşalmalarının təsirlərinə əsaslanan işlənilmiş üsulu tətbiq edərək təbii qazın tərkibini H_2S zərərlə qaz qarışığından effektiv təmizləmək mümkündür. Elektrik qazboşalmasının təsiri şəraitində reallaşan adsorbsiya prosesinin fiziki mahiyyəti təhlil olunmuşdur.

Istilik elektrik stansiyalarının ekoloji təmizliyi aşağıdakı faktorlarla əlaqədar olur. Beynəlxalq ekspertlərin göndikləri nəticələrə əsasən istilik elektrik stansiyalarında yanacaq kimi istifadə olunun təbii yanacaqlar (təbii qaz, karbohidrogen mənşəli mayelər və bərk cisimlər) yanma müddətində ətraf mühiti zərərlə maddələrlə kifayat qədər çirkləndirirlər. Digər tərəfdən məlumdur ki, hazırda elektrik enerjisinin sənaye istehsalı 80% təbii yanacaqdan istifadə etməklə əldə olunur. Qeyd olunan vəziyyət istilik elektrik stansiyalarının ekoloji təminatlı istismar olunması üçün yeni texnologiyaların işlənilməsi zəruriyyətini irəli gətirir. Istilik elektrik stansiyalarının istismarı nəticəsində ətraf mühit CO , CO_2 , CH_4 , N_2O , NO_x , SO_2 , SO_3 , C_2H_4 , H_2S qazları və atmosferdə konversiya vasitəsi ilə bu qazların əmələ gətirdiyi bir sıra zərərlə qaz qarışıqları ilə çirklənmiş olur. Məsələn, ədəbiyyatda [1] qeyd olunur ki, havanın nisbi rütubəti 60% təşkil etdikdə SO_3 qazının 8%-i H_2SO_4 buxarına çevrilirsə, rütubət 80% olduqda isə SO_3 qazının 30%-i H_2SO_4 buxarına çevrilər.

Digər halda NO_2 qazının atmosferdə dissosiasiyyası nəticəsində ikinci reaksiyalar baş verərək ozon qazı yaranır və fotokimyəvi parçalanmanın son nəticəsində karbon oksidi, dioksid, üzvi aerozol əmələ gəlir. Azot oksidlərinin və karbohidrogenlərin birgə oksidləşməsi nəticəsində yaranan məhsullar və mümkün olan sonrakı reaksiyalar nəticəsində zərərlə təsirlərə malik maddələr əmələ gələrək atmosfer havasını çirkləndirir. Beləliklə, yuxarıda qeyd olunan proseslər və bir sıra digər proseslərin çoxluğu istilik elektrik stansiyası yerləşən ərazinin və onun yaxın ətrafinin atmosfer havasına mənfi təsir göstərərək biosferin çirklənməsinə səbəb olur. Yanacaq kimi istifadə olunan təbii qazın tərkibində hidrogen sulfidin (H_2S) mövcudluğu atmosfer havasının olduqca kəskin çirklənməsinə səbəb olur.

Istilik elektrik stansiyalarında ehtiyat yanacaq kimi istifadə olunan mazut maddəsinin kükürd birləşmələrindən təmizlənməsi, stansiyaların tullantı sularının xlorid, sulfat və karbohidrogen mənşəli maddələrdən təmizlənməsi eyni zamanda stansiyaların ekoloji məsələlərinin tərkib hissəsidir. Sənaye tullantı sularının təmizlənmədən təbii su hövzələrinə və yaxud torpaq sahələrinə atılması florani məhv edərək, torpaq sahələrinin duzlaşmasına səbəb olur.

Yuxarıda qeyd olunanları nəzərə alaraq istilik elektrik stansiyalarının ətraf mühitə zərərlə təsirinin qarşısını almaq üçün tətbiq edilən kompleks tədbirlər aşağıdakı məsələlərin həllini təmin etməlidir:

- Istilik elektrik stansiyalarının tüstü qazlarının ekoloji təmizliyi təmin olunmalı, onların tərkibindəki zərərlə qazların miqdarı zərərsiz həddə çatdırılmalıdır;

- Tərkibində kükürd birləşmələri olan qaz və maye yanacaq yanma prosesində əvvəl etibarlı təmizlənməlidir;

- Tullantı sular xlorid, sulfat, karbohidrogen mənşəli maddələrdən və sairə zərərlə komponentlərdən təmizlənməlidir;

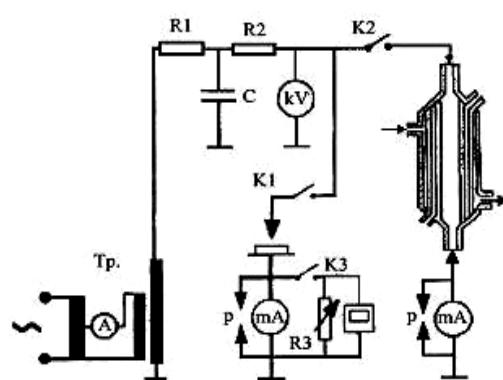
Yuxarıda qeyd olunan birinci bənd üzrə məsələlərin həlli adətən molekulyar süzgəclər, katalizatorlar, monoetanolamin və sairə kimyəvi maddələrdən istifadə olunan təmizləyici qurğular tətbiq etməklə yerinə yetirilir.

Ikinci bənd üzrə təmizləmə tədbirləri çox sayılı olaraq yanacağın kükürd birləşmələrindən təmizlənməsinə yönəldilir ki, bu da öz növbəsində yanma effektivliyini yüksəltməklə yanaşı ətraf mühitin qorunmasına xidmət edir. Qeyd etmək lazımdır ki, bu bənd üzrə tətbiq olunan üsullar əksər hallarda iqtisadi cəhətdən səmərəsiz olur və bu üsulların təkmilləşdirilməsinə ehtiyac duyulur. Bu halda daha effektiv üsulların işlənilməsi zərurliyi irəli gəlir. Istilik elektrik stansiyalarının tullantı sularının təmizlənməsində, yüksək təmizlik dərəcəsi təmin edən yeni üsulların işlənilməsi və tətbiq olunmasının zərurliyi müvafiq texniki ədəbiyyatda vurgulanır. Stansiyanın yerləşdiyi ərazinin 3000 m^2 sahəsinin olmasının zəruriyyəti, yüksək gərginlikli elektrik veriliş xətlərinin yaratdığı elektromaqnit sahəsinin mövcudluğu da ekoloji problemlərdəndir.

Enerji istehsalı sahəsi dünya dövlətlərində sənayenin əsas istehsal sahəsi hesab olundugundan enerji sistemlərinin ekoloji problemlərinin yeni texnologiyalar tətbiq etməklə həlli günün aktual məsələləri sırasına daxil olur.

Təqdim olunan məqalədə istilik elektrik stansiyalarında yanacaq kimi istifadə olunan təbii qazın tərkibinin H_2S qazından təmizlənməsində yeni üsullen işlənilməsi, prosesin tədqiqi və fiziki mahiyyətinin araşdırılması şərh olunmuşdur.

Tədqiqat obyekti olaraq tərkibində müxtəlif miqdarda H_2S qazı olan təbii qazdan istifadə edilmişdir.



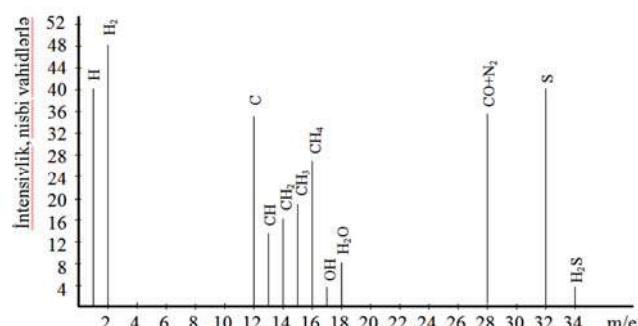
Şəkil 1.Ozonator qurğusunun elektrik dövrəsi.

ELEKTRİK QAZBOŞALMASININ TƏSİRİ ŞƏRAİTİNDE REALLAŞAN ADSORBSİYA PROSESLƏRİNİN FİZİKİ ANLAYISLARI

Güclü elektrik sahələrinin və elektrik qazboşalmalarının təsirləri, arakəsməli qazboşalması yaradan ozonator qurğusunun vasitəsilə əldə edilmişdir. Şəkil 1-də tədqiqatlarda istifadə edilən elektrik qurğusunun sxemi təqdim olunmuşdur.

İlk təcrübələrdə tərkibində 5% həcmi H_2S qazı olan təbii qaz, 0,1 m³/saat sürətlə ozonator qurğusundan keçirilərək, arakəsməli elektrik qazboşalmasının təsirlərinə məruz qalan halda, sistemdə qaz mühitinin tərkib dəyişiklikləri MSX-4 tipli, ucuş müddətli kütlə spektrometri vasitəsilə qeydə alınmışdır. Təcrübələrin davamında tərkibində müxtəlif miqdarda H_2S qazı olan təbii qazdan istifadə edərək qazboşalmasının elektrik sahəsinin qiymətini boşalma enerjisinin artması istiqamətində dəyişərək, tədqiqatlar yerinə yetirilmiş və həcmində CH_4 və H_2S qazlarının tərkibinin uyğun dəyişiklikləri qeydə alınmışdır.

Şəkil 2-də tədqiq edilən qaz qarışığının tərkib dəyişikliklərini eks etdirən kütlə spektri təqdim olunmuşdur.



Şəkil 2. Kütlə – spektroqramması.

Cədvəl 1-də şərh edilən təcrübələrdən alınmış nəticələr verilmişdir.

Cədvəl 1.

Elektrik qazboşalmalarının növü	Elektrik sahəsinin qiyməti, E, kV/sm	Ozonatorun girişində qazın tərkibi, % həcmi		Qazın verilmə sürəti m ³ /saat	Ozonatorun çıxısında qazın tərkibi, % həcmi		H_2S molekulasının təskiliçilərə bölünməsi, % həcmi
		CH_4	H_2S		CH_4	H_2S	
Arasıkəsilməli elektrik qazboşalması	40	95	5	0,1	95	0,6	99,4
	50	95	5	0,1	95	0,2	99,8
	60	95	5	0,1	95	0	100

Aparılan təcrübələrdən alınan nəticələrdən məlum olur ki, arakəsməli elektrik qazboşalmasının təsiri nəticəsində H_2S sistemi sadələşərək adsorbentlər tərəfində udulma sürəti yüksək olan ionları əmələ gətirir. Alınmış bu nəticələrə əsaslanaraq tərkibində 5% həcmi H_2S qazı olan təbii qazın,

yataqları Azərbaycan Respublikasında olan "Tovuz" təbii seolitində istifadə etməklə H_2S qazından, elektrik qazboşalmasının təsiri şəraitində, təmizlənməsi tədqiqatları aparılmışdır. Təcrübələrdən alınmış nəticələr cədvəl 2-də təqdim olunmuşdur.

Cədvəl 2

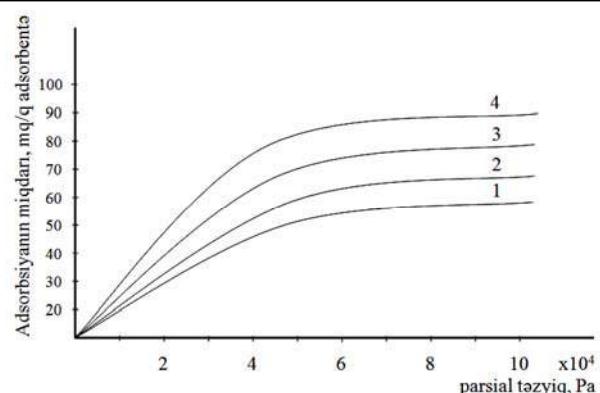
Təbii qazın H_2S qazından təmizlənməsi

Elektrik qazboşalmalarının növü	Elektrik sahəsinin qiyməti, E, kV/sm	Ozonatorun girişində qazın tərkibi, % həcmi		Qazın verilmə sürəti m ³ /saat	Ozonatorun çıxısında qazın tərkibi, % həcmi		Təbii qazın H_2S qazından təmizlənməsi, % həcmi
		CH_4	H_2S		CH_4	H_2S	
Arasıkəsilməli elektrik qazboşalması	40	95	0,8	0,1	95	0,2	99,8
	50	95	0,3	0,1	95	0	100
	60	95	0,1	0,1	95	0	100

Təcrübələrin davamında elektrik sahəsinin qiymətini yüksəltməklə "Tovuz" seolitində H_2S qazının adsorbsiyasının izotermələri (Şəkil 3), öyrənilmişdir.

Şəkildən göründüyü kimi tətbiq olunan elektrik sahəsinin yüksək qiymətlərdə adsorbsiyanın miqdarı $P=8 \cdot 10^4$ Pa təzyiqində, elektrik qazboşalmalarının təsir etmədiyi hala nisbətən 2 dəfə artır.

Elektrik qazboşalmalarının təsiri şəraitində adsorbsiya proseslərinin effektivliyinin yüksəlməsinə dair aparılan tədqiqatlarda müsbət nəticələr əldə edildikdən sonra prosesi optimallaşdırmaq məqsədi ilə təcrübələr müxtəlif təzyiqlərdə və "SH₄-H₂S" sistemində H_2S -in miqdarını 1-8% həcmi intervalda dəyişməklə yerinə yetirilmişdir.



Şəkil 3. Adsorbsiyanın izotermələri

1 - Qazboşalmasının təsiri olmayan hal;

2 - E = 40 kV/sm; 3 - E = 50 kV/sm; 4 - E = 60 kV/sm.

Müəyyən edilmişdir ki, H_2S qazının miqdarı tərkibdə 5%-dən (həcmi) çox olan hallarda "Tovuz" seolitinin tətbiqi effektiv təmizləmə prosesinə səbəb olmur. Qazboşalmasının qaz mühitinə təsiri nəticəsində qaz molekullarının dis-sosiasiyası, ionlaşma prosesinin baş verməsi, adsorbentlərdə elektrik yüklü vəziyyətlərin əmələ gəlməsi, qazboşalmasının

təsiri nəticəsində adsorbentlərin səthinin təmizlənməsi və qazboşalmasının təsiri vasitəsilə adsorbentdəki məsamələrin səthi üzrə diffuziya proseslərinin yer tutması və sürətlənməsi adsorbsiya effektliyinin yüksəlməsinə səbəb olan fiziki proseslərdir [2,3].

-
- [1] *K.M. Abdullayev, R.K. Məmmədov, Y.İ. Lətifov.* Enerji ehtiyatları, elektrik enerjisi istehsalı və ətraf mühit. Bakı, 2007, 407 s.
 - [2] *A.M. Gasimov, M.A. Gasanov, K.B. Gurbanov.* Elektron-naya obrabotka materialov, 2001, №4, s.44-46. (Rusca)
 - [3] *A.M. Gasimov, K.B. Gurbanov, M.A. Gasanov.* Fizika i khimiya obrabotki materialov, 2005, №2, s.86-88. (in Rusca)

A.M. Gashimov, G.J. Guseynov, R.A. Muradova, K.B. Gurbanov

ADSORPTION PROCESSES IN THE INFLUENCE CONDITIONS OF ELECTRIC CHARGES

The investigation results on adsorption refining of nature gas from hydrogen sulfide are given. It is established, that the increase of the efficiency of adsorption processes at the use of electric charge influences is possible. The possible factors, causing to increase of efficiency of adsorption processes are considered.

А.М. Гашимов, Г.Дж. Гусейнов, Р.А. Мурадова, К.Б. Гурбанов

АДСОРБЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В УСЛОВИЯХ ВОЗДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ РАЗРЯДОВ

Приведены результаты исследований по адсорбционной очистке природного газа от сероводорода. Установлено, что использование воздействий электрических разрядов предоставляет возможность повысить эффективность адсорбционных процессов. Рассматриваются возможные факторы, способствующие повышению эффективности адсорбционных процессов.

Received: 10.01.08

LİDOKAİN-HİDROXLORIDİN SUYUN STRUKTURUNA TƏSİRİ

E.Ə. MƏSİMOV, H.F. ABBASOV, K.M. BUDAQOV

Bakı Dövlət Universiteti, AZ-1143, Z. Xəlilov küç., 23, Azərbaycan

Lidokain-hidroxloridin suyun strukturuna təsiri alçaqtezlikli dielektrik spektroskopiya metodu ilə otaq temperaturunda (20°C), 20-200000 Hz tezlik intervalında öyrənilmişdir. Koul-Koul diaqramları əsasında məhluldakı su klasterlərinin ölçülərinin lidokain-hidroxloridin konsentrasiyasından asılılığı müəyyən edilmişdir.

Biooji sistemlərin funksional fəallığı onların mövcud olduğu su mühitinin termodinamik halından kəskin asılıdır [1-3]. Canlı orqanizmlərdə maddələrin daşınması, informasiyanın ötürülməsi və s. su mühitində baş verdiyindən suyun strukturunun dəyişməsi bu proseslərə ciddi təsir göstərir. Dogrudan da, yaxşı məlumdur ki, informasiyanın ötürülməsi sinir hüceyrələrinin – aksonların vasitəsilə həyata keçirilir. Informasiyanın aksonlarla ötürülməsi K^+ ionlarının hüceyrədaxili və hüceyrəxarici konsentrasiyalar fərqindən ciddi asılı olan membran potensialı ilə tənzimlənir. Bu ionların membrandan nəqli K^+ «nasosları» adlanan xüsusi növ zülalların fəaliyyəti ilə müəyyən olunur. Bu nasosların fəallığı isə onları əhatə edən su mühitinin strukturundan asılı olub K^+ ionlarının konsentrasiyasının hüceyrə membranının daxilində 0.140 mol/l, xaricində isə 0,04 mol/l qiymətində minimum olur və suyun termodinamik halından kəskin asılıdır [4].

Müxtəlif növ anestetik maddələrin, toksinlərin və s. canlı orqanizmlərə təsiri da suyun halının dəyişməsilə, daha dəqiq desək, suyun strukturlaşması ilə izah oluna bilər [5].

Biooji aktiv molekullar «hidrat mikrokristal» adlanan su layı ilə əhatə olunmuşdur və Polinqə görə anestetiklərin təsiri ilə bu hidrat komplekslərinin xassələrinin dəyişməsi narkoz hadisəsinə gətirib çıxarır. Hüceyrələrdən mərkəzi sinir sisteminə ötürürlən siqnalların ünvana çatmamasına və ya digər hüceyrələrdən gələn siqnallarla asinfaz olmasına səbəb olan hüceyrə elementi sudur.

Təcrübədən məlum olduğu kimi bir sıra qaz qarışıqları hidratlarının dağıılması təmiz maddələrin kristallhidratlarının dağıılma temperaturundan daha böyük temperaturlarda baş verir. Qaz hidratlarının dağıılma temperaturunun belə artması effekti «köməkçi» qaz effekti adlandırılmışdır. Bir qaz digər qazın hidratının ümumi dayanıqlığına kömək edir. Məsələn, xloroformun hidratının dağıılma temperaturu ksenonun təsirilə $15-20^{\circ}\text{C}$ artır (təmiz ksenon hidratının dağıılma temperaturu 0°C tərtibindədir).

Digər tərəfdən məlumdur ki, suda zəif həll olan bir sıra az saylı qeyri-elektrolitlərin (aminlər, fosfinlər, fosfatlar, efirlər və s.) suda həllolma qabiliyyətlərinin temperaturdan asılılığı anomal xarakter daşıyır. Belə maddələrin sulu məhlullarını qızdırıldıqda müəyyən temperaturda həllolan maddə suda asılmış damcılar şəklində ayrıılır. Bu halda hesab edilir ki, sistem iki nisbətən təmiz fazalara – su və daha aşağı temperaturda suda həll olan maddə fazasına ayrılmışdır. Həll olan maddənin konsentrasiyasının müəyyən qiymətində fazalara ayrılma temperaturu ən kiçik qiymət alır. Bu temperatur aşağı kritik fazalara ayrılma temperaturu (AKFT) adlanır.

Sulu məhlullarının AKFT –si olan maddələrin klatrata-bənzər hidratları əridikdə uzaq nizam pozulur, yaxın nizam saxlanılır. Başqa sözlə, boşluqlarına qeyri-elektrolitlərin molekulları daxil olan su klasterlərinin klatratalarına xas olan qəfə strukturu saxlanılır.

Bu tip klasterlər Polinq mikrokristallarına tam analogi olan strukturlardır. Lakin klasterlərin (klatrat strukturun qəlpələri) Polinq mikrokristallarından fərqi ondan ibarətdir ki, klatrat klasterlərinin yaşama oblastı klatratin ərimə temperaturundan (parçalanma temperaturundan, dağıılma temperaturundan) yuxarıda yerləşir. Beləliklə, hətta əgər klatrat hidratının kristalı 0°C yaxınlığında əriyirsə (klatrat hidratı adətən bu temperaturda əriyir), onun "qəlpələri" – klasterlər yuxarı temperaturlarda da – fazalara ayrılma temperaturuna qədər yaşaya bilirlər (bu temperatur ərimə temperaturundan onlarla dərəcə yuxarı ola bilər).

Su-efir sistemində efir molekullarının hidrofilliyi artdıqda (su molekullarının cazibə qüvvələri) fazalara ayrılma temperaturu artır, efir molekullarının hidrofobluğu artdıqda isə fazalara ayrılma temperaturu azalır, yəni efirin təsiri ilə fazalara ayrılma sürətlənir. Aydındır ki, aminin sulu məhlulunda inert qaz aşşarının olması molekulun hidrofob fragmentinin ölçülərinin artmasına ekvivalentdir.

Anestetiklərin, əzələ və sinirlərə ifliq təsir göstərən zəhərlərin, narkotiklərin və qalyusinogenlərin təsirlərinin əsas qanuna uyğunluqlarının təhlili göstərir ki, bütün hallarda hüceyrələrin aktiv fəaliyyətinin dayandırılması və qoşulmasının əsas universal mexanizmi sistemin fazalara ayrılması reaksiyası ilə əlaqədardır.

Fazalara ayrılma hadisələri haqqında mövcud olan təsəvvürlər çərçivəsində demək olar ki, fazalara ayrılma, yəni məhluldan hər hansı komponentin ayrılması (məhluldan kənarə çıxmazı) bu komponentin (amin, fosfin, efir və s.) iştirakı ilə gedən biokimyəvi reaksiyaların dayanması deməkdir. Digər tərəfdən, canlı həyat və onun təzahürü su mühitində gedən fermentativ kimyəvi reaksiyalardan ibarət olduğuna görə müəyyən siqnalların kimyəvi ötürülməsi ilə əlaqədar reaksiyaların dayanması, sözsüz ki, həsaslığın itirilməsi, ağrıının hiss olunmaması, narkoz kimi qəbul olunmalıdır.

Deyilənləri nəzərə alıb, təbabətdə, xüsusi əlavə, stamatologiyada geniş istifadə olunan anestetikin - lidokain-hidroxloridin ($\text{C}_{14}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{O}\cdot\text{HCl}\cdot\text{H}_2\text{O}$) suyun strukturuna təsiri alçaq tezlikli dielektrik spektroskopiya [6,7] metoduyla öyrənmişik. Ölçmələr otaq temperaturunda körpü əsası ilə xüsusi düzəldilmiş yuvacığda aparılmışdır [8,9]. Yuvacığ üzərinə qızıl təbəqəsi çəkilmiş, arasına tədqiq olunan məhlul doldurulmuş köynəkləri olan müstəvi kondensatorдан ibarət olub, nümunənin elektrik tutumunu və keçiriciliyini $20\div200000$ Hz tezlik intervalında ölçməyə imkan verir. İşdə lidokain-hidroxloridin 0,9%-li natrium xlorun duru sulu məhlulu ilə müxtəlif konsentrasiyalar qarışıqları hazırlanmışdır.

Baxılan tezliklərdə müşahidə olunan dispersiya məhluldakı ionların su klasterlərinin daxilinə diffuziyası ilə bağlı olan α -dispersiyadır [10].

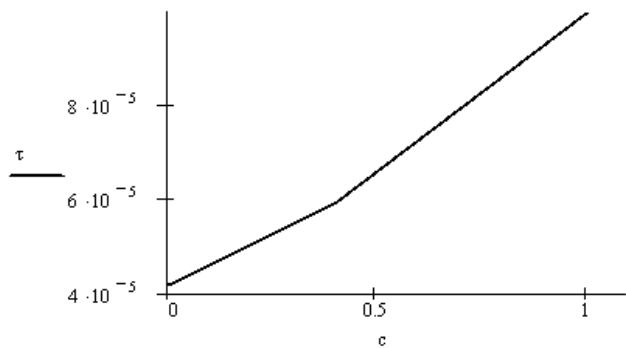
Relaksatorların (su klasterlərinin) ölçülərini qiymətləndirmək üçün hər bir məhlulda baxılan temperaturda Koul-Koul diaqramları qurulmuş, uyğun relaksasiya müddətləri təyin

LİDOKAIN-HİDROKLORİDİN SUYUN STRUKTURUNA TƏSİRİ

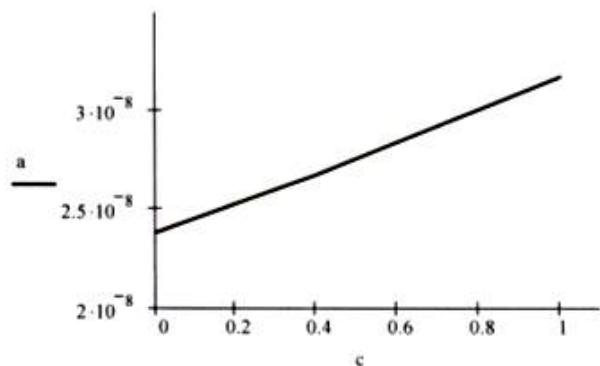
olunmuşdur. Relaksatorun formasını təxminini olaraq sferik qəbul edib onun radiusunu

$$a = \sqrt[3]{\frac{\tau k T}{4 \pi \eta}} \quad (1)$$

düsturu ilə qiymətləndirmiş [11]. Burada, $\tau = \frac{1}{2\pi\nu}$ relaksasiya müddəti, ν - uyğun relaksasiya tezliyi, k - Boltzman sabiti, T - mütləq temperatur, η - mühitin dinamik özlülüyüdür. Lidokain-hidrokloridin sulu məhlulunda müşahidə olunan relaksasiya müddətinin onun konsentrasiyasından asılılıq qrafiki şəkil 1-də göstərilmişdir. Anestetikin təsiri böyük konsentrasiyalarda ($c > 0,5\%$) daha da güclənir. Lidokain-hidrokloridin konsentrasiyası artıqca relaksasiya müddətinin artması ionların klasterlərə diffuziyasının ləngiməsini göstərir. Bu hal klasterlərin böyüməsi ilə izah oluna bilər. Bu fikri baxılan məhlullardakı su klasterlərinin (1) düsturu ilə qiymətləndirilmiş ölçüləri də təsdiq edir. Lidokain-hidrokloridin sulu məhlulunda yaranan su klasterlərinin radiusunun lidokain-hidrokloridin konsentrasiyasından asılılıq qrafiki şəkil 2 - də göstərilmişdir. Şəkildən göründüyü kimi lidokain-hidrokloridin konsentrasiyası artıqca su klasterlərinin radiusu da artır, yəni bu anestetik suyu strukturlaşdırır. Canlı orqanizmlərə baxılan anestetikin təsiri də eyni effekti yaradır və strukturlaşmış suda informasiyanın ötürülməsi çətinləşir, orqanizm «keyləşir».



Şəkil 1.



Şəkil 2.

-
- [1] Т.М Бирштейн, Конформации макромолекул, Соросовский образовательный журнал, 1996, № 11, С.26–29
 - [2] H.M Fishman, D Poussart, L.E Moore, E Siebenga, K+ conduction description from the low frequency impedance and admittance of squid axon. J. Membr. Biol. 1977, 32, 255–290.
 - [3] H.M Fishman Linearity, Admittance and Ion Conduction in Nerve Membrane. In: Interactions between Electromagnetic Fields and Cells; A.Chiabrera, C. Nicolini, H.P.Schwan Eds.; Plenum Press: New York, 1985; Vol. 97, 339–355.
 - [4] G Martinet, S Grimes, H.P. Shown. "Interface phenomena and dielectric properties of biological tissue", Encyclopedia of Surface and Colloid Science; 2002, by Marcel Dekker.
 - [5] С.А. Габуда "Связанная вода: факты и гипотезы", Изд.химии, 1982, с.105.
 - [6] A.V.Koval'chuk, "Low-frequency dielectric spectroscopy as an investigation method of electrode-liquidinterface", Functional materials, 1998, 5, 428-430. "Low-frequency dielectric spectroscopy as an investigation method of electrode-liquid interface", Functional materials, 1998, 5, 428-430.
 - [7] Е.Я Мясимов, ІІ.Ш Щасянов, ІІ.Ф Аббасов, Б.Э Пашайев, «КОЩ вя НАО҃-ын дуру сулу мяшлүлларынын диелектрик хассияти», АМЕА-нын Физика Институту, «Физика», 2006, 12, № 3, с. 11-14.
 - [8] Б Бартникас, Диелектрик месурмент, Wiley Encyclopedia of Electrical and Electronics Engineering Online, Wiley, New York, 1999.
 - [9] J Krupka. and G Geyer, Loss-angle measurement, Wiley Encyclopedia of Electrical and Electronics Engineering Online, Wiley, New York, 1999.
 - [10] H.P Schwan, S. Takashima Electrical conduction and dielectric behavior in biological systems. Encycl. Appl. Phys. 1993, 5, 177–200.
 - [11] Г.И. Сканави Физика диэлектриков. I часть, 1949, гос.изд.тех.теор.лит., Москва-Ленинград.

E.A. Masimov, H.F. Abbasov, K.M. Budagov

THE INFLUENCE OF THE LIDOCAINI HYDROHLORIDUM ON THE WATER STRUCTURE

The influence of the lidocaini hydrohloridum on the water structure was investigated by low frequency dielectric spectroscopy method in room temperature in the frequency range from 20 Hz to 200000 Hz. On the base of Cole-Cole diagrams, the concentration dependence of water clusters dimensions has been studied.

Э.А. Масимов, Х.Ф. Аббасов, К.М. Будагов

ВЛИЯНИЕ ЛИДОКАИНА ГИДРОХЛОРИДА НА СТРУКТУРУ ВОДЫ

Было исследовано влияние лидокаина гидрохлорида на структуру воды методом низкочастотной диэлектрической спектроскопии при комнатной температуре в интервале частот 20-200000 Гц. На основе диаграмм Коул-Коуля изучена зависимость размеров водных кластеров от концентрации лидокаина гидрохлорида.

Received: 19.12.07

MnIn₂Se₄ BİRLƏŞMƏSİNİN DƏYİŞƏN ELEKTRİK SAHƏSİNDƏ ELEKTRİK XASSƏLƏRİ

N.N. NIFTIYEV

Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti, Az-1000, Bakı, Ü. Hacıbəyov, 34

O.B. TAĞIYEV

AMEA Fizika Institutu, Az-1143, Bakı, H. Cavid, 33

M.B. MURADOV

Bakı Dövlət Universiteti, Az-1145, Z. Xəlilov, 23

F.M. MƏMMƏDOV

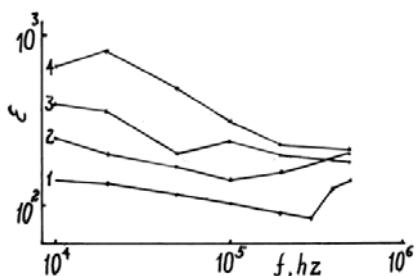
AMEA Kimya Problemləri Institutu, Az-1143, Bakı, H. Cavid, 29

T. Ş. HƏŞİMOVA

AMEA Fizika Institutu, Az-1143, Bakı, H. Cavid, 33

İşdə MnIn₂Se₄ birləşməsinin müxtəlif tezlik və temperaturlarda dielektrik nüfuzluğu, elektrik keçiriciliyi və dielektrik itki bucağının tangensi tədqiq edilmiş və onların təcrubi qiymətləri hesablanmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, dielektrik nüfuzluğunun termik artımı, temperatur yüksəldikcə yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının artması ilə bağlıdır. Aktivləşmə enerjisinin tezlikdən asılılığı müşahidə edilmişdir. Bu da tezlik artdıqca bağlayıcı layların relaksasiya müddətinin azalması ilə əlaqədardır. Müəyyən edilmişdir ki, aşağı tezliklərdə itki bucağının tangensi tezliklə tərs mütənasib olaraq azalır ($\tan\delta \sim 1/\omega$), yüksək tezliklərdə isə tezlik və temperatur artdıqca $\tan\delta$ artır.

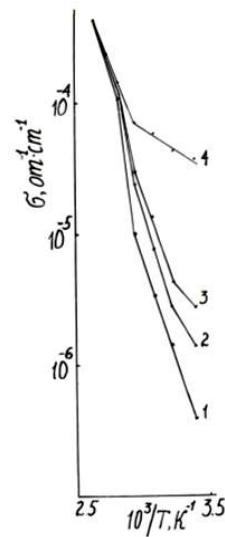
Uçlu xalkoqenid birləşmələr qeyri-adi mühüm fiziki xassələr kompleksinə malik olduqlarına görə son dərəcə böyük maraq kəsb edir və elmi-texnikanın müxtəlif sahələrində geniş tətbiqini tapır. Onlardan d və f təbəqələri tama-mılə dolmayan elementlər daxil olan yarımkənciri birləşmələr yarımkənciri və maqnit xassələri özündə cəmləşdirən qeyri-adi xüsusiyyətləri sahəsində intensiv tədqiqatların obyektiñə çevrilmişdir. Bu planda AB₂X₄ (burada A – Mn, Fe, JO, Ni; B – Ga, In; X – S, Se, Te) tipli birləşmələr böyük maraq kəsb edir [1-7]. Bu birləşmələr optoelektronikada tətbiq edilə bilən maqnit sahəsi ilə idarə olunan lazerlər, işıq modulyatorları, fotodetektorlar və s. funksional qurğular yaratmaq üçün perspektivlidir. Hal-hazırkı işdə AB₂X₄ tipli birləşmələrdən olan MnIn₂Se₄-ün dəyişən elektrik sahəsində elektrik xassələri tədqiq edilmişdir.



Şəkil 1. Müxtəlif temperaturlarda dielektrik nüfuzluğunun tezlikdən asılılığı; K: 1 -295; 2- 323; 3- 340; 4- 355.

MnIn₂Se₄ birləşməsi stexiometrik miqdarda yüksək təmizlikli (99,999%) elementlərin ərintisində alınmışdır. Rentgenoqrafik metodla analiz nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, MnIn₂Se₄ heksagonal quruluşa malik olub, elementar qəfəs parametrləri $a=4,19\text{\AA}$, $c=12,90\text{\AA}$, $c/a=3,08$ -dir [2]. MnIn₂Se₄ birləşməsinin sabit elektrik sahəsində bəzi elektrik xassələri [4] işində öyrənilmişdir. Dəyişən elektrik sahəsində elektrik xassələrini öyrənmək üçün qalınlığı ~0,5 mm olan kristal nümunələrdən onlara gümüş pastası vuraraq kondensatorlar hazırlanmışdır. Elektrik tutumunun ölçüləməsi E7-20 ($25 \div 10^6\text{Hz}$) rəqəmli immetans ölçü cihazının köməyi ilə aparılmışdır.

Şəkil 1-də müxtəlif temperaturlarda dielektrik nüfuzluğunun (ϵ) cərəyanın tezliyindən asılılıq qrafiki verilmişdir. Qrafikdən görünür ki, $(10^4 \div 5 \cdot 10^5\text{Hz})$ tezlik və $295 \div 355\text{K}$ temperatur intervalında ϵ tezlik və temperaturdan asılı olaraq $80 \div 800$ aralığında müəyyən qiymətlər alır. Temperatur yüksəldikcə dielektrik nüfuzluğunun termik aktiv artımı müşahidə edilir. Dielektrik nüfuzluğunun termik aktiv artımı temperatur yüksəldikcə yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının temperaturdan asılı olaraq artması ilə əlaqədardır. $295 \div 325\text{K}$ temperatur intervalında ϵ tezlikdən asılı olaraq əvvəlcə azalır, sonra isə artır. $340 \div 355\text{K}$ temperatur intervalında isə ϵ -nın tədricən azalması baş verir.



Şəkil 2. MnIn₂Se₄ üçün tezliyin müxtəlif qiymətlərində elektrik keçiriciliyinin temperaturdan asılılığı; Hz: 1- 10^4 , 2- 10^5 , 3- $2 \cdot 10^5$; 4- $5 \cdot 10^5$.

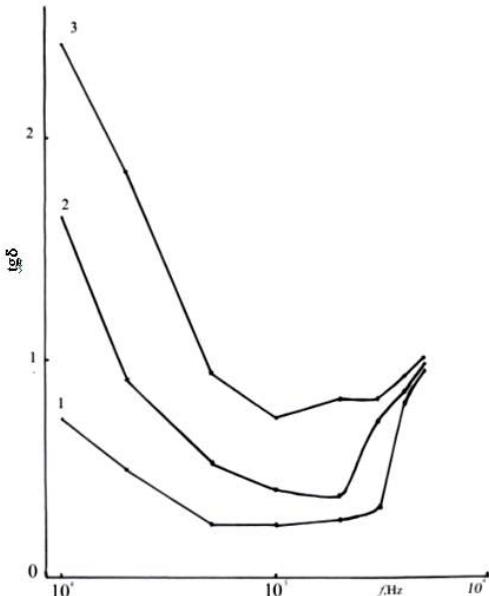
Şəkil 2-də müxtəlif tezliklərdə elektrik keçiriciliyinin (σ) temperaturdan ($10^3/T$) asılılıq qrafiki verilmişdir. Qrafikdən görünür ki, əyri lər $10^4 \div 5 \cdot 10^5\text{Hz}$ tezlik intervalında müxtəlif meyllərə malik olur. Müxtəlif meyllərə malik

olan əyrilərdən aktivasiya enerjiləri hesablanmışdır. Aşağı temperaturlu oblastda $10^5 \div 5 \cdot 10^5$ Hz tezlik intervalında tezlik artdıqca aktivasiya enerjisi $0,35\text{eV}$ -dan $0,10\text{eV}$ -a qədər azalır (2, 3, 4 əyriləri). Yüksək temperaturlu oblastda isə tezlik artdıqca aktivasiya enerjisi $0,64 \div 0,55$ eV intervalında azalır. Aktivasiya enerjisinin tezlikdən asılı olaraq dəyişməsini baryer modelinin köməyi ilə izah etmək olar [8]. Bu modelin mahiyyəti ondan ibarətdir ki, çoxlu sayıda kristallar arasında lokal baryerə malik müxtəlif qeyribircinsliliklərlə (məs: dislokasiya, elektrik domeni və s.) lokallaşmış aşağı müqavimətli bağlayıcı laylar ola bilər. Bağlayıcı layların qalınlığı və birləşmə xüsusiyyətinin elektrik sahəsinin gərginliyi və tezliyindən asılılığı onları «aktiv element» edir. Bildiyimiz kimi, bizim tədqiq etdiyimiz materiallarda yüyürlükün qiyməti kiçikdir. Ona görə də bağlayıcı layların formallaşması (və pozulması) relaksasiya müddəti tezlikdən müxtəlif cür asılı ola bilər. Əgər bu asılılıq güclüdürse, keçiriciliyin aktivləşmə enerjisi tezlikdən asılı olur. MnIn_2Se_4 birləşməsi üçün relaksasiya müddətini [8]

$$\tau = \frac{1}{2f} \exp(\Delta E / kT) \quad (1)$$

riyazi ifadəsinin köməyi ilə hesablaşsaq (bax: şəkil 2), biz müəyyən edərik ki, $10^5 \div 5 \cdot 10^5$ Hz tezlik intervalında tezlik artdıqca relaksasiya müddəti $10^0 \div 10^{-5}$ saniyə intervalında azalır və aktivləhmə enerjisinin $0,35$ eV-dan $0,10$ eV-a qədər azalması bah verir.

Şəkildən həmçinin görünür ki, $10^4 \div 2 \cdot 10^5$ Hz tezlik intervalında (1, 2, 3 əyriləri) 340 K temperaturdan başlayaraq keçiricilik kəskin artır. Ümumiyyətlə dəyişən elektrik sahəsinin tezliyindən asılı olaraq elektrik keçiriciliyi təqribən 10^2 dəfə dəyişir.



Şəkil 3. MnIn_2Se_4 üçün müxtəlif temperaturlarda dielektrik itkisinin tangens bucağından tezlikdən asılılığı; K: 1- 295; 2- 310; 3- 325.

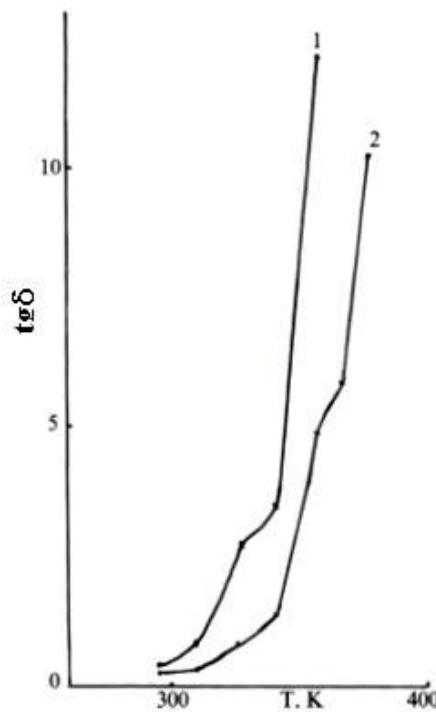
Şəkil 3-də MnIn_2Se_4 birləşməsi üçün müxtəlif temperaturlarda dielektrik itkisinin tangens bucağından tezlikdən asılılıq qrafiki təsvir edilmişdir. Şəkildən görünür ki, tədqiq edilən temperaturlarda başlanğıcda tezlik artdıqca itki bucağından qiyməti azalır, müəyyən tezliklərdən sonra isə

artma müşahidə edilir. Məlumdur ki, dielektrik itkisinin xarakterizə edən parametrlərdən ən vacibи dielektrik itkisinin tangens bucağıdır [9]:

$$tg\delta = \frac{I_a}{I_r} = \frac{\sigma}{\epsilon_0 \epsilon \omega} \quad (2)$$

Burada I_a -aktiv cərəyan, I_r -reakтив cərəyan, ϵ_0 -elektrik sabiti, ϵ -dielektrik nüfuzluğu, $\omega = 2\pi f$ - tezlik, σ - isə elektrik keçiriciliyidir.

Yuxarıda göründüyü kimi (şəkil 1 və 2) aşağı tezliklərdə elektrik nüfuzluğu və elektrik keçiriciliyi tezlikdən asılı olaraq çox zəif dəyişir. Buna görə də başlanğıcda itki bucağının tangensi tezliklər tərs mütənasib olaraq azalır ($tg\delta \sim \frac{1}{\omega}$). Yuxarı tezliklərdə isə ($2 \cdot 10^5 \div 5 \cdot 10^5$ Hz) tezlik artdıqca dielektrik nüfuzluğu az dəyişsə də, elektrik keçiriciliyinin daha sürətlə artması müşahidə olunur (şəkil 2). Bu da tezlik artdıqca itki bucağının tangensinin artmasına səbəb olur.



Şəkil 4. MnIn_2Se_4 üçün müxtəlif tezliklərdə dielektrik itkisinin tangens bucağının temperaturdan asılılığı; K: 1- $2 \cdot 10^4$ Hz; 2- $2 \cdot 10^5$ Hz.

Şəkil 4-də iki müxtəlif tezliklərdə ($2 \cdot 10^4$ və $2 \cdot 10^5$ Hz) dielektrik itkisinin tangens bucağının temperaturdan asılılıq qrafiki verilmişdir. Şəkildən görünür ki, $300 \div 340$ K temperatur intervalında temperatur artdıqca $tg\delta$ -nin qiyməti artır. 340 K temperaturdan başlayaraq isə daha sürətlü artma müşahidə olunur. Bu da elektrik keçiriciliyinin daha intensiv artması ilə bağlıdır.

Beləliklə, işdə MnIn_2Se_4 birləşməsinin müxtəlif tezlik və temperaturlarda dielektrik nüfuzluğu, elektrik keçiriciliyi və dielektrik itki bucağının tangensi tədqiq edilmiş və onların təcrübə qiymətləri hesablanmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, dielektrik nüfuzluğunun termik artımı, temperatur yüksəldikcə yükdaşıyıcılarının konsentrasiyasının artması ilə bağlıdır. Tezlik yüksəldikcə aktivləşmə enerjisinin

MnIn₂Se₄ BİRLƏSMƏSİNİN DƏYİŞƏN ELEKTRİK SAHƏSİNDƏ ELEKTRİK XASSƏLƏRİ

azalması, tezlik artdıqca bağlayıcı ləylərin relaksasiya müddətinin azalması ilə əlaqədardır. Müəyyən edilmişdir ki, aşağı tezliklərdə itki bucağının tangensi tezliklə tərs

mütənasib olaraq azalır ($\operatorname{tg}\delta \sim \frac{1}{\omega}$), yüksək tezliklərdə isə tezlik və temperatur artdıqca itki bucağının tangensinin qiyməti artır.

- [1] T. Kanamato, H. Ido, T. Kaneko. J. Phys. Japan, 1973, v.34, №2, p.554.
- [2] Б.К.Бабаева, М.Р.Аллазов. В кн: Исследования в области неорганической и физической химии. Баку, Наука, 1977.
- [3] Д.С. Аждарова. Полупроводники на основе халькогенидов марганца. Баку, Наука, 2001.
- [4] Н.Н. Нифтиев, М.А. Алиджанов, О.Б. Тагиев, Ф.М.Мамедов, М.Б. Мурадов. 2004, ФТП, т.38, в.5, с.550-551.
- [5] Р.Н. Бекимбетов. Неорганические материалы. 2002, т.38, №8, с.953-957.
- [6] Н.Н. Нифтиев, О.Б.Тагиев. Письма в ЖТФ. 2005, т.31, в.19, с.72-75.
- [7] Н.Н. Нифтиев, О.Б.Тагиев. ФТП, 2007, т.41, в.1, с.17-19.
- [8] П.Г. Орешкин. Физика полупроводников и диэлектриков. Высшая школа, 1977, с.448.
- [9] Ю.М. Поплавко. Физика диэлектриков. Высшая школа. 1980, с.400.

N.N. Niftiyev, O.B. Tagiyev, M.B. Muradov, F.M.Mamedov, T.Sh.Gashimova

ELECTRIC PROPERTIES OF MnIn₂Se₄ COMPOSITION ON ALTERNATING ELECTRIC FIELD.

The dielectric constants, dielectric dissipation and electric conduction of MnIn₂Se₄ compound are investigated and their experimental values are defined. It is established, that thermal increase of dielectric constant is connected with temperature increase at concentration increase of current carriers. The frequency dependence of activation energy, which is connected with decrease of relaxation time of blocking layers at frequency increase, is observed. It is established, the dielectric dissipation decreases in inverse proportion ($\operatorname{tg}\delta \sim 1/\omega$) and $\operatorname{tg}\delta$ increases at high frequencies with increase of frequency and temperature.

Н.Н. Нифтиев, О.Б. Тагиев, М.Б. Мурадов, Ф.М. Мамедов , Т.Ш. Гашимова

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЯ MnIn₂Se₄ В ПЕРЕМЕННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Исследованы диэлектрические проницаемости, тангенс угла диэлектрических потерь и электропроводность соединения MnIn₂Se₄ и определены экспериментальные их значения. Установлено, что термический рост диэлектрической проницаемости связан с ростом температуры при увеличении концентрации носителей тока. Наблюдается частотная зависимость энергии активации, которая связана с уменьшением времени релаксации запирающих слоев при увеличении частоты. Установлено, что при низких частотах тангенс угла диэлектрических потерь уменьшается обратно пропорционально частоте ($\operatorname{tg}\delta \sim 1/\omega$), а при высоких частотах с ростом частоты и температуры $\operatorname{tg}\delta$ увеличивается.

Received:08.01.08

AKSİAL-SİMMETRİK ENERJİ KÜTLƏ ANALİZATORLARINDA İONLARIN İKİQAT FOKUSLANMA ŞÖRTLƏRİ

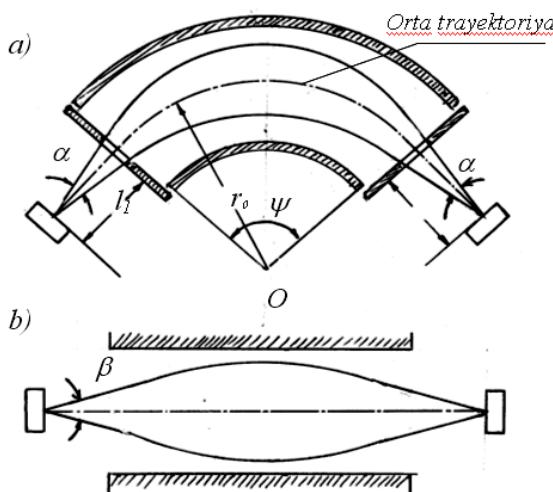
T.K. NURUBƏYLİ

AMEA Fizika İnstitutu, Az-1143, Bakı, H. Cavid, 33

Işdə aksial – simmetrik elektromaqnit sahəsinə malik sektorlu uçuş müddətli enerji – kütlə analizatorunda ionların hərəkət trayektoriyası nəzəri olaraq araşdırılmış, müxtalif enerji və bucaq altında analizatora daxil olan ionların elektrik və maqnit sahələrində uçuş müddətinə görə ikiqat fokuslanma şərti alınmışdır. Göstərilmişdir ki, müəyyən paylanmaya malik elektrik və maqnit sahələri ionları bu tip analizatorda ikiqat (həm radial, həm də aksial istiqamətdə) fokuslanması mümkündür.

Sektorlu aksial-simmetrik elektromaqnit sahəsinə malik uçuş müddətli kütlə analizatorlarından geniş istifadə olunması bu tip cihazların ion – optik xarakteristikalarının və həndəsi ölçülərinin hesablanması üçün nəzəri metodların işlənməsinə böyük zəmin yaratmışdır [1-3]. Bu tip cihazların ionların aberrasiyası və onların uçuş müddətinə görə fokuslanmasına həsr olunmuş işlərə dövrü mətbuatda tez-tez rast gəlinir [4, 5]. Bu işlərdə əsasən ion paketinin trayektoriyasına və uçuş müddətlərinə bir neçə parametrlərin təsirinə xüsusi hallar üçün (elektrik və ya maqnit, ionların analizatorda müxtalif dönəmə bucaqlarına və i.a.) baxılmış və bir sırada qənaətbəxş nəticələr alınmışdır. Belə ki, istor ionların parametrlərinin (kütləyə və enerjiyə görə dağınıqlıq), istərsə də analizatorun parametrlərinin (həndəsi ölçülərinin, hazırlanma dəqiqliyi) kənarəçixmalarının cihazın ion – optik xarakteristikalarına təsirinin hesablanması üçün ifadələr alınmışdır [6]. Lakin xüsusi hallar üçün aparılan bu hesablama aksial – simmetrik enerji – kütlə analizatorlarının əsas parametrləri ilə (məsələn, ionların uçuş müddəti ilə) onların həndəsi ölçüləri arasında birqiyəməli əlaqə yaratmağa imkan vermir.

Digər tərəfdən məhz ayırdetmə qabiliyyətinin və buraxma əmsalinin yüksəldilməsinə xidmət edən bircins elektrik (və ya elektromaqnit) sahəli aksial – simmetrik tipli analizatorların kütlə reflektronundan [7] fərqli olaraq başlangıç enerjiyə, açılma bucağına, mənbədə yaranan ionların yaranma koordinatına görə fokuslama imkanı onların ciddi hesablanması metodlarının işlənməsini tələb edir.



Şəkil 1. Statik kütlə-analizatorunda ionların radial (a) və aksial (b) istiqamətlərdə fokuslanma sxemi:

Bu baxımdan kütlələrinə (və ya enerjiyə) görə bir-birindən ayrılan yüklü zərrəciklərin analizatorun çıxışında fo-

kuslanmanı təmin etmək üçün onların sahədəki trayektoriyalarının hesablanması və bu trayektoriyaların analizatorun ölçülərindən asılılığının araşdırılması zənnimizcə vacib məsələdir.

Təqdim olunan işdə aksial – simmetrik elektromaqnit sahəsinə malik sektorlu uçuş-müddətli kütlə analizatorunda (şək. 1) ionların hərəkət trayektoriyasının hesablanması və həmin trayektoriyaların ionların uçuş müddətinə və analizatorun ion – optik xassələrinə təsiri araşdırılmışdır.

Ionların enerji – kütlə analizatorunda bir-birinə perpendikulyar elektrik və maqnit sahələrində hərəkət trayektoriyalarını və uçuş müddətinə görə fokuslanma şərtlərini təyin etmək üçün həmin sahələrdə hərəkətin vektor şəklində olan tənliyindən istifadə edəcəyik:

$$M \frac{d\vec{v}}{dt} = qe\vec{E} + \frac{qe}{c} [\vec{v} \cdot \vec{H}], \quad (1)$$

burada M - ionların kütləsi; q -ionların ionlaşma dərəcəsi; e -elektronların yükü; c -ışığın vakuumdakı sürətidir.

Hesablamanın sadəliyi xatirinə fərz edək ki, elektrik və maqnit sahələrinin fəzada paylanma sərhədləri məlumdur və üst-üstə düşür. Onda elektrik sahəsi olmayan hal üçün $\vec{E} = 0$, maqnit sahəsi olmayan hal üçün isə $\vec{H} = 0$ yazmaq olar.

Ionların trayektoriyalarını hesablamaq üçün silindrik koordinat sistemindən istifadə edək. Bu zaman sahənin intensivliklərinin ort vektorlarını $\vec{e}_r, \vec{e}_\varphi, \vec{e}_z$ ilə işarə edək (\vec{e}_φ -nin fırlanma istiqaməti saat əqrəbinin hərəkəti istiqamətindədir). Onda hərəkət edən ionun radius vektorunu

$$\vec{r} = r\vec{e}_r + z\vec{e}_z \quad (2)$$

şəklində yazmaq olar. Bu ifadəni zamana görə diferensiallaşaq və

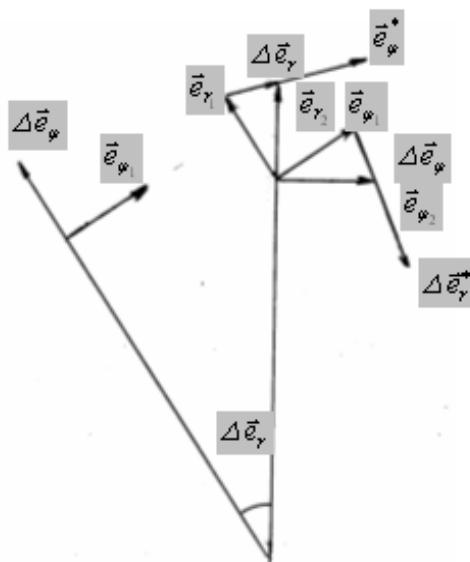
$$\frac{d\vec{e}_r}{dt} = \dot{\varphi} \lim_{\Delta\varphi \rightarrow 0} \frac{\Delta e_r}{\Delta\varphi} = \dot{\varphi} \lim_{\Delta\varphi \rightarrow 0} \vec{e}_\varphi^* \frac{\Delta\varphi}{\Delta\varphi} = \dot{\varphi} \vec{e}_\varphi \quad (3)$$

$$\frac{de_\varphi}{dt} = \dot{\varphi} \lim_{\Delta\varphi \rightarrow 0} \frac{\Delta e_\varphi}{\Delta\varphi} = \dot{\varphi} \lim_{\Delta\varphi \rightarrow 0} \vec{e}_r^* \frac{\Delta\varphi}{\Delta\varphi} = -\dot{\varphi} e_r \quad (4)$$

nəzərə alsaq (şəkil 2-yə bax).

$$\vec{v} = \dot{r}\vec{e}_r + r\dot{\varphi}\vec{e}_\varphi + \dot{z}\vec{e}_z \quad (5)$$

alariq.



Şəkil 2. Silindrik koordinat sistemində ort-vektorlar.

(5)-i zamana görə diferensiallaşaq ionların elektromaqnit sahəsindəki təcilini alarıq

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = (\ddot{r} - r\dot{\phi})\vec{e}_r + (2\dot{r}\dot{\phi} + r\ddot{\phi})\vec{e}_\phi + \ddot{z}\vec{e}_z.$$

Elektrik və maqnit sahələrinin intensivlik vektorlarını

$$\begin{aligned}\vec{E} &= E_r\vec{e}_r + E_\phi\vec{e}_\phi + E_z\vec{e}_z \\ \vec{H} &= H_r\vec{e}_r + H_\phi\vec{e}_\phi + H_z\vec{e}_z\end{aligned}$$

şəklində qəbul edib (1)-dəki vektorial hasili silindrik koordinatlarda ifadə etdiykdən sonra $\frac{d\vec{v}}{dt}$, \vec{E} və $[\vec{v} \vec{H}]$ -nin ifadələrini (1)-də yerinə qoysaq və aksial – simmetriklilik şərtini nəzərə alsaq ($H_\phi \equiv 0$, $E_\phi \equiv 0$) ionların koordinat oxları boyunca hərəkət tənliklərini alarıq

$$\begin{aligned}\ddot{r} - r\dot{\phi}^2 &= \frac{e}{m}E_r - \frac{e}{Mc}r\dot{\phi}H_z \\ r\ddot{\phi} + 2\dot{r}\dot{\phi} &= -\frac{e}{Mc}(\dot{z}H_r - \dot{r}H_z). \quad (6) \\ \ddot{z} &= \frac{e}{M}E_z + \frac{e}{Mc}r\dot{\phi}H_z\end{aligned}$$

$$\frac{2z''(V-U)}{A} - \frac{z'[-(E_r r' + E_z z')A^2 + 2(V-U)(r'r'' + rr' + z'z'')]}{A^2} = E_z + \frac{1}{C}\sqrt{\frac{2e/M(V-U)}{A}} \cdot r H_r \quad (10)$$

(9) və (10) tənlikləri qeyri – relyavistik ionların aksial-simmetrik elektromaqnit sahəsindəki hərəkət tənliklərinin kifayət qədər dəqiq, diferensial formasıdır.

Aksial – simmetrik elektromaqnit sahəsində ionların ucuş müddətinə görə fokuslanma şərtini almaq üçün həmin sahədə ionların orta trayektoriyası (r_0 radiusu) ilə hərəkət şərtini araşdırıq (şək. 1).

Məlum olduğu kimi aksial – simmetriklilik şərtinə görə elektrik və maqnit sahələri həmin trayektoriya boyu sabit-

Ionların hərəkət trayektoriyasının diferensial şəkildə tənliklərini almaq üçün aşağıdakı əvəzləmələri aparaq:

$$\begin{aligned}\dot{r} &= r'\dot{\phi} & \ddot{r} &= r''\dot{\phi}^2 + r\ddot{\phi} \\ \dot{z} &= z'\dot{\phi} & \ddot{z} &= z''\dot{\phi}^2 + z'\ddot{\phi},\end{aligned}$$

burada $\dot{\phi}$ -qeyri asılı dəyişən, ştrixlər isə həmin kəmiyyətlərin $\dot{\phi}$ -yə görə törəmələridir. $\dot{\phi}$ və $\ddot{\phi}$ təyin etmək üçün enerjini saxlanması qanunundan istifadə edək

$$\frac{1}{2}mv^2 = qe(V-U),$$

burada qeV - ionların ionlaşma oblastında (ion mənbəyində) əldə etdiykləri enerji; U -ionun sürəti təyin olunan nöqtənin potensialıdır. (5)-də sürətinin kvadratının ifadəsinin

$$v^2 = \dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2 + \dot{z}^2 = \dot{\phi}^2 A \quad (7)$$

olduğuunu nəzərə alaraq (harada ki $A = r'^2 + r^2 + z'^2$) enerjinin saxlanması qanunundan

$$\dot{\phi} = \left(\frac{2e}{M}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{V-U}{A}\right)^{1/2}$$

yazmaq olar.

(7) ifadəsinin zamana görə törəməsini alandan sonra alinan tənliyin sağ tərəfindən ifadədən $\dot{\phi}$ -yə görə törəməyə keçəsək aşağıdakı ifadəni alarıq

$$\ddot{\phi} = \frac{eA[-(E_r r' + E_z z')A + 2(V-U)(r'r'' + rr' + z'z'')]}{M \cdot A^2}. \quad (8)$$

$\dot{r}, \dot{z}, \dot{\phi}, \ddot{r}, \ddot{z}$ və $\ddot{\phi}$ -nin alınmış ifadələrini (6)-da yerinə yazsaq ionların hərəkət trayektoriyalarının tənliklərini alarıq

$$\begin{aligned}\frac{2(V-U)(r'' - r)}{A} - \frac{r'(E_r r' + E_z z')A}{A^2} &= \\ = E_r - \frac{1}{C}\sqrt{\frac{2e/M(V-U)}{A}} \cdot r H_z &\quad (9)\end{aligned}$$

və

dir. Onda $r=r_0$ olduqda $E_z=E_0$, $H_z=H_0$ və $U=U_0$ yazmaq olar. Bu zaman analizatorun girişində enerjisi qeV_0 olan yalnız M_0 kütləli ionlar $z=0$ müstəvisində orta trayektoriya (r_0) ilə hərəkət edəcək.

Orta trayektoriya boyu $r(\phi) \equiv r_0$, $z(\phi) \equiv 0$ olduğundan həmin əyri üzərində $r'=r''=z'=z''=0$. (9) və (10)-da buları nəzərə alsaq

$$-1 = \frac{r_0 E_0}{2(V_0 - U_0)} - \frac{r_0 e H_0}{\sqrt{2 M_0 c^2 e (V_0 - U_0)}} \quad (11)$$

alrıq. Bu ifadə [8]-da alınan uyğun ifadə ilə üst – üstə düşür. (11) ifadəsi bir-birinə perpendikulyar olan elektrik və maqnit sahələrində ionların orta trayektoriya ilə hərəkət şərtini xarakterizə edir. Əgər

$$\frac{r_0 E}{2(V_0 - U_0)} = k \quad (12)$$

qəbul etsək (11) ifadəsi aşağıdakı şəklə düşər

$$-1 = k - \frac{r_0 e H_0}{\sqrt{2 M_0 c^2 e (V_0 - U_0)}}. \quad (13)$$

Beləliklə, aksial-simmetrik analizatorun daxilində elektrik sahəsi olmayan halda ($E_0=0$) $k=0$. Bu zaman $U_0=0$ olmaya da bilər. Doğrudan da bu halda maqnit sahəsi olan yerdə xüsusi qurğuların köməyi ilə sıfırdan fərqli elektrik sahəsi yaradılır. Onda orta trayektoriyanın radiusu üçün

$$r_0 = \frac{\sqrt{2 M_0 c^2 e (V_0 - U_0)}}{e H_0} \quad (14)$$

və ya

$$r_0 = 144 \frac{\sqrt{M_0 (V_0 - U_0)}}{H_0}$$

alrıq. Əgər H_0 erstedlərlə, M_0 - atom kütlə vahidi, U_0 və V_0 voltlarla ölçülərsə, orta trayektoriyanın (14) ifadəsi ilə təyin olunan radiusu sm-lərlə alınır.

Əgər analizatorda yalnız elektrik sahəsi mövcuddursa ($H=0$), onda (11) və (12)-dən $k=-1$ və ya

$$r_0 = \frac{2(V_0 - U_0)}{E_0}$$

alrıq.

Qeyd edək ki, (9) və (10) diferensial tənlikləri qeyri-xətti olduqları üçün bu tənliklərin həlli bir sira çətinliklərlə üzləşir. Lakin sistemin aksial-simmetrik olduğundan və belə sistemlərdə adətən paraksial ion dəstəsindən istifadə edil-

diyindən bu tənliklərdə kifayət qədər dəqiqliyi saxlamaqla bir qədər sadələşdirmək olar. Bu sadələşmə o hallarda mümkün ki, trayektoriyanın radial istiqamətdə hər hansı kənaraçixmaları orta trayektoriyanın əyrilik radiusundan çox-çox kiçik olsun, başqa sözlə

$$\frac{\Delta r}{r_0} = \eta \ll 1 \text{ və } \frac{z}{r_0} = \xi \ll 1.$$

(9) və (10) tənliklərin bu şərtlə daxilində həll etmək üçün analizatorun daxilində elektrik sahəsini (E_r) və maqnit sahəsinin (H_z) paylanmaları məlum olmalıdır. Orta trayektoriya boyu elektrik və maqnit sahəsinin qiymətləri uyğun olaraq E_0 və H_0 olduğundan E_r və H_z aşağıdakı sıralar şəklində axtaraq.

$$E_r = E_0 (1 + B_1 \eta + B_2 \eta^2 + \dots) \quad (15)$$

$$H_z = H_0 (1 + A_1 \eta + A_2 \eta^2 + \dots)$$

(15)-ə daxil olan B_1, B_2, A_1, A_2 əmsallarını və fəza yükü olmayan hal üçün elektrostatik sahəsinin paylanmasına statistik hal üçün Maksvell tənliyindən tapmaq olar.

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{E} &= 0; \quad \operatorname{div} H = 0; \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= 0; \quad \operatorname{rot} H = 0. \end{aligned}$$

Bu tənliklərin aksial-simmetriklilik şərti daxilində silindirik koordinat sistemdə aşağıdakı şəklə düşər

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r E_r) + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \quad (16)$$

$$\frac{\partial E_r}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial r} = 0$$

(17)

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r H_z) + \frac{\partial H_z}{\partial z} = 0 \quad (18)$$

$$\frac{\partial H_r}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial r} = 0. \quad (19)$$

(16) tənliyini r -ə, (17) tənliyini z görə diferensiallayıb toplasaq, alınan tənliyin həlli potensialın analizatorun daxilində paylanması alıraq

$$E_r = r_0 E_0 \left\{ - \left(\eta + \frac{1}{2} B_1 \eta^2 + \frac{1}{3} B_2 \eta^3 + \dots \right) + \frac{1}{2} [1 + B_1 - (1 - B_1 - 2 B_2 \eta)] + U_0 \right\} \quad (20)$$

$$E_z = -E_0 [1 + B_1 - (1 - B_1 - 2 B_2) \eta + (1 + B_1 + B_2) \eta^2 + \dots] \xi \quad (21)$$

Analoji olaraq maqnit sahəsinin paylanması

$$H_{rz} = H_0 [(A_1 + 2 A_2 \eta + 3 A_3 \eta^2 + \dots) \xi + \left[\frac{1}{2} (A_1 - 2 A_2 - 6 A_3) \xi^3 \right]] \quad (22)$$

$$H_z = H_0 (1 + A_1 \eta + A_2 \eta^2 + \dots + A_1 \xi^2 + A_2 \xi^2 \eta + \dots) \quad (23)$$

Beləliklə, əgər elektrik və maqnit sahələrinin intensivliklərinin orta ($z=0$) müstəvidə paylanmaları (15) şəklində veril-

mışdır, onda həmin intensivliklərin radial və aksial toplananlarının (20-23) ifadələrinin köməyi ilə təyin etmək olar.

E_r və H_z bu ifadələrini (9) və (10) tənliklərində yerinə qoysaq və bəzi çevirmələri buraxsaq ionların aksial və radial istiqamətində fokuslanma şərtləri üçün aşağıdakı tənlikləri alarıq.

$$\frac{\operatorname{tg} \omega \psi}{\omega} = \frac{\lambda_1 [1 - (1-k)\lambda_2] + \lambda_2 [1 - (1-k)\lambda_1]}{\omega^2 \lambda_1 \lambda_2 - \lambda_2 [1 + (1-k)\lambda_1][1 - (1-k)\lambda_2]} \quad (24)$$

$$\frac{\operatorname{tg} \Omega \psi}{\Omega} = \frac{\lambda_1 [1 + (1+k)\lambda_2] + \lambda_2 [1 - (1+k)\lambda_1]}{\Omega^2 \lambda_1 \lambda_2 - \lambda_2 [1 - (1+k)\lambda_1][1 + (1+k)\lambda_2]}, \quad (25)$$

burada $\lambda_1 = \frac{l_1}{r_0}$; $\lambda_2 = \frac{l_2}{r_0}$ (şək. 1) ψ -ionların dönmə bucağıdır.

$$\omega^2 = (1+k)(1+k+A) - k(B_1 - 3) \quad (26)$$

$$\Omega^2 = -(1-k)A_1 + k(1+B_1) \quad . \quad (27)$$

- [1] A.A. Сысоев, Г.А. Самсонов. Теория и расчет статических масс – анализаторов. М., Изд. МИФИ. 1987, 172 с.
- [2] В.А. Олейников, А.А. Сысоев. Методика расчета и исследование фокусирующих по времени пролета секторных статических полей. Препринт № 32797. М. ВИНИТИ, 1989, 32 с.
- [3] Г.Г. Манагадзе, Н.Г. Манагадзе. ЖТФ 1999, т.69, № 10, с. 138.
- [4] А.М. Гашимов, К.З. Нуриев, К.Б. Гурбанов, Т.К. Нурубейли, З.К. Нурубейли. ЖТФ 2007, т. 77, № 11, с. 82-87.
- [5] К.З. Нуриев, Н.А. Мамедов, Т.К. Нурубейли. Физика, 2000, с. VІ, s.17-20.
- [6] А.М. Нәшімов, Т.К. Nurubayli, К.З. Nuriyev. Fizika, 2006, с. XII, №1, s. 72-75.
- [7] Б.А. Мамырин, В.И. Карапаев, Д.В. Шмакк, В.А. Загулин. ЖЭТФ, 1973, т.64, в.1, с. 82 –86.
- [8] А.А. Сысоев. Физика и техника масс-спектрометрических установок. М., Энергоатомиздат, 1989, 256 с.
- [9] М.А. Чупахин, А.А. Сысоев. Введение в масс-спектрометрию. М., Атомиздат, 1983, 250 с.

T.K. Nurubeyli

CONDITIONS FOR DOUBLE FOCUSING OF IONS IN AXIAL SYMMETRIC ENERGY MASS-ANALYSER

The trajectory of ions' motion in the time – span energy mass- analyzer with axial – symmetric electric and magnet fields is considered. The conditions for double focusing of ions going out of source under various angles and having various energies on span period are obtained. It is shown, that upon determined type distribution of electric and magnetic fields the focusing in radial and axial directions takes place.

T.K. Нурубейли

УСЛОВИЯ ДВОЙНОЙ ФОКУСИРОВКИ ИОНОВ В АКСИАЛЬНО СИММЕТРИЧНОМ ЭНЕРГО-МАСС-АНАЛИЗАТОРЕ

Теоретически рассмотрена траектория движения ионов во времяпролетном энерго-масс-анализаторе с аксиально симметричными электрическими и магнитным полями. Получены условия двойной фокусировки по времени пролета ионов, выходящих из источника ионов под различными углами и обладающими различными энергиями. Показано, что при определенном распределении электрического и магнитного полей, имеют место фокусировки в радиальном и аксиальном направлениях.

Received: 19.12.07

THE ROTATION SPECTRUM OF TRANSCONFORMER OF $(CD_3)_2CDOH$ MOLECULE. THE FORBIDDEN TRANSITIONS

Ch.O. KADJAR, S.A. MUSAYEV, S.B. KAZIMOVA, M.E. ALIYEV, E.Ch. SAIDOV

*Institute of Physics of National Academy of Sciences of Azerbaijan,
Baku AZ-1143, H. Javid av., 33*

The rotational spectrum of trans-conformer of deuteroreplaced isopropanol molecule $(CD_3)_2CDOH$, which is registered by hybrid spectrometer with Stark modulation and modulation on double quantum RF-MW resonances with absorbing cell on the base of flute waveguide system in frequency range 17500–79050 MHz is investigated. 105 new authorized and 12 forbidden rotation transitions are identified. The theoretical treatment of spectrum is carried out by rotation Watson Hamiltonian of A-reduction. The spectroscopic parameters of molecule are essentially specified.

Key words: microwave rotation spectrum, Watson Hamiltonian, hybrid spectrometer.

Introduction

First, the investigation of rotation spectrum of deuterated sample of isopropyl alcohol molecule $(CD_3)_2CDOH$ transconformer is carried out in the work [1]. The determination accuracy of spectroscopic constants in this work is comparatively inferior one. Henceforth the molecule investigation in centimeter and millimeter wave band is continued in the works [2-3], where the identification accuracy is confirmed by double RF-MW resonances up to $J=25$. However, all transitions with $J>10$ anew included in calculation are related only to Q -arms. The information for essential precise definition of values of spectroscopic constants isn't enough.

In the present work the problem of noticeable precise definition of rotation and spectroscopic constants of deutero-

replaced isopropanol molecule $(CD_3)_2CDOH$ transconformer at the expense of inclusion of transitions relating to R -arms with high J into reverse spectroscopic problem (RSP) solution is set.

The search and identification of such transitions are carried out on modified hybrid spectrometer with Stark modulation and modulation on double quantum RF-MW resonances with absorbing cell on the base of flute waveguide system in frequency range 17500–79050 MHz [4].

Calculation

The theoretical treatment of spectrum is carried out by rotation Watson Hamiltonian of A-reduction, including only quartic centrifugal constants:

$$\begin{aligned} \tilde{H} = & \frac{1}{2} \left(\tilde{X} - \tilde{Y} \right) J^2 + \left[\tilde{Z} - \frac{1}{2} \left(\tilde{X} + \tilde{Y} \right) \right] J^2 - \Delta_J J^4 - \Delta_{JK} J^2 J_Z^2 - \Delta_K J_Z^4 + \\ & + \frac{1}{2} \left(\tilde{X} - \tilde{Y} \right) J^2 J_{XY}^2 - 2\delta_J J^2 J_{XY}^2 - \delta_K \left(J_Z^2 J_{XY}^2 + J_{XY}^2 J_Z^2 \right) \end{aligned},$$

where X, Y, Z are rotation constants; $\Delta_J, \Delta_{JK}, \Delta_K, \delta_J, \delta_K$ are quartic constants of centrifugal distortion; J_X, J_Y, J_Z are components of total angular momentum J in arbitrary coordinates x, y, z ; $J^2 = J(J+1), J_{XY}^2 = J_X^2 + J_Y^2$.

The calculations are carried out in the second axial representation, when $x \rightarrow c, y \rightarrow a, z \rightarrow b$, where a, b, c are axes of reference, connected with main molecule axes.

As it is known, the several forbidden transitions in rotation spectra are removed in the result of strong rotation-smoking-vibration interaction of energy levels which have similar k_1 and k_2 for both levels appear [5]. The purposeful search of these transitions leads to positive results. The revealing and inclusion of such transitions into RST solution simplify the interpretation of spectrum for high J , widen the possibility of further investigation of millimeter rotational spectrum of trans-conformer molecule $(CD_3)_2CDOH$ and help to unambiguously identify the transitions with high J . The identification of spectrum is carried out by consistent inclusion of frequency transitions into RST solution, beginning from the transitions with low J , the calculation errors of which are minimal ones and the reverse spectroscopic task is solved. The direct spectroscopic task is solved every time after inclusion of new frequencies into calculation and the transitions, the frequencies of which

are calculated with minimal error, are chosen for the further treatment.

The calculation, carried out by this way, gives the possibility to identify 12 forbidden transitions.

Only 105 allowed transitions up to $J=35$, 32 of which are related to R-arms, are succeeded to identify. The frequencies of again identified allowed transitions with the values of experimentally measured frequencies by their differences with calculated values of transition frequencies in the second axial representation are given in the table 1. The frequencies of identified forbidden transitions, which are marked by star, are given in the same table.

The rotation and quartic centrifugal constants, defined by the fit of method of least squares (MLS), calculated on Watson Hamiltonian of A-reduction in the second axial representation of frequencies and their ratio to ones experimentally defined are given in table 2. The same constants, defined on frequencies of 163 transitions in work [3] are included in this table for the comparison. It is seen from the table, that inclusion of frequency spectrum of R-arm transitions into treatment allows to decrease the errors of definition of rotation constants approximately in 3-4 times, and centrifugal ones decrease almost on the one order.

THE ROTATION SPECTRUM OF TRANSCONFORMER OF $(CD_3)_2CDOH$ MOLECULE. THE FORBIDDEN TRANSITIONS

Table 1.
The frequencies (MHz) of identified rotation transitions of $(CD_3)_2CDOH$ molecule.

Transition							$\nu_{exp.}$	$\nu_{calc.}$	$\Delta\nu = \nu_{exp} - \nu_{calc.}$
2	1	1	-	1	0	1	25054.83	25054.70	0.12
3	2	2	-	2	1	1	32853.51	32853.37	0.14
3	1	2	-	2	2	1	28414.86	28414.89	-0.03
4	4	1	-	3	3	1	54688.53	54688.33	0.20
4	2	2	-	3	1	3	62131.50	62131.67	-0.17
4	1	3	-	4	0	4	17483.64	17483.56	0.08
5	3	3	-	4	2	2	54209.26	54209.21	0.05
5	4	2	-	4	3	1	62429.54	62429.39	0.15
5	4	1	-	4	3	1	64462.57	64462.49	0.08
5	2	3	-	4	1	3	63671.26	63671.14	0.11
6	1	6	-	5	1	4	26767.00*	26766.99	0.01
6	2	5	-	5	1	4	54712.43	54712.30	0.13
6	3	3	-	5	4	2	59227.82	59227.79	0.03
6	1	5	-	5	2	4	54623.09	54623.05	0.03
6	6	1	-	6	5	2	19284.97	19284.98	-0.01
6	6	0	-	6	5	2	19327.45	19327.37	0.08
7	6	1	-	6	6	1	74500.06*	74499.89	0.17
7	5	2	-	6	6	1	58766.61	58766.57	0.04
7	5	3	-	6	6	0	54664.34	54664.25	0.09
7	5	3	-	7	4	4	19111.59	19111.40	0.19
7	5	2	-	6	6	0	58724.04	58724.17	-0.13
7	3	4	-	6	4	2	64408.56	64408.48	0.08
7	3	4	-	6	6	0	34378.69	34378.76	-0.07
8	3	5	-	8	2	6	27179.85	27180.05	-0.20
8	2	6	-	8	1	7	32842.26	32842.22	0.04
8	5	3	-	7	6	2	74287.24	74287.25	-0.01
8	1	7	-	7	2	6	70313.66	70313.81	-0.15
8	6	3	-	7	7	1	62382.71	62382.58	0.13
8	5	4	-	7	6	1	64091.34	64091.22	0.12
9	7	3	-	8	8	0	69653.29	69653.43	-0.14
9	6	3	-	9	3	6	57227.92	57227.81	0.11
9	7	2	-	9	4	5	47740.78	47740.58	0.20
9	4	5	-	9	3	6	26315.55	26315.50	0.05
10	3	8	-	9	3	6	58586.24	58586.36	-0.12
10	5	6	-	9	7	2	54477.98*	54477.91	0.07
10	5	6	-	10	4	7	32223.02*	32223.19	-0.17
10	9	2	-	10	8	2	28364.34	28364.43	-0.09
10	5	6	-	10	2	8	69948.07	69948.01	0.06
10	8	3	-	10	7	4	25072.21	25072.28	-0.07
10	9	2	-	10	8	3	28877.64	28877.49	0.15
10	3	8	-	9	4	6	5852.08	58520.07	0.01
11	4	7	-	10	8	3	32914.05*	32914.06	-0.01
11	9	2	-	11	8	3	25990.85	25990.81	0.04
11	8	3	-	11	7	4	17725.03	17724.99	0.04
12	8	5	-	12	5	7	59517.21	59517.24	-0.03
12	8	5	-	11	11	1	31138.42	31138.38	0.04
12	6	6	-	12	5	7	29747.83	29747.82	0.01
12	7	5	-	12	6	6	20477.52	20477.47	0.05
12	9	4	-	12	8	4	21030.90	21030.90	0.00
12	11	2	-	12	10	2	35943.54	35943.42	0.12
13	7	6	-	13	6	7	27668.44	27668.42	0.02
13	11	3	-	13	10	3	34426.88	34426.76	0.12
14	11	3	-	14	10	4	31892.34	31892.44	-0.10
14	10	5	-	13	13	1	31783.27	31783.15	0.12
14	5	9	-	14	4	10	47363.31	47363.24	0.07
15	9	7	-	15	8	8	35640.84	35640.66	0.18
15	2	14	-	15	1	15	73943.32	73943.40	-0.08

1							2	3	4
6	10	6	-	16	9	7	21177.22	21177.12	0.10
16	9	7	-	16	8	8	29972.11	29972.13	-0.02
16	12	5	-	16	11	6	36245.02	36244.97	0.05
17	7	11	-	17	6	12	57369.89	57369.84	0.05
17	12	6	-	17	11	7	35939.60	35939.75	-0.15
18	9	10	-	18	8	11	51093.20	51093.38	-0.18
18	6	12	-	18	5	13	62555.91	62556.00	-0.09
19	6	13	-	18	10	9	28974.31*	28974.74	-0.14
19	7	12	-	19	6	13	62160.71	62160.81	-0.10
19	9	10	-	19	8	11	50202.94	50202.76	0.18
19	19	0	-	19	18	1	65627.28	65627.24	0.04
19	11	8	-	19	10	9	31860.83	31860.92	-0.09
20	20	0	-	20	19	2	69208.15	69208.06	0.09
20	17	4	-	20	16	4	55628.33	55628.45	-0.12
20	18	2	-	20	17	3	60391.93	60391.82	0.11
21	8	13	-	20	12	9	58824.72*	58824.61	0.11
21	18	3	-	21	17	4	59305.20	59305.31	-0.11
21	18	4	-	21	17	4	59305.20	59305.09	0.11
21	17	4	-	20	20	0	28955.48	28955.36	0.12
21	19	2	-	21	18	4	64010.21	64010.21	0.00
22	9	13	-	22	8	14	66436.55	66436.41	0.14
22	18	4	-	22	17	5	57979.61	57979.73	-0.12
22	13	9	-	22	12	11	78351.15	78351.06	0.09
22	18	5	-	21	21	1	28560.28	28560.44	-0.16
22	12	11	-	22	11	12	54252.15	54252.26	-0.11
22	10	13	-	22	9	14	66438.90	66438.97	-0.07
23	0	23	-	22	2	21	72926.30*	72926.38	-0.08
23	19	4	-	22	22	0	28188.11	28188.01	0.10
23	15	8	-	23	14	9	28922.53	28922.69	-0.16
23	17	6	-	23	16	7	49589.07	49589.08	-0.01
23	11	13	-	23	10	14	65856.08	65856.06	0.02
23	9	14	-	23	8	15	71700.08	71699.94	0.14
23	14	9	-	23	13	11	71684.83	71684.94	-0.11
24	1	24	-	23	1	22	75645.73*	75645.71	0.02
24	13	11	-	24	12	12	50409.85	50409.68	0.17
24	18	7	-	23	21	3	57765.51	57765.35	0.16
24	9	16	-	23	11	12	34268.16*	34268.28	-0.12
24	10	15	-	23	13	11	57713.46	57713.58	-0.12
25	10	15	-	24	14	11	73167.90*	73167.91	-0.01
25	16	10	-	25	15	10	18026.13	18026.15	-0.02
26	19	8	-	26	18	9	56585.43	56585.48	-0.05
26	13	14	-	26	12	15	69862.80	69862.71	0.09
26	22	5	-	25	25	1	27146.51	27146.58	-0.07
26	9	18	-	25	11	14	17884.35*	17884.15	0.20
27	12	15	-	27	11	16	75261.80	75261.73	0.07
27	13	15	-	27	12	16	75265.88	75265.98	-0.10
27	9	18	-	26	12	14	32575.42	32575.46	-0.04
29	19	11	-	29	18	11	31865.30	31865.31	-0.01
29	18	11	-	29	17	12	34331.95	34332.10	-0.15
30	20	10	-	30	19	12	59208.96	59208.95	0.01
31	15	16	-	31	14	17	78349.97	78349.93	0.04
31	21	10	-	31	20	11	51000.48	51000.59	-0.11
32	22	11	-	32	21	11	56537.87	56537.82	0.05
32	20	13	-	32	19	14	58802.91	58802.97	-0.06
32	18	15	-	32	17	16	70572.06	70572.17	-0.11
32	22	10	-	32	21	12	62802.36	62802.30	0.06
33	23	11	-	33	22	11	62751.02	62750.97	0.05
34	22	13	-	34	21	14	60675.99	60675.89	0.10
34	23	11	-	34	22	12	57136.77	57136.67	0.10
35	25	10	-	35	24	11	72951.43	72951.48	-0.05

Here $\Delta\nu = \nu_{exp} - \nu_{calc.}$

THE ROTATION SPECTRUM OF TRANSCONFORMER OF $(CD_3)_2CDOH$ MOLECULE. THE FORBIDDEN TRANSITIONS

The correlation matrix of Watson Hamiltonian constants of A-reduction, and also asymmetry parameter of χ molecule are given in table 3. The spectrum identification is confirmed by good fit by MLS in all three axial representations (table 4).

Result discussion

The values of rotation and centrifugal constants, presented in the table 4, are used at the calculation of defined combinations of spectroscopic constants, not depending on the choice of axial representation [6]. As it is expected, the values of calculated defined combinations of spectroscopic constants don't depend on the choice of axial representation and the degree of their equality to each other in all three axial representations is the criteria of objective estimation of quality of fit procedure of spectroscopic parameters in different axial representations. The value

interval of defined combinations of spectroscopic parameters in all three axial representations is minimal one (table 5) in the result of inclusion of big number of R-arm transitions and ones with high J into fit procedure.

Conclusion

The spectroscopic parameters, specified in the present work allow us to describe the rotation spectrum of the given molecule with high accuracy. These constants can be used at the specification of monohydric alcohol structures, definition of intramolecular potential functions, electric and relaxation characteristics of molecule for prediction of transition frequencies which haven't been revealed yet experimentally by any reasons.

The obtaining of frequencies calculated on specified spectroscopic constants at local and remote sensings of atmosphere and space has the essential value.

Table 2.

The rotation and centrifugal constants of $(CD_3)_2CDOH$ molecule.

Constants	Work [3]	Present paper
A (MHz)	7035.7587 (0.0040)	7035.7701 (0.0012)
B (MHz)	6006.3329 (0.0040)	6006.3450 (0.0015)
C (MHz)	3915.4308 (0.0040)	3915.4438 (0.0012)
Δ_J (kHz)	2.8000 (0.0354)	2.8854 (0.0015)
Δ_{JK} (kHz)	-1.8033 (0.0106)	-1.8139 (0.0015)
Δ_K (kHz)	2.8158 (0.0081)	2.8271 (0.0013)
δ_J (kHz)	-0.9410 (0.0016)	-0.9401 (0.0004)
δ_K (kHz)	-0.3352 (0.0031)	-0.3314 (0.0007)

Table 3.

The rotation and centrifugal constants of $(CD_3)_2CDOH$ molecule and their correlation matrix.

Spectroscopic constants	Correlation matrix						
	A	B	C	Δ_J	Δ_{JK}	Δ_K	δ_J
$A = 7035.7701$ MHz							
$B = 6006.3450$ MHz	0.89						
$C = 3915.4438$ MHz	0.89	0.94					
$\Delta_J = 2.8854$ kHz	0.59	0.73	0.71				
$\Delta_{JK} = -1.8139$ kHz	0.20	0.07	0.23	-0.03			
$\Delta_K = 2.8271$ kHz	-0.25	-0.07	-0.13	0.15	-0.91		
$\delta_J = -0.9401$ kHz	-0.31	-0.60	-0.53	-0.86	-0.07	-0.07	
$\delta_K = -0.3314$ kHz	0.32	0.33	0.28	0.35	0.64	-0.67	-0.48

Table 4.

The rotation and centrifugal constants of $(CD_3)_2CDOH$ molecule in three axial representations.

Spectroscopic parameters	Axial representation		
	I ^r	II ^r	III ^r
X (MГп)	6006.3503(0.0012)	3915.4438(0.0012)	7035.7659 (0.0015)
Y (MГп)	3915.4421(0.0012)	7035.7701(0.0015)	6006.3517 (0.0013)
Z (MГп)	7035.7668(0.00015)	6006.3450(0.0013)	3915.4416 (0.0011)
Δ_J (кГп)	2.4522 (0.0013)	2.8854(0.0015)	4.3326 (0.0020)
Δ_{JK} (кГп)	-0.5135 (0.0017)	-1.8139(0.0015)	-6.1544 (0.0019)
Δ_K (кГп)	2.8275 (0.0013)	2.8271(0.0013)	2.8268 (0.0013)
δ_J (кГп)	0.7233 (0.0003)	-0.9401(0.0004)	0.2168 (0.0002)
δ_K (кГп)	1.1917 (0.0012)	-0.3314(0.0006)	-1.8639 (0.0015)

Table 5.

Defined combinations of spectroscopic parameters of $(CD_3)_2CDOH$ molecule.

Parameters	Axial representation		
	I ^r	II ^r	III ^r
A (MHz)	7035.77168	7035.77148	7035.771755
B (MHz)	6006.35084	6006.35074	6006.350910
C (MHz)	3915.45030	3915.45027	3915.450236
T _{aa} (kHz)	-4.76622	-4.76558	4.766308
T _{bb} (kHz)	3.89890	- 3.89861	- 3.898930
T _{cc} (kHz)	-1.00551	- 1.00528	- 1.005023
T ₁ (kHz)	-6.84313	- 6.84234	-6.843405
T ₂ (kHz)	-2.06585	- 2.06574	- 2.065901

- [1] Ch.O. Kadjar, S.A. Musayev, E.Yu. Salayev. Jurnal prikladnoy spektroskopii, 1983, t. 39, n. 1, s. 69-74.
 [2] Ch.O. Kadjar, S.A. Musayev, E.Yu. Salayev. Optika i spektroskopiya, 1983, t. 55, № 4, c. 648-652.
 [3] Ch.O. Kadjar, S.A. Musayev, E.Ch. Saidov. FIZIKA, 2001, t. 7, n. 2, s. 25-31.
 [4] Ch.O. Kadjar, S.A. Musayev, A.A. Abdullayev, M.E. Aliyev. Приборы и техника эксперимента, 2005, №2, с.95-97.
 [5] M.R. Aliyev. Uspekhi fizicheskikh nauk, 1976, t.119, vip.3, s.557-572.
 [6] J.K.G. Watson. J. Chem. Phys., 1967, v. 46, N 5, p. 1935-1949.

Ç.O. Qacar, S.A. Musayev, S.B. Kazimova, M.E. Əliyev, E.Ç. Səidov

(CD₃)₂CDOH MOLEKULUNUN TRANS-KONFORMERİNİN FIRLANMA SPEKTRİ. QADAĞAN OLUNMUŞ KEÇİDLƏR

$(CD_3)_2CDOH$ molekulunun trans-konformerinin fırlanması spektri tədqiq edilmiş, 12 qadağan olunmuş keçid identifikasiya edilmişdir. $105 \mu_b$ və μ_c keçidi identifikasiya olunmuşdur. Fırlanması spektrinin nəzəri təsvirində Vatsonun A-reduksiyali fırlanması hamiltonianından istifadə edilib. Molekulun fırlanması və mərkəzəqəcəma sabitləri dəqiqləşdirilmişdir.

Ч.О. Каджар, С.А. Мусаев, С.Б. Кязимова, М.Е. Алиев, Е.Ч. Сайдов

ВРАЩАТЕЛЬНЫЙ СПЕКТР ТРАНС-КОНФОРМЕРА МОЛЕКУЛЫ (CD₃)₂ СДОН. ЗАПРЕЩЕННЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Исследован вращательный спектр транс-конформера молекулы дейтерозамещенного изопропанола – $(CD_3)_2CDOH$, который регистрировался гибридным спектрометром со штарковской модуляцией и модуляцией по двойным квантовым РЧ-МВ резонансам с поглощающей ячейкой на базе желобковой волноводной системы в диапазоне частот 17500-79050 МГц. Идентифицировано 105 новых разрешенных и 12 запрещенных вращательных переходов. Теоретическая обработка спектра осуществлялась вращательным гамильтонианом Ватсона А-редукции. Существенно уточнены спектроскопические параметры молекулы.

Received: 04.12.07

STATE DIAGRAM OF TiInS_2 – TiCrS_2 , TiGaSe_2 – TiCrSe_2 SYSTEM AND ELECTRIC PROPERTIES OF LAYERED COMPOUNDS TiCrS_2 , TiCrSe_2

R.G. VELIYEV, F.M. SEYIDOV, A.I. JABBAROV

*Institute of Physics of National Academy of Sciences of Azerbaijan
Az-1143, Baku, H. Javid av., 33*

State diagram of TiInS_2 – TiCrS_2 and TiGaSe_2 – TiCrSe_2 systems has been investigated. It is established that the limited solid solutions form on the base of initial compounds. It is supposed that the existence of polar (dipole) and magnetic (spin) orderings is possible in the forming solid solutions. The electric properties of TiCrS_2 and TiCrSe_2 , which reveal that these compounds are semiconductors of *p*-type, are investigated in temperature interval 80–400K.

The search of semiconductor ferroelectromagneto-active layered crystals is the actual task of solid-state physics, i.e. physicotechnical parameters of such crystals are varied in wide range in the result of the fact that the dependence of physical properties of traditionally regulated factors such as temperature, electric and magnetic fields on main crystallographic directions is added to them [1,2].

The layered compounds TiInS_2 , TiGaSe_2 at high temperatures have semiconductor properties [3,4], and at low temperatures they have ferroelectric ones [5–8].

In work [9] the compounds TiCrS_2 , TiCrSe_2 had been synthesized firstly and X-ray-, neutron-graphic and magnetic investigations had been carried out. The authors conclude that given compounds crystallize in hexagonal structure with big enough relation c/a (~ 6) and are ferromagnetics. However, electric properties of layered ferromagnetics TiCrS_2 , TiCrSe_2 haven't been investigated; correspondingly, it isn't clear what type of conduction they have.

Taking into consideration above mentioned, TiCrS_2 , TiCrSe_2 are investigated by us from chemical elements, suspended in stoichiometric relation. Previously the chromium is rendered in powdered state with the help of ball mill. The compounds are put into quartz ampoules, which are evacuated up to residual pressure $\sim 10^{-3}$ Pa. The synthesis is carried out in the electric furnace at temperature ~ 1150 K during 120 hours, further the reaction product is thoroughly crushed and synthesis repeats. Further the given compositions are rendered in powdered state, pressed and treated by homogenizing in evacuated quartz ampoules at temperature ~ 600 K during 480 hours.

X-ray analysis of TiCrS_2 , TiCrSe_2 is carried out at room temperature (~ 300 K) on diffractometer DRON-3M in CuK_α -radiation. The angular resolution of the shooting is $\sim 0,1^\circ$. The diffraction patterns are recorded constantly and diffraction angles are defined by measurement method on intensity maximum. The calculation error of diffraction patterns show that synthesized compositions indicate on the base of parameters of hexagonal lattice: $a=3,538\text{\AA}$; $c=21,962\text{\AA}$; $c/a\sim 6,207$; $z=3$; sp.gr. R3m; $\rho_x=6,705\text{g/cm}^3$ for TiCrS_2 and $a=3,6999\text{\AA}$; $c=22,6901\text{\AA}$; $c/a\approx 6,133$; $z=3$; sp.gr. R3m; $\rho_x=6,209\text{ g/cm}^3$ for TiCrSe_2 .

Note, X-ray investigations, carried out by us well agreed with [9].

The electric properties of compounds TiCrS_2 and TiCrSe_2 are investigated in temperature interval 80–400K. The electron conduction (σ) and thermo-e.m.f. coefficient (α) of TiCrS_2 , TiCrSe_2 are measured by four-probe compensation method.

The temperature dependencies of electric conduction and thermo-e.m.f. coefficient of TiCrS_2 compound are presented on the fig.1. As it is seen from the figure, the temperature dependence of electric conduction has the semiconductor motion and behavior of thermo-e.m.f. coefficient on temperature evidences about charge transition by carriers of *p*-type. Moreover, the anomaly on $\alpha(T)$ TiCrS_2 dependence (~ 340 K) which is connected with umklapp process of *p*-type carriers in conduction band of TiCrS_2 semiconductor is observed.

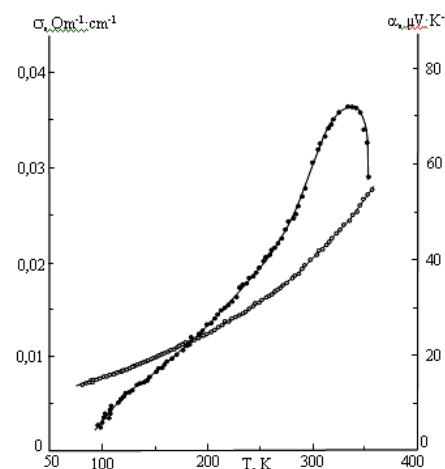


Fig.1. The temperature dependence of electrical conduction (●) and thermo-e.m.f. coefficient (○) of TiCrS_2 .

The temperature dependencies of electric conduction and thermo-e.m.f. coefficient of TiCrSe_2 compound are given on the fig.2. As it seen from the figure, the temperature dependence of electric conduction of TiCrSe_2 has the semiconductor character in whole. However, beginning from temperature $T\approx 125$ K the fracture with temperature duration ~ 110 K appears on dependence $\sigma(T)$ TiCrSe_2 . Probably, the fracture on dependence $\sigma(T)$ TiCrSe_2 is connected with scattering of charge *p*-carriers on spin fluctuation heterogeneities [10], appearing at transition of spin system of layered ferromagnetic TiCrSe_2 from three-D magnetic ordering into paramagnetic state. The behavior of thermo-e.m.f. coefficient on TiCrSe_2 temperature evidences about charge transition by *p*-type carriers, i.e. the positive numerical α values increase in the investigated temperature interval.

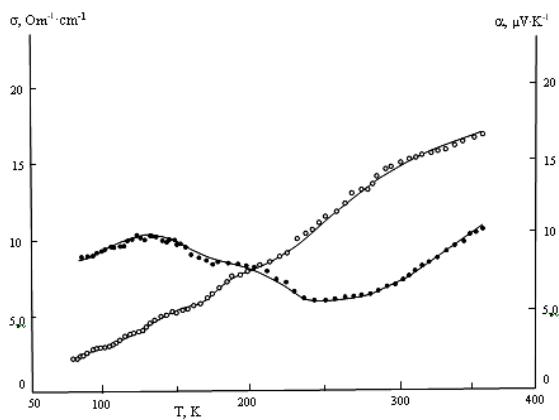


Fig.2. The temperature dependence of electrical conduction (●) and thermo-e.m.f. coefficient (○) of TiCrSe_2 .

18 samples are prepared for study of interaction of TiInS_2 with TiCrS_2 . The initial compounds TiInS_2 and TiCrS_2 are synthesized from chemical elements, suspended in stoichiometric relation in quartz ampoules, evacuated up to residual pressure $\sim 10^{-3}$ Pa. The mode of alloy synthesis is chosen on the base of melting point of initial compounds: 1050K for TiInS_2 , 1455K for TiCrS_2 . Each alloy is heated higher melting point of initial compounds and endured at this temperature during 7-9 hours, further the temperature in furnace is decreased up to room one with velocity 100K in hour. The synthesized alloys for homogenization are annealed during 480 hours at ~ 700 K in the case of alloys, containing TiInS_2 and during 570 hours at ~ 970 K in the case of alloys, containing TiCrS_2 .

The annealed samples in evacuated quartz ampoules with the end, concave inside, are investigated by the method of differential-thermal analysis (DTA). DTA is carried out on installation HTP-64, allowing fixing the phase transformation temperature with delicacy ± 10 K. The heating rate is 2-4K/min. The temperature of the ampoules with annealed compositions is controlled by thermocouple $Pt-Pt/Rh$. Previously, the thermocouple is graduated on standard substances in interval 430-1560K.

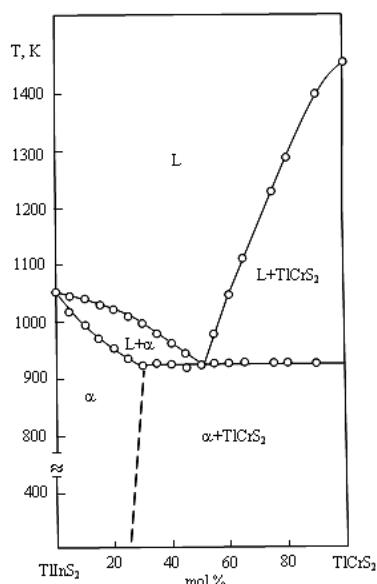


Fig.3. State diagram of $\text{TiInS}_2 - \text{TiCrS}_2$ system.

State diagram of $\text{TiInS}_2 - \text{TiCrS}_2$ system, constructed on the results of differential-thermal analysis is presented on the figure 3. This system is quasi-binary one of eutectic type with wide regions of solid solutions on the base of TiInS_2 , achieving at 300K up to 25 mol.% TiCrS_2 . The eutectic forms at component relation 1:1. The eutectic melts at 925K and has the composition $(\text{TiInS}_2)_{0.5} (\text{TiCrS}_2)_{0.5}$.

Thus the existence of polar (dipole) and magnetic (spin) orderings is possible in $\text{TiInS}_2 - \text{TiCrS}_2$ system from the side of TiInS_2 (up to 25 mol.% - TiCrS_2). Moreover, homogeneous phases will have the semiconductor motion of conduction, i.e. initial compounds TiInS_2 and TiCrS_2 are semiconductors.

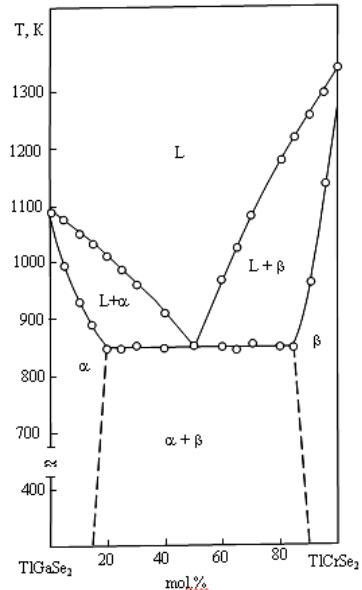


Fig.4. State diagram of $\text{TiGaSe}_2 - \text{TiCrSe}_2$ system.

17 samples are prepared of study of interaction of TiGaSe_2 c TiCrSe_2 . The initial compounds TiGaSe_2 and TiCrSe_2 are synthesized from chemical elements, suspended in stoichiometric relation in quartz ampoules, evacuated up to residual pressure $\sim 10^{-3}$ Pa. The mode of alloy synthesis is chosen on the base of temperature of their melting points: 1085K for TiGaSe_2 and 1340K for TiCrSe_2 . Each alloy is heated higher melting point of initial compounds and endured at this temperature during 6-8 hours, further the temperature in furnace is decreased up to room one with velocity 100K in hour. The synthesized alloys for homogenization are annealed during 480 hours at ~ 700 K in the case of alloys, containing TiInS_2 and during 570 hours in the case of alloys, containing TiCrS_2 . The synthesized alloys for homogenization are annealed during 410 hours at ~ 720 K in the case of alloys, containing TiGaSe_2 and during 480 hours at ~ 890 K in the case of alloys, containing TiCrS_2 . The annealed samples in evacuated quartz ampoules with the end, concave inside, are investigated by the method of differential-thermal analysis (DTA). DTA is carried out on installation HTP-64, allowing fixing the phase transformation temperature with delicacy ± 10 K. The heating rate is 2-4K/min. The temperature is controlled by thermocouple $Pt-Pt/Rh$, on the head of which the ampoules with annealed compositions are get on in turn.

State diagram of $\text{TiGaSe}_2 - \text{TiCrS}_2$ system, constructed on the results of differential-thermal analysis is presented on the figure 4. This system is quasi-binary one of eutectic type

with limited regions of solid solutions on the base of TiGaSe_2 , achieving up to 15 mol.% TiCrSe_2 , on base of TiCrSe_2 , achieving up to 10 mol% TiGaSe_2 at room temperature (~300K). The eutectic forms at component relation 1:1. The eutectic melts at 850K and has the composition $(\text{TiGaS}_2)_{0.5} (\text{TiCrS}_2)_{0.5}$.

- [1] R.K. Veliyev, Mir-Gasan Yu.Seidov, F.M. Seidov, E.M. Kerimova, T.G. Mammadov. Inorgan Materials, 2003, 39, 7, 805 (in Russian)
- [2] R.K. Veliyev, Mir-Gasan Yu.Seidov, E.M. Kerimova, F.M. Seidov, R.Z. Sadikhov, A.I. Jabbarov. Fizika, 2004, X, 1-2, 62.
- [3] E.M. Kerimova. Aftoreferat kand. diss., Baku, 1970, 15 p.(in Russian)
- [4] F.M. Seidov. Aftoreferat kand. diss., Baku, 1976, 18 p. (in Russian)
- [5] F.M. Salayev, K.R. Allakhverdiyev, F.A. Mikailov. J.Ferroelectrici, 1997, 131, 1-4, 163.
- [6] R.A. Suleymanov, M.Yu. Seidov, F.M. Salayev, F.A. Mikailov. FTT, 1993, 35, 7, 348 (in Russian)
- [7] K.R. Allakhverdiyev, N.D. Akhmed-zade, T.G. Mamedov, T.S. Mamedov, M.Yu. Seidov. FNT, 2000, 26, 1, 76 (in Russian)
- [8] F.A. Mikailov, T. Basharan, T.G. Mammadov, M.Yu. Seidov, E. Senturk, J.Phizika B, 2003, 334, 1-2, 13
- [9] M.Rosenberg, A.Knulle, H.Sabrowsky, C.Platte. J.Phys. Chem Soleds, 1982, 43, 2, 82
- [10] V.A. Ignatchenko, G.A. Petrakovski. Physics of magnetic materials. Novosibirsk. Pub "Science", 1983, 155 p (in Russian).

R.Q. Veliyev, F.M. Seidov, A.İ. Cabbarov

TIInS₂–TiCrS₂, TiGaSe₂–TiCrSe₂ SİSTEMLƏRİNİN HAL DİAQRAMLARI VƏ LAYLI TiCrS₂, TiCrSe₂ BİRLƏŞMƏLƏRİNİN ELEKTRİK XASSƏLƏRİ

TIInS₂ –TiCrS₂ və TiGaSe₂ –TiCrSe₂ sistemlərinin hal diaqrammaları öyrənilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, başlanğıc birləşmələrin əsasında məhdud bərk məhlullar əmələ gəlir. Ehtimal olunur ki, əmələ gələn bərk məhlullarda dipol və spin nizamlanması mövcud ola bilər. TiCrS₂, TiCrSe₂ birləşmələrinin 80÷400K intervalında elektrik xassələri tədqiq olunmuşdur və aşkar olunmuşdur ki, göstərilən birləşmələr *p*-tipli yarımkənarıcı xarakterə malik olurlar.

Р.Г. Велиев, Ф.М. Сеидов, А.И. Джаббаров

ДИАГРАММА СОСТОЯНИЯ СИСТЕМ TIInS₂–TiCrS₂, TiGaSe₂–TiCrSe₂ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОИСТЫХ СОЕДИНЕНИЙ TiCrS₂, TiCrSe₂

Исследована диаграмма состояния систем TIInS_2 – TiCrS_2 и TiGaSe_2 – TiCrSe_2 . Установлено, что на основе исходных соединений образуются ограниченные твердые растворы. Предполагается, что в образующихся твердых растворах возможно существование полярного (дипольного) и магнитного (спинового) упорядочений. В интервале температур 80÷400К исследованы электрические свойства TiCrS_2 и TiCrSe_2 , которые выявили, что эти соединения являются полупроводниками *p*-типа.

Received: 15.01.08

UTILIZATION OF PRODUCTION LIQUID WASTES WITH THE USE OF HIGH-TEMPERATURE ENERGY OF DEVIATING GASES

A.F. ALIYEV

*Azerbaijan Scientific-Research and Designed-Prospection Institute of Energetics LTD
Baku, G. Zardabi av., 94*

The utilization technology of production liquid wastes with the use of high-temperature energy of deviating smoke fumes is proposed. The apparatus constructive peculiarities with fluidized bed are given. The technology can be used on the heat power plants.

The apparatuses with fluidized bed (FB) are recommended for utilization of production liquid wastes. The wide use of FB process in the different sectors of industry for diverse technological processes, wide range of productivities of single apparatus, different approach ways to process engineering design cause the appearance of whole set of modifications of quasi-liquefaction method and apparatus constructions [1,2]. The following characters of FB apparatuses can be emphasized.

1) The apparatus configuration in FB band can be cylindrical, cylindrical-conical, square, rectangular ones. There are apparatuses with two or more bands, with step change of area of section by the height and etc.

2) The construction of gas-distribution lattice is carried out in the form of plane plate with holes or cracks, caps, nozzles for the introduction of fluidizing agent of failed or non-failed types and etc.

3) The introduction of initial material in FB apparatus can be carried out under the bed or below bed level in the one point or distributed. The different feeders, spreaders, burners, which are mechanical, pneumatic, combined ones, are used for this.

4) The output of dry material is carried out on the different levels of FB (upper, lower, and intermediate). The installations with total output of dry product from FB of inert particles are known.

5) The heat application to apparatus also can be different. In many cases the fluidizing agent is heat-transfer-agent, the part or whole heat can be supplied by the firing in apparatus, in some cases part of heat is transformed through heat-exchange surfaces.

The listed abilities don't exhaust the whole variety of the method and FB apparatus constructions. The descriptions of new methods and apparatus types regularly appear in literature.

The character temperature balancing of heat-transfer agent and level on small distance from gas-distributed lattice, which don't exceed 40 mm at heat loadings $2\div3\cdot10^6$ kkal/m²·h is established for fluidization process. From this point of view, it is rational to carry out the process at maximum possible heat-transfer agent temperature and minimum accessible bed temperature in FB apparatuses. The heat-transfer agent temperature in real FB changes in the limits 150-1200°C, and bed temperature changes in the limits 95-350°C [4]. The bed temperature is the main factor, defining the final product moisture content, which practically doesn't depend on initial humidity, loading and unloading methods of dehydrated material.

The real process of constant and final material moisture content in the bed is caused by the high intensity of moisture removal at long estimation of main material mass in the bed.

The heat-transfer agent temperature changes in the limits from 1100° up to 100°C, the least layer temperature $t_l=50^\circ\text{C}$, gas velocity in the bed changes in the limits from 0,1 up to 5m/s in the dependence on fineness of grain of material, heat loading Q changes from $1,3\cdot10^4$ up to $5,3\cdot10^6$ kkal/m²·h in the possible dehydration conditions in FB apparatuses. The specific heat changes from ~30 kkal/kg up to ~3000 kkal/kg at initial humidity of feed stock from 2 up to 80%, i.e. at the change of initial humidity (W_H) from 0,03 up to 4 at final humidity (W_K), which is equal to zero, correspondingly. The specific capacity of FB apparatus on dry product can change from 4,6 up to $1,8\cdot10^5$ kg/m²·h, correspondingly.

It is obvious, that average time of material estimation in the bed changes in wide limits from 7,7 up to 87h. For solutions τ_{av} is from 30 min up to 1h and more on calculation data.

The transitions by the type moistening – dehydration are reflected in the construction of granules, forming in the bed at solution fluidization, which present the nucleus with several membranes: rings on granule cuts show the number of "drying-moistening" cycles for the estimation time of particle in the bed.

It is obvious, that relation of quantity of dry hot and cool moist particles in the common case should increase with the increase of moisture quantity, evaporated in the bed.

Practically the bed height is chosen by experience from the stable apparatus work, uniform fluidization without channeling and balling of the bed point of view.

The particles of different sizes are in FB in real conditions, that's why there is definite region of gas velocities, corresponding to fluidized state of whole mass of these particles. The velocity of gas flow, corresponding to fluidized state, depends not only on particle sizes, but on their forms and densities. The gas velocity, corresponding to the beginning of bed transition into suspension state, so-called first critical velocity and gas velocity, corresponding to the beginning of entrainment of small particles from the bed, which is second critical velocity, present the most practical interest.

The conception about fluidization number K_W , which is equal the relation of operating rate of gas flow to the first critical velocity is often used for the characteristics of fluidized bed.

The optimal values K_W for each technological process vary in wide limits. The intensive mixture of solid particles in the bed takes place at value $K_W=2$. For very small particles

(or for big viscosity of fluidizing agent) $K_W=80$, for large particles (or low viscosity of fluidizing agent) $K_W=8$.

It was mentioned above, that solution fluidization in FB apparatus is usually accompanied by formation of dry granular material. The granulation process consists of complicated complex of phenomena: growth because of deposition of dissolved substance on the surface, so-called normal growth, particle agglomeration, appearance of new ones because of granule crushing or at substance precipitation from the solution, agglomeration of fragments because of normal growth and etc.

It is considered, that realization of industrial process is based on the stabilization of bed granulometric composition and possibility of its regulation with taking under consideration the continuous solution introduction and material loading, i.e. the quantity of new centers should compensate the diminution of particles because on unloading at constant bed weight and composition. If there aren't enough the appearing new centers of granule formation for process stabilization, then they are introduced from outside in the form of small material.

For preliminary calculation let's take that mono-dispersion material with ball-shaped granules by diameter 1 mm will be obtained in FB apparatus. The formation velocity of fluidized bed, defined with the help of criterion equations, will be equal to 0.4184m/c. The entrainment velocity will be 5.5m/c.

The diameter of gas-distribution lattice is 270 mm. The quantity of holes is 330 by diameter 3 mm with countersinking below up to 6 mm. The square of gas-distributed lattice is equal 0.0572 m². The part of lattice flow section is 0.0408.

The heat quantity, given by one cubic meter of smoke fumes to fluidized bed is 21.51 kkal at decrease of gas temperature in the layer on 50°C. If we take under consideration the fact that approximately 600-700kkal is necessary for heating and evaporation of 1 kg salt solution, then necessary gas consumption will be 28-33m³/kg. By orientation data [5] the electric energy consumption on 1kg of moisture, evaporated in FB apparatus is 0.11kVt·h for blow fan and 0.04kVt·h for draft fan.

The executive scheme of experimental-industrial installation is presented on the fig.1. The apparatuses with fluidized bed 1, blow fan 2, vessel for salt solution 3, compressor 4 are included in installation composition. FB apparatus is produced from still 3 by thickness 3 m in the form of welded tuncated cone with cutout 22°, the height of conical part of apparatus 3 m, and diameter of gas-distribution lattice 270m. The gas-distribution lattice 8 is produced from still 3 by thickness 20 mm. The diameter of holes in the lattice is 3 mm, below the lattice holes are countersunk ones by half of lattice thickness, the area of flow section is 5% from total area of gas-distributed lattice.

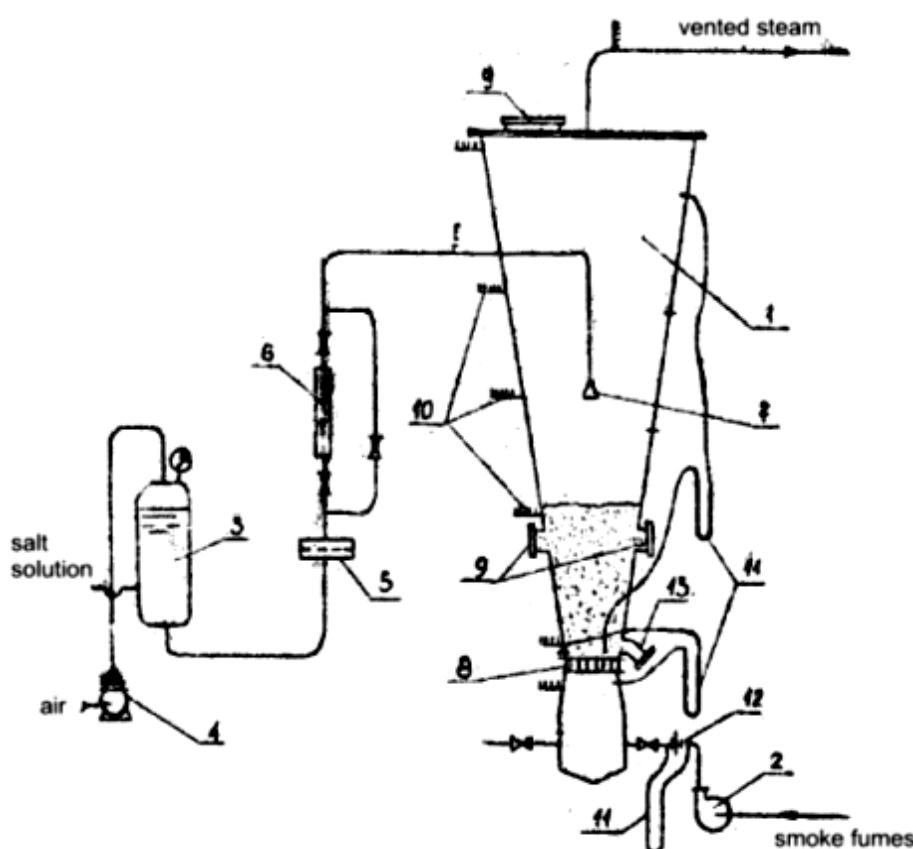


Fig. The technological scheme of experiment-industrial installation for dehydration of salt solution in FB apparatus with the use of heat of smoke fumes: 1 is FB apparatus; 2 is fan; 3 is concentrate (salt solution) capacity; 4 is compressor; 5 is filter; 6 is rotameter; 7 is burner; 8 is lattice; 9 are sight glasses; 10 are thermometers; 11 are manometers; 12 is Pitot tube; 13 is unloading of wastes (salts).

The smoke fumes are taken from boilers up to economizer and are pumped to FB apparatus by blow fan 2 at pressure

750 millimeter of mercury. The consumption of smoke fumes is measured with the help of Pitot tube12 and manometer.

The temperature of smoke fumes before economizer is equal to 160°C, thus, smoke fume is the fluidizing agent and heat-transfer agent simultaneously.

The production liquid wastes are put into capacity 3, whence are put into FB apparatus under pressure 1,5-3atm, created by air compressor 4. The concentrate in FB apparatus is sputtered under fluidized bend with the help of burner 7 of rugged scattering. The consumption of salt solution is measured by rotameter 6. The filter 5 is fixed for the prevention of burner clogging by corrosion products and different mechanical impurities on concentrate delivery line. The possibility of regulation of burner scattering and

possibility of change of its position on the apparatus height are foreseen.

The liquid wastes (concentrates) in FB apparatus contact with hot bed particles, heat and evaporate. The evaporated moisture is taken from apparatus in the mixture with withdrawing smoke fumes. The dry product, forming in apparatus, is deduced from it through unloading 13.

The apparatus FB is equipped by sight glasses 9, thermometers 10 and manometers 11 for pressure measurements for control and regulation of the process.

It is proposed to use the technology on the heat power plants.

- [1] A.F. Aliyev. Vibor sposoba i tekhnologii demineralizaci shakhtnikh vod shakht "Luganskaya" i "Proletarskaya" s uglikaciye koncentratov. Izd. Az. NII NTI, Baku, 1992, (ser. Mejotraslevaya). (in Russian)
- [2] A.F. Aliyev. Vibor sposoba i tekhnologii demineralizaci shakhtnikh vod shakht "Luganskaya" i "Proletarskaya" s uglikaciye koncentratov. Otchet Bak.filiala VNII VODGEO, 168s., Mikrofilmirovano v VNTIC, SSSR, Moskow, 1992. (in Russian)
- [3] Yu.Ya. Kaganovich, A.G. Zlobinskiy. Promishlenniye ustanovki dlya sushki v kipyashshem sloye. L. "Khimiya", 1970.
- [4] V.V. Ashanin, A.A. Govert. Razrabotat metod opresneniya shakhtnoy void s viparivainiyem rassola i polucheniem sukhikh otkhodov. Otchet Bak.filiala VNII VODGEO, M., 1974, Mikrofilmirovano v VNTIC, SSSR, Moskow, 1975. (in Russian)
- [5] O.B. Citovich, M.Sh. Islamov. Prakticheskoye ispolzovaniye apparatov s kipyashshim sloyem dlya obezvrejivaniya promstokov. Trudi Leningradskogo NIUPI osnovnoy khimicheskoy promishlennosti, vip.1, 1973. (in Russian).

A.F. Əliyev

AYRILAN QAZLARIN YÜKSƏK TEMPERATURLU ENERJİSİNDEN İSTİFADƏ ETMƏKLƏ İSTEHSALIN MAYE TULLANTILARININ UTILİZASIYASI

Ayrılan tüstü qazlarının yüksək temperaturlu enerjisindən istifadə etməklə istehsalın maye tullantılarının utilizasiya üçün texnologiya təklif olunur. Pseudomaye qatlı aparatin konstruksiya xüsusiyyətləri göstərilmişdir. Texnologiya istilik elektrik stansiyalarında istifadə oluna bilər.

А.Ф. Алиев

УТИЛИЗАЦИЯ ЖИДКИХ ОТХОДОВ ПРОИЗВОДСТВА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ЭНЕРГИИ ОТВОДЯЩИХ ГАЗОВ

Предлагается технология утилизации жидких отходов производства с использованием высокотемпературной энергии отводящих дымовых газов. Приводятся конструктивные особенности аппарата с псевдоожженным слоем. Технология может быть использована на тепловых электростанциях.

Received: 18.11.07

INSTALLATION FOR DEFINITION OF SCALE-FORMING AND CORROSIVE WATER PROPERTIES IN THE HARD CONDITIONS OF THERMAL EVAPORATION

A.F. ALIYEV

*Azerbaijan Scientific-Research and Designed-Prospection Institute of Energetics LTD
Baku, G. Zardabi av., 94*

The installation for investigation of processes of metal scale formation and corrosion in the hard conditions of thermal evaporation of waters of different mineralization has been developed. The investigations on this installation allow us to develop the series of methods of prevention of metal scale formation and corrosion in respect to work conditions of power electric energy installations.

The installation (fig.), allowing to investigate the processes of corrosion and scale formation on the heat-exchange surfaces of water evaporators in the exploitation extreme conditions by express method has been developed by us.

The installation consists of two parts: evaporator 1 and steam generator 2, produced from stainless steel.

The distilled water, which is heated up to necessary temperature by thermoelectric heater 5, having 2 kilowatt power is filled in steam generator. The steam temperature is regulated by pressure gage (PG). The steam gets in the least tube of evaporator spiral 6 and passing through it, returns back to steam generator in the form of condensate through big tube.

The investigated water or water with addition of reagents, which is heated by heat-exchange spiral, is filled in evaporator: water evaporation is carried out at atmospheric pressure and more up to necessary multiplicity.

The water steam, passing through heat exchanger (refrigerator) 4 is dropped in the form of distillate through gate 3 in assembly vessel up to achievement of defined

multiplicity of evaporation. Further, the evaporator is sealed and boiling temperature of investigated water is increased up to necessary volume ($101\text{-}140^{\circ}\text{C}$). The temperature mode of installation is supported by contact manometer in the process of experiment.

The active area of surface of heat-exchange spiral is $0,068\text{m}^2$. The hooks for hanger of metal samples are built in upper cap of evaporator. The surface temperature of each turn of heat-exchange spiral is defined in the preliminary experiments by chromel-copel thermocouples, calked on their surfaces.

The scale from surface of heat-exchange spiral is carefully shaved, heightens and analyzed after experiment end.

The control experiment on the crude initial water for result comparison proceeds to each experiment with reagent use.

The experiments, carried out on this installation, allow us to develop the new methods of preventing of scale formation [1,3-9] and corrosion [2] in respect to water evaporators of wide range of mineralization (table).

Table.

The experiment results of new antiscale composition in waters of different mineralization.

Name of inhibitor of scale formation or antiscale composition or corrosion inhibitor	Optimal doze in waters of different mineralization ($1 \leq K_y \leq 2$; $1 \leq U_{av} (\text{m} / \text{c}) \leq 2$), mg/l					
	Fresh, $t^{\circ}\text{C}, \sim$		Saltish, $t^{\circ}\text{C}, \sim$		Caspian, $t^{\circ}\text{C}, \sim$	
	100	140	100	140	100	140
1-2. Disodium salt of thiocarbonic acid [1,2]	70	90	80	100	140	160
3. Cis-4-cyclogexen-1,2-dicarbonic acid [3]	140	150	180	200	200	230
4. Monoamid cis-4-cyclogexen-1,2-dicarbonic acid [4]	90	100	100	110	120	140
5. N-monoamid chlorendic acid [5]	120	130	160	180	180	200
6. N-maleinmonoamid [6]	80	90	100	110	125	140
7-8. N-oximid terahydroftal acid [7,8]	60	80	80	100	120	140
9. Angidrid izomethyl of tetrahydroftal acid [9]	50	70	70	90	100	120

Designations: K_y is evaporation coefficient,

U_{av} is average velocity of water mobility.

Note: Disodium salt of sulfo-carbonic acid is also corrosion inhibitor of color and black metals in the waters of different mineralization.

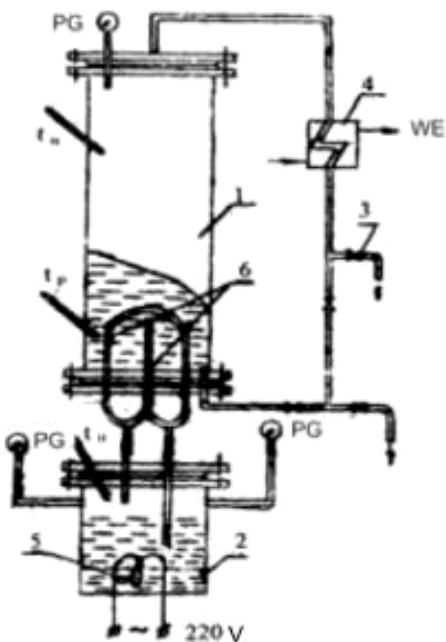


Fig. 1. is evaporator. 4. is heat exchanger.
2. is steam generator. 5. is thermoelectric heater.
3. is distillate drop. 6. is heat-exchanger spiral.

- [1] A.A. Abdulla-zade, M.A. Mursalova, A.F. Aliyev i dr. Ingibitor nakipeobrazovaniya, Avt. Svid. SSSR №565483, 1974, (v otkritoy pechati ne opublikovano). (in Russian)
- [2] M.A. Ashimov, M.A. Mursalova, A.F. Aliyev i dr. Ingibitor korrozii stali, latuni i alyuminievikh splavov v morskoy vode. Avt. Svid. SSSR №579802, 1974, (v otkritoy pechati ne opublikovano). (in Russian)
- [3] A.F. Aliyev, M.S. Salakhov, N.E. Musayeva. Sposob predotvrasheniya nakipeobrazovaniya. Avt. Svid. SSSR, 1982, №897718, Byul. izobr. №2. (in Russian)
- [4] A.F. Aliyev, M.S. Salakhov, N.E. Musayeva i dr. Sposob predotvrasheniya nakipeobrazovaniya. Avt. Svid. SSSR, 1982, №929571, Byul. izobr. №19. (in Russian)
- [5] A.F. Aliyev, M.S. Salakhov, N.E. Musayeva i dr. Sposob predotvrasheniya nakipeobrazovaniya. Avt. Svid. SSSR, 1982, №948898, Byul. izobr. №29. (in Russian)
- [6] A.F. Aliyev, M.S. Salakhov, N.E. Musayeva i dr. Sposob predotvrasheniya nakipeobrazovaniya. Avt. Svid. SSSR, 1982, №952769, Byul. izobr. №31. (in Russian)
- [7] A.F. Aliyev, M.S. Salakhov, V.S. Umaeva i dr. Sposob predotvrasheniya nakipeobrazovaniya. Avt. Svid. SSSR, №1111427, (v otkritoy pechati ne opublikovano). (in Russian)
- [8] M.S. Salakhov, A.F. Aliyev, V.S. Umaeva. Sposob polucheniya ingibitora nakipeobrazovaniya. Avt. Svid. SSSR, №1317892, (v otkritoy pechati ne opublikovano). (in Russian)
- [9] A.F. Aliyev, M.S. Salakhov, V.S. Umaeva i dr. Sposob predotvrasheniya nakipeobrazovaniya. Avt. Svid. SSSR, №1178694, Byul. izobr. №34. (in Russian)

A.F. Əliyev

SƏRT TERMOBUXARLANMA MÜHİTLƏRİNĐƏ SUYUN ƏRPƏMƏLƏGƏTİRMƏ VƏ KORROZİYA XÜSÜSİYYƏTİNİ TƏYİN ETMƏK ÜÇÜN QURĞU

Müxtəlif minerallaşmış suların sərt, termobuxarlanma mühitlərində metallarda ərpəmələgətirme və korroziya proseslərini tədqiq etmək üçün qurğu işlənib hazırlanmışdır. Bu qurğuda aparılmış tədqiqatlar elektroenergetikada qurguların işləmə şəraitlərinə tətbiq olunan metalların ərpəmələgətirməsinin və korroziyasının qarşısının alınması üçün bir sıra üsullar işlənib hazırlanmışdır.

А.Ф. Алиев

УСТАНОВКА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ НАКИПЕОБРАЗУЮЩИХ И КОРРОЗИОННЫХ СВОЙСТВ ВОДЫ В ЖЕСТКИХ УСЛОВИЯХ ТЕРМОИСПАРЕНИЯ

Разработана установка для исследования процессов накипеобразования и коррозии металлов в жестких условиях термоиспарения вод различной минерализации. Исследования на этой установке позволило разработать ряд способов предотвращения накипеобразования и коррозии металлов применительно к условиям работы установок электроэнергетики.

Received: 23.12.07

THE INFLUENCE OF Sm IMPURITIES ON ATOMIC SPACINGS IN AMORPHOUS NANOTHICKNESS FILMS OF $\text{Yb}_3\text{As}_4\text{Se}_9$ COMPOUNDS

E.Sh. HAJIYEV, A.I. MADADZADE, D.I. ISMAYILOV

Institute of Physics of NAS of Azerbaijan, Baku, AZ-1143, H. Javid av., 33

The curve of electron scattering intensity in the dependence on scattering angle up to $S_{max}=210 \text{ nm}^{-1}$ for thin amorphous films $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$ ($x=0.2$ at.%) is obtained. The curve of atom radial distribution is constructed. The radiiuses of coordination spheres and partial coordination numbers in $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$ are defined. It is shown, that Sm atom impurities influence on atomic spacings in $\text{Yb}_3\text{As}_4\text{Se}_9$.

The structure of short range order in thin amorphous films $\text{Yb}_3\text{As}_4\text{Se}_9$ has been earlier studied by us and atomic spacings and atom coordination number in the amorphous film of above mentioned compounds have been defined [1]. The given work is dedicated to study of Sm impurity influence on atomic spacings in amorphous films $\text{Yb}_3\text{As}_4\text{Se}_9$.

The amorphous films of thickness ~ 35 nm are obtained at evaporation of monocrystalline $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$ ($x=0.2$ at.%) and further precipitation with velocity ~ 10 nm/s on NaCl, KCl substrates and amorphous celluloid, being at room temperature. The dosing content of Sm impurity in $\text{Yb}_3\text{As}_4\text{Se}_9$ is 0.2 at%. The pressure of residual gases in coating chamber is $\sim 10^{-4}$ Pa. Further crystallization of obtained amorphous films shows the composition identity of amorphous and crystalline films. The thin films are investigated with the help of diffraction method of high-speed electrons on vertical electron diffractometer by EMR-102 brand at accelerating voltage 75 kV.

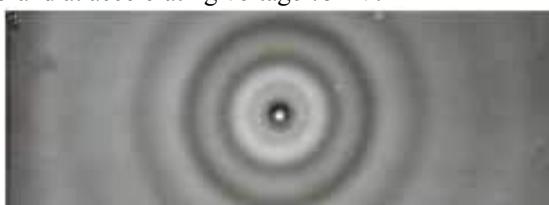


Fig.1. The electron diffraction pattern from amorphous films $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$.

The electron diffraction patterns from amorphous films are obtained by the method of alternating exposure that allows taking into consideration the far-angular electron scattering, consisting the valuable information about atomic spacings and coordination numbers. This allows increasing the reliability of obtained atomic spacings and coordination numbers in studied amorphous films. The electron diffraction patterns from amorphous films $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$ are obtained with the help of rotating sector for Ge with further

correction on given substance [2] (fig.1). The intensity curve, the maximum “ s ” value for which is equal $S_{max}=210 \text{ nm}^{-1}$ has been constructed after microphotometry. The 8 maximums at S : $S_1=22.5$; $S_2=37.0$; $S_3=57.0$; $S_4=85.0$; $S_5=109.5$; $S_6=136.0$; $S_7=163.0$; $S_8=192.0 \text{ nm}$ are observed on the curve of high-speed electron scattering intensity (fig.2).

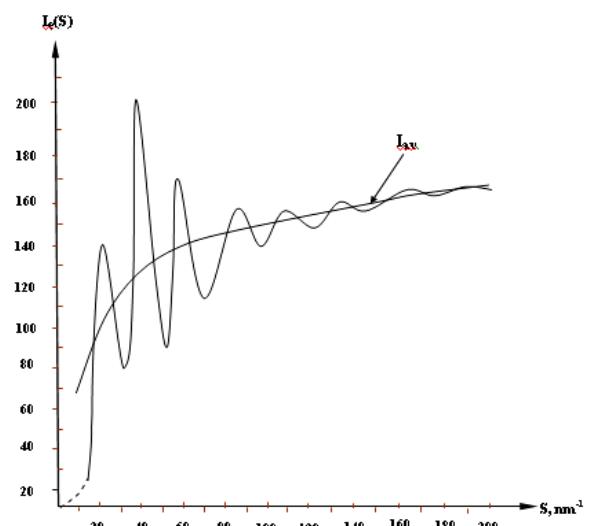


Fig.2. The curve of electron scattering intensity and curve of average intensity for amorphous films $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$.

The statistic method basing on the use of atomic density distribution function is the most effective method of structure description of amorphous and liquid states. The formula, given in [3] is in the base of above mentioned method, defining the curve of atom radial distribution (CARD) of amorphous substances, consisting of atoms of different sorts.

$$4\pi r^2 \sum_i \sum_j c_i k_i k_j \rho_{ij}(r) = 4\pi r^2 \rho_o \left(\sum_i c_i k_i \right)^2 + \frac{2r}{\pi} \alpha \int_0^s s [a(s) - 1] \sin sr ds . \quad (1)$$

Here $\rho_{ij}(r)$ is partial function of radial distribution of atomic density of atoms of j -th sort round atoms of i -th sort, α is normalizing factor, $a(s)$ is structural factor, $S = 4\pi \sin \theta / \lambda$, where θ is scattering angle. The coefficients “ c ” in formula (1) take into consideration the relative content of element atoms, including in chemical formula of investigated compound. The relative atom scattering powers of each chemical element “ k ” are defined by formula:

$$k_i = \frac{k(s)}{\sqrt{\sum_{i=1}^3 c_i f_i^2(s)}} , \quad (2)$$

where $f_i(s)$ is atomic scattering factor of i -th element. The average atomic density ρ_o of investigated amorphous films is calculated by us by the formula:

$$\rho_o = \frac{\rho N_A}{\sum_I c_i A_i}, \quad (3)$$

where ρ is density of crystalline substance in g/cm^3 , A_i are atomic weights of elements, including in chemical formula, N_A is Avogadro's number, which is equal to $6 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$. The normalization coefficient (α) is defined by extrapolation of near-angular region of structural factor, which is equal to 0,097. The average atomic density and effective scattering powers of ytterbium (Yb), arsenic and selenium are calculated on technique [4] and are equal to: $\rho_o=0,0429 \text{ cm}^{-3}$; $K_{Yb}^{av.}=1,530$; $K_{As}^{av.}=0,829$; $K_{Se}^{av.}=0,824$ correspondingly. The curve of atom radial distribution for amorphous $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$ is calculated after α definition and construction of interference function on special program. The two strong and several few maximums are observed on CARD (fig.3).

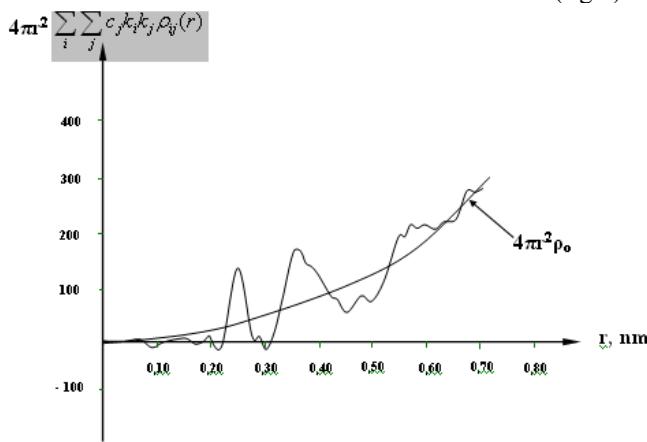


Fig. 3. The curve of atom radial distribution for $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$.

The strong isolation of first maximum evidences about bond covalence between atoms, the distances between which it reflects. As it is seen on CARD, the distance 0,24nm corresponds to first maximum. The radius of first coordination sphere reflects the distance between atoms of arsenic and selenium, connected between each other by covalent bond:

$$r_{As}^{cov.} + r_{Se}^{cov.} = 0,121 + 0,117 = 0,238 \text{ nm}$$

The second maximum on CARD, which corresponds to distance $r_2=0,365 \text{ nm}$ is radius of second coordination sphere and is caused by distance As-Yb²⁺, caused by the fact that

sum of first coordination sphere radius and ion bond radius is equal to:

$$r_I + r_{Yb}^{2+} = 0,24 + 0,107 = 0,347 \text{ nm}$$

The radii of coordination spheres in $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$ are less in comparison with ones in $\text{Yb}_3\text{As}_4\text{Se}_9$. The differences in atomic spacings in $\text{Yb}_3\text{As}_4\text{Se}_9$ compounds and ones, doped by Sm atoms are probably explained by influence of Sm impurity atoms. The decrease of atomic spacings is observed for others compounds of Yb – As – Se system, doped by Sm atoms [5]. As the atomic spacings are the one of the main parameters of structure of amorphous substances, then it is possible to suggest that coordination numbers of amorphous compounds $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$ also change. The partial coordination numbers for $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$ are defined in terms of formula (4), applied as for amorphous films of $\text{Yb}_3\text{As}_4\text{Se}_9$ compounds [1].

$$\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 c_i k_i k_j n_{ij} = Q_1, \quad (4)$$

where

Q_1 – square under first maximum, calculated on Simpson method

n_{ij} – atom number of j sort round one atom i

c_i – relative content of element, including in chemical formula of investigated compound

k_i – relative average scattering power of i sort atom.

The averaging “ k_i ” is carried out on the formula:

$$\langle k_i \rangle = \frac{1}{S_m} \int_0^{S_m} k_i(s) ds, \quad (5)$$

S_m is maximum from considered values $s=4\pi \sin \theta / \lambda$ (θ is scattering angle).

On the assumption of relative element concentrations and averaged scattering powers of elements, including in chemical formula, the coordination numbers in amorphous $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$ are defined.

It is established that 3 selenium atoms are in amorphous $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$ near ytterbium ions, also as in amorphous $\text{Yb}_3\text{As}_4\text{Se}_9$.

Thus, the difference in atomic spacings, i.e. the decrease of radii of coordination spheres in the comparison with atomic spacings in $\text{Yb}_3\text{As}_4\text{Se}_9$ [1] is observed at investigation of structure of short-range order in amorphous films $\text{Yb}_{3(1-x)}\text{Sm}_x\text{As}_4\text{Se}_9$, that is explained by influence of Sm impurities on atomic spacings.

-
- [1] E.G. Efendiyyev, E Sh. Gadjiev, R.Ya Yurechko, M.S. Frujinskiy. Preprint IFAN Azerb. SSR, Baku, №428, 1991. 19 s. (in Russian)
 - [2] I.D. Nabitovich, Ya.I. Steytsiv, A.M. Andreyko. PTE, 1976, №3, c.211 – 213. (in Russian)
 - [3] A.F. Skrishevskiy. Strukturniy analiz jidkostey i amorfnykh tel. M.: Vissnaya shkola, 1980. s. 328. (in Russian)
 - [4] R.Ya. Yurechko. Elektronograficheskoe issledovanie blyjnogo poryadka amorfnykh veshestv s ispolzovaniem novoy metodiki normirovaniya. Dissertatsiya na

soiskanie uchonoy stepeni kandidata fiz.-mat. Nauk. Lvov, 1982, 177s. (in Russian)

[5] E Sh. Gadjiev, A.I. Madadzade. Fizika, 2007, t. XIII, №4, s.33-34.

E.Ş. Hacıyev, A.İ. Mədədzadə, D.İ. İsmayılov

Sm AŞQARLARININ Yb₃As₄Se₉ BİRLƏŞMƏLƏRİNİN AMORF NANOQALINLIQLI TƏBƏQƏLƏRDƏ ATOMLARARASI MƏSAFƏYƏ TƏSİRİ

Elektronografiya üsulu ilə Yb_{3(1-x)}Sm_x As₄Se₉ ($x=0,2$ at.%) amorf təbəqələrindən elektronların səpilmələrinin intensivlik əyriləri alınmışdır ($S_{max}=210 \text{ nm}^{-1}$). Nanoqalınlıqlı amorf təbəqələrində atomların radial paylanması əyrisi qurulmuş və onların yaxın nizam quruluşu parametrləri tayin edilmişdir. Göstərilmişdir ki, Sm atomunun aşqarları Yb₃As₄Se₉ birləşməsinin amorf nazik təbəqələrindəki atomlararası məsaflənin dəyişməsinə səbəb olur.

Э. Ш. Гаджиев, А.И. Мададзаде, Д.И. Исмаилов

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ Sm НА МЕЖАТОМНЫЕ РАССТОЯНИЯ В АМОРФНЫХ НАНОТОЛЩИННЫХ ПЛЕНКАХ СОЕДИНЕНИЙ Yb₃As₄Se₉

Получена кривая интенсивности рассеяния электронов в зависимости от угла рассеяния до $S_{max}=210 \text{ nm}^{-1}$ для тонких аморфных пленок Yb_{3(1-x)}Sm_xAs₄Se₉ ($x=0,2$ ат.%). Построена кривая радиального распределения атомов. Определены радиусы координационных сфер и парциальные координационные числа атомов в Yb_{3(1-x)}Sm_xAs₄Se₉. Показано, что примеси атомов Sm влияют на межатомные расстояния в Yb₃As₄Se₉.

Received: 16.01.08

FORMATION OF NANO-LAYERED FRAGMENTS ON SURFACE (0001) HETEROGENEITIES IN BISMUTH TELLURIDE

F.K. ALESKEROV, S.Sh. KAGRAMANOV, K.Sh. KAGRAMANOV

Scientific-Production Association "Selen" NASA

Baku-1143, F. Agayev, 14

In the work it is shown that the defects of crystalline structure take part into formation of fractal aggregates on surface (0001) in unalloyed Bi_2Te_3 and $\text{Bi}_2\text{Te}_3<\text{Cu},\text{Ni}>$ except impurities. The analysis has revealed the interaction between dislocations and aggregation of impurity complexes, leading to fixing of dislocation fractal rings.

Introduction

The real fractal formations by the type of dislocation structures, fractal aggregations of microcracks, nano-objects in crystal interlayers of $\text{A}_2^{\text{V}}\text{B}_3^{\text{VI}}$ type and dichalcogenides of transition metals have become the objects of special attention of investigators of solid-state physics. The peculiarity of these structural systems consists in the fact that their fractal structure reveals only at joint resolution of several levels. The effects, leading to introduction of new structural levels reveal at plastic deformation. Its carriers form the fractal clusters (FC), the compactness of which further leads to design of super-defects, being the structural elements on the new level. The description of the given systems is achieved in the limits of both mono-fractal and multi-fractal representations [1-4]. The fractal conceptions in the case of irregular functions are considered in them.

The consideration of processes, leading to formation of dislocation aggregations, forming the cell walls with fractal structure presents interest. Thus, the confirming main evolution stages of dislocation ensemble of high density are presented in the work [1]; firstly their distribution is homogeneous one, further, the aggregations in the form of balls and loose cell walls appear and finally the clearly defined cellular structure forms. The reasons, leading to local formation of dislocation clusters are considered in [6]. The given investigations can be propagated on the other solid-body objects.

The perceptions about dislocation phenomenon, described here, can play the definite role in FC formation processes in layered crystals, which are Bi_2Te_3 . Not only dislocations, situated perpendicular to "C" plane, but lying on it (forming etch grooves) are revealed on the surface (0001) cleavage in Bi_2Te_3 [7].

As a whole it is very difficult to interpret the experimental results, connected with alloyed systems on the base of bismuth chalcogenide. The pictures of hexagonal and parallel dislocation lines in bismuth telluride are given in monograph [8]. The cleavage plane (0001) in bismuth telluride coincides with crystal basal plane and is the main glide plane simultaneously. This allows us to directly observe the dislocation picture of this plane in the field of electron microscope.

Let's give investigation results of crystalline structure defects and dislocation structure of surface (0001) Bi_2Te_3 , taken from [9]. The dislocations, which are heterogeneous ones in distribution, are the dominant type. It is shown, that interaction of two dislocations leads to formation of new dislocation, gliding in plane (0001) and it is responsible for

dislocation branching and formation of dislocation grids in basal plane [9]. The presence of both hexagonal grids of dislocations and parallel rows of dislocations (in nano-scales ≈ 500 nm) has been established. The contrast analysis [8] shows the presence of stacking faults, situated parallel to basal plane and very small dislocation loops. The dislocation picture in the volume of Bi_2Te_3 crystal is more complex; than it can be concluded from study of only etch pits. These defects can be the places of "fixing" and origin of impurity fractal clusters.

The dislocations, going on three crystallographic directions, forming grids and rings, appear simultaneously in Bi_2Te_3 (fig.1) [10].



Fig.1. The dislocations and vacancy rings in Bi_2Te_3 [10].

Authors of work [11] suppose that chemical heterogeneities of composition $(\text{Bi}, \text{Sb})_2(\text{SeTe})_3$ with high density of dislocations in these samples, heterogeneously observable lead to the formation of domain microstructure, caused by the fields of elastic voltages with average sizes of domain 8-10 nm in Bi_2Te_3 of both *p*- and *n*-type. The observable deformation field is caused by the separate dislocations, which are situated in dipole form, distant from each other on 5 nm. In the work [12] it is shown on interaction between dislocation and comparably large aggregations of impurity complexes, this leads to fixing of defects and dislocations by impurity atoms. Thus, the favorable conditions for formation of both impurity nano-fragments and fractal formations on the base of dislocation grids, vacansion rings and point defects are formed in the growth process of Bi_2Te_3 crystal towards with impurities, including in the layers.

The above mentioned experimental facts lead us to the next work aim, connected with formation of nano-fractal objects with participation of aggregations of dislocations and

vacancies on the surface (0001) between $T_e^{(1)} - T_e^{(1)}$ in Bi_2Te_3 , alloyed by easily-diffused impurities (Cu and Ni).

Experimental results and investigation technique

The Bi_2Te_3 compound is obtained by thermal synthesis at $900\text{-}950^0\text{K}$, which usually is carried out in quartz ampoules, when Bi, Te and impurities (*Ni* or *Cu*) in necessary relation are loaded. After alloy synthesis it is loaded into graphitized ampoules (by sizes 8-10 nm), alloy it over again and further the monocrystalline ingots at temperature gradient $\Delta T=100^0$ and crystallization velocity lower than 1 cm/h are obtained by Bridgman method or vertical directed crystallization. The nano-fragments are studied in such crystals. This process can hardly be considered as intercalation of layered matrix Bi_2Te_3 . However, $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Me}$ can be considered as intercalated ones, i.e. the layers of matrix-master and -guest (*Ni*, *Cu* and *Ag*) can be emphasized in them. Here the increase of interlayer distance at penetration of metal atoms in interlayer spaces is character because of the weak chemical bond between $T_e^{(1)} - T_e^{(1)}$.

The intercalation of Cu and Ni atoms and diffusion at different temperatures from 400^0 up to 500^0K is carried out as separate experiment.

Electron-microscope images are obtained on atom-force microscope (AFM) of NC-AFM trend. X-ray diffraction investigations are carried out on the installation of Philips Panalytical trend (X-ray diffractometer). The preparation of atomically clean surface is carried out by the way of crystal cleavage along basal plane on the air before experiment carrying out.

The result discussion.

The guest atoms (*Vu*, *Ni*, *Ag*...) in bismuth telluride localize in Van der Waals spaces, formed by atoms of neighbor layers-quintets, perpendicular to symmetry axis of third order (C axis in hexagonal lattice). There are three such quintets in hexagonal cell, the number of atoms of which in elementary cell is equal to 15. Each quintet consists of five simple layers (fig.2) [8].

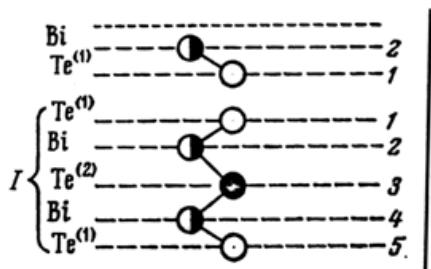


Fig.2. The atom distribution in lattice quintet of bismuth telluride [8].

The atoms of separate layer are similar and form the plane hexagonal lattice. The atoms of each next layer are under centers of triangles, formed by atoms of previous layer. Atoms $T_e^{(1)}$ have three atoms from each adjacent layer in the capacity of close neighbors (6 Bi atoms). $T_e^{(1)}$ is connected from the one side with three Bi atoms, and from another one

it is connected with three of $T_e^{(1)}$ atoms, i.e. there are two essentially different places for Te atoms [8] in the lattice.

The scheme of atoms $T_e^{(II)} - \text{Bi} - T_e^{(1)} - T_e^{(1)} - \text{Bi} - T_e^{(II)}$ position in crystal lattice Bi_2Te_3 , in which the nano-layers are in the form of fractal formations of impurities and other defect structures between atoms, $T_e^{(1)} - T_e^{(1)}$, is given on the fig.3.

Moreover, we must tell the difference the bonds between quintets and bonds inside quintets. This creates the real situations for position of impurity nano-layers in this almost "free" space between $T_e^{(1)} - T_e^{(1)}$ round dislocations and on vacancies of essential atom quantities. We already have given the experimental facts about existence of dislocations and different defect types on the surface (0001) from the works [7-10]. The vacancies from under Te on the complexes by the type "vacancy-impurity atom" can be the more probable places of aggregation and formation of nano-fragments (including FC) on the base of Cu, Ag, Ni. The places round dislocation pits [1-6] and other extensive defects [7-8], boundaries of blocks and grains, micro-cracks [5], concentration heterogeneities and micro-segregation phenomenon [8] can be the most difficult places for nano-fractals.

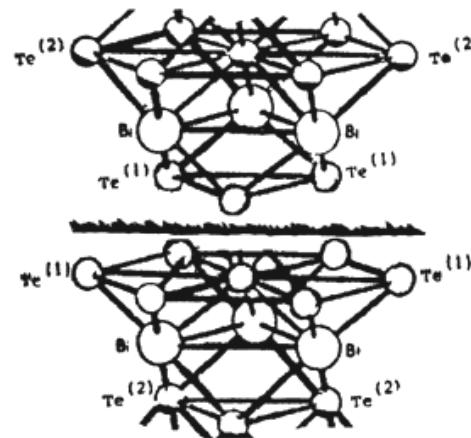


Fig.3. The scheme of crystalline structure Bi_2Te_3 with nano-fragments situated between $T_e^{(1)} - T_e^{(1)}$.

Firstly let's give the experimental data on the example of $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Cu}$ system. From the fig.4-5 it is seen which nanocrystal formations appear on the surface (0001) at intercalation by cuprum and at synthesis of bismuth telluride towards with Cu with further crystallization. The cuprum at lowered temperatures: 400 and 500^0K penetrates into layers as in nano-container, not interacting with superstoichiometric of Bi_2Te_3 components: tellurium and bismuth. The X-ray diffraction peaks from cuprum nano-particles evidence about this (fig.4). X-ray diffractograms (fig.5) of non-intercalated samples $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Cu}$, (obtained in the crystal growing process) show the peaks mainly on CuTe and nano-particles with excess Cu and $\text{Cu}_{0,647}\text{Te}_{0,353}$. Here the space $T_e^{(1)} - T_e^{(1)}$ Bi_2Te_3 plays the role of nano-reactor, in which CuTe and $\text{Cu}_{0,647}\text{Te}_{0,353}$ form. The morphology of surface (0001)

$\text{Bi}_2\text{Te}_3<\text{Cu}>$ at intercalation by cuprum is presented on the fig.6; the fractal structure here consist mainly of the cuprum, Bi_4Te_3 and nano-crystals (NC) of Bi_2Te_3 itself. AFM-images

of surface in three-dimensional scale (3D) for $\text{Bi}_2\text{Te}_3<\text{Cu}>$ with obtained nano-particles in the growth process are given on the fig.7.

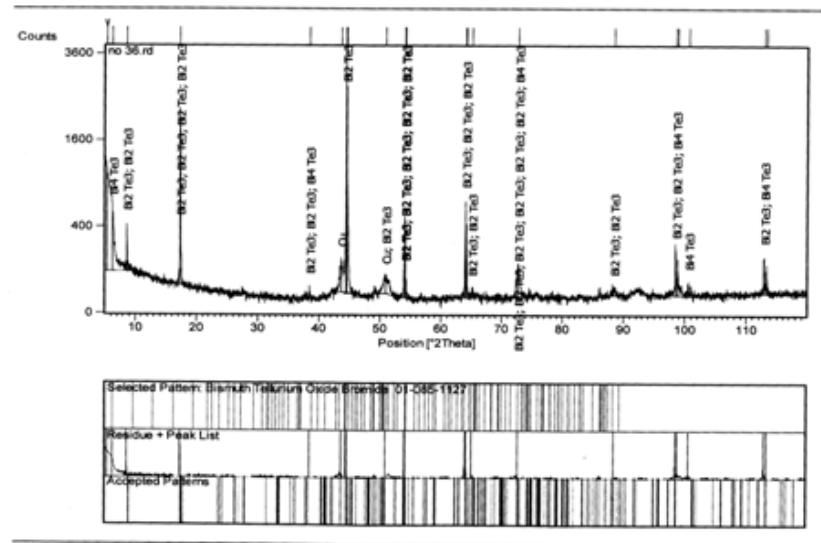


Fig.4. X-ray diffraction picture of bismuth telluride surface (0001) intercalated by cuprum.

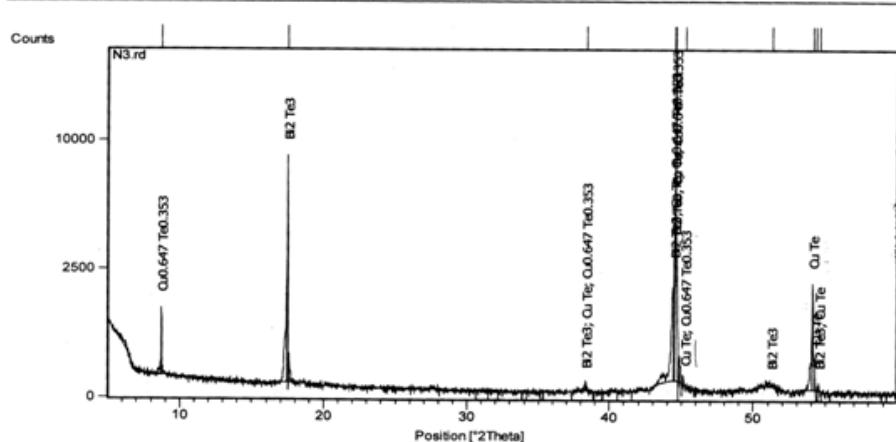


Fig.5. X-ray diffraction photo of Bi₂Te₃ monocrystal surface (0001) alloyed by cuprum.

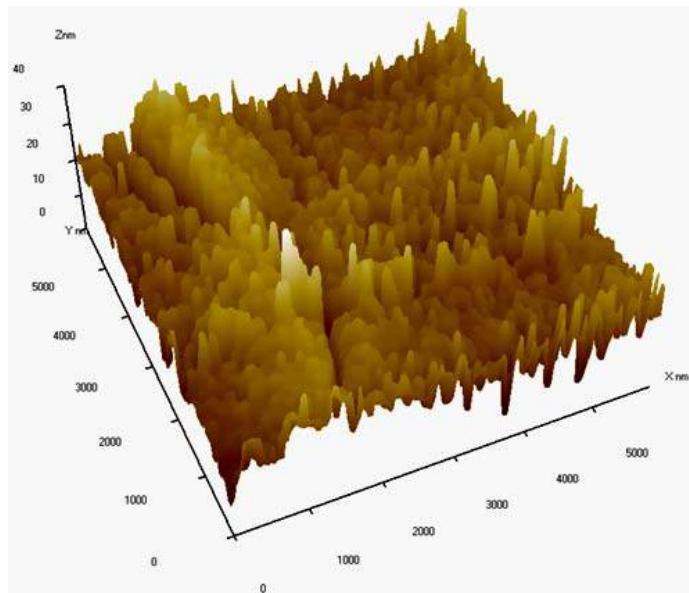


Fig.6. AFM-image of Bi₂Te₃ surface (0001) intercalated by cuprum.

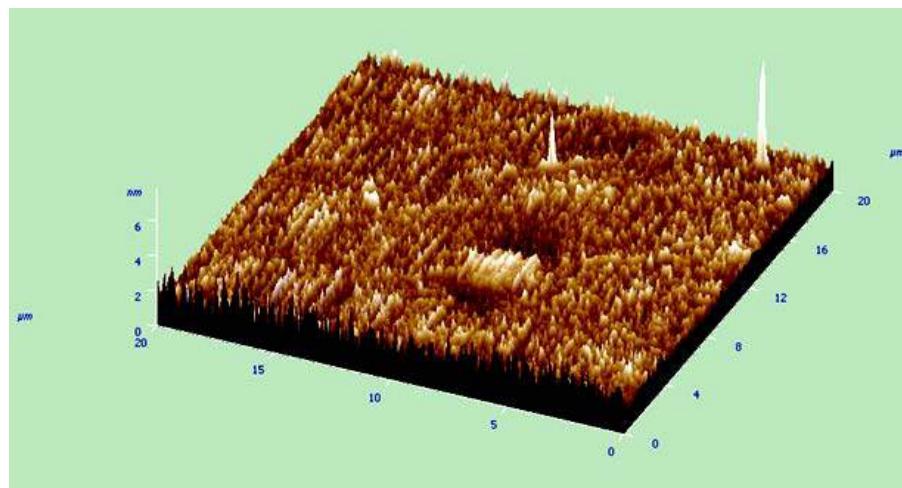


Fig.7. AFM-image of Bi₂Te₃<Cu> surface (0001) in 3D scale.

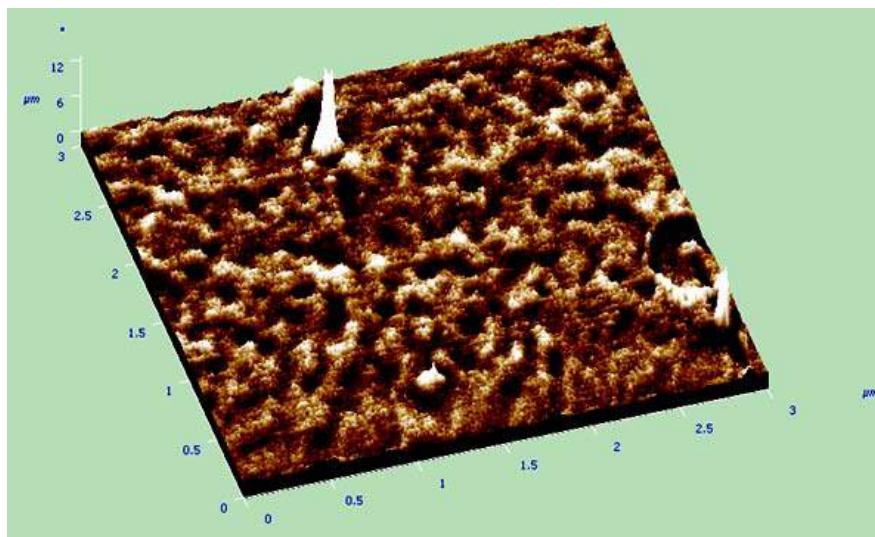


Fig.8. AFM-image of surface of alloyed Bi₂Te₃ in 3D scale.

The comparison of revealed fractal formations shows both the similarity and difference in their sizes and probably in formation mechanisms of NC.

The formation mechanism of fractal aggregates probably is connected with process of impurity filling by the places round dislocation pits, grids and vacancies from under Te on the surface (0001) Bi₂Te₃. The beginning of formation of fractal cells takes place in the process of impurity diffusion along basal surface (0001) with formation of their base on telluride quintets, including the vacancy places, being on the quintets.

The gradually growing FC, the layer filling of which between quintets is led to the formation of fractal surfaces on basal plane (0001) form in the result of growth of nano-fragment sizes, that is visually reflected on topography, which is given on the fig.6-7.

Almost all filling stages of Van der Waals bond are connected with process of rapid introduction of easily-diffused impurities (Ag, Cu, Ni) in Bi₂Te₃ in the direction of basal plane in the result of diffusion direction. Simultaneously all vacancies under from Te are filled by impurities; their aggregation and formation of nano-fragments, which we reveal by AFM method, take place. On the final stage the nano-islands are grown like "forest" perpendicular to plane (0001). The coagulation process

achieves its peak, at which the hills-fractals, contacting with each other, join into unique fractal surface. This mechanism is more probable at the crystal growth with impurities (Ni and Cu) and at the next precipitation of them into interlayers.

The obtained fractals have the nano-sizes on all three directions on geometric sign: their height doesn't exceed 20 nm, width and length vary from 100 up to 300 nm; this is proved by data of figures 6-7.

From electron-microscopic images (fig.8) it is distinctly the inhomogeneous distribution both rare fractal perpendicular hills (light nano-formations in the middle) and hardly notable defect "fields" (right low part of figure 8). Such character defects exist in both stoichiometric (fig.9) and Bi₂Te₃<Ni> crystals, alloyed by nickel (fig.8). It is difficult to avoid the appearance of unnecessary blocks, growing mainly from the one crystal side, and also defect formation during the growing process. The investigations of AFM-images of stoichiometric (unalloyed) crystal show different nano-phases (see fig.9). The visible nano-formations on whole surface (0001) Bi₂Te₃ are very similar with dislocations and vacancy rings in bismuth telluride, presented on the fig.1. Moreover, the differences are observed. Thus, the island-hill in the surrounding of fractal (light) ring is notable in right low part on the fig.9 by big scale. Such islands in the surroundings of nano-rings are seen in the low part of middle of fig.9. These

AFM-images are evidence of the interaction role of different defects (including impurity ones) in the formation of nano-fractal formations on the surface (0001) Bi_2Te_3 .

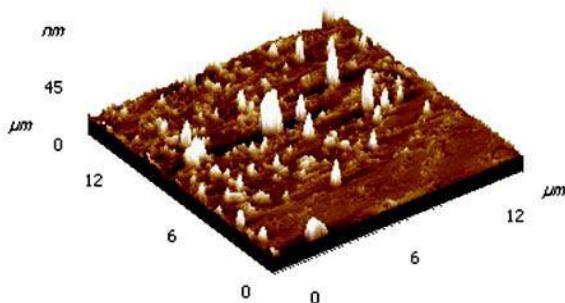


Fig.9. AFM-image of surface of unalloyed Bi_2Te_3 in 3D scale.

Let's pay attention on one more factor, connected with spontaneous transition-diffusion of main part of Cu atoms from penetration centers in quintets in Van der Waals spaces in the beginning period after crystallization (these are samples of second type, intercalated samples are related to the first ones). This spontaneous atom diffusion from the layers into interlayers are often named as self-intercalation.

The studied morphology of interlayer surface of bismuth telluride in alloyed (Cu) and further in self-intercalated space $T_e^{(1)} - T_e^{(1)}$ shows that:

- the cuprum layers are set in the form of nano-fractals on basal surface;
- the cuprum precipitation from quintets in interlayer $T_e^{(1)} - T_e^{(1)}$ takes place in grown up $n\text{-}\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{<Cu>}$ crystals during first ten days at room temperature and it leads to the change of main structure parameter (d) on $\Delta d = 3 \cdot 10^{-3} \text{ } \text{\AA}$.

The given effect of cuprum self-intercalation, leading to self-formation of nano-objects, is also accompanied by strong change of coefficient of conductivity, efficiency, decrease of thermal conduction and concentration of current carriers.

Conclusion

The analysis of surface (0001) Bi_2Te_3 morphology shows that nano-particles (in the form of nano-fractal formations) can form between layers $T_e^{(1)} - T_e^{(1)}$ with participation of impurities, dislocations and stacking faults. Two methods of atom introduction with small ion radii (Ni and Cu) in interlayer spaces are revealed: in the synthesis process with further crystal growing up, intercalation of impurity (Cu) on basal plane from telluride quintets, in the result of which the nano-fractal formations form.

It is very difficult to see the separate impurity and defect fractal structures in the connection with their interaction on AFM-images.

-
- [1] A.I. Olemskiy, A.Ya. Flat, Ispolzovanie kontseptsii fraktala v fizike kondensirovannoy sredi. Uspekhi fizicheskikh nauk (UFN), 1993, t.163, №12, s.1-49. (in Russian)
- [2] A.N. Pavlov, V.S. Anishenko, Multifraktalnyi analiz slojnikh signalov, J. UFN, t.177, №8, s.859-876. (in Russian)
- [3] T.C. Halsey et.al. Phys. Rev. A 33, 1141, 1986.
- [4] E. Feder. Fraktali. M.: Mir, 1991. (in Russian)
- [5] V.S. Ivanova, A.S. Balankin, I.J. Bunin, A.A. Oksogoev. Monografiya «Sinergetika i fraktali v materialovedenii», I. Moskva «Nauka», 1994, s.383. (in Russian)
- [6] G.A. Maligin. Fizika metallov i metallovedeniya. 1991, t.71, №6, s.35-43. (in Russian)
- [7] A. Sagar, J.W. Faus. J.Fpp. Phys. 38, 3479, 1967.
- [8] B.M. Goltsman, V.A. Kudinov, V.A. Kudinov. I.A. Smirnov. Poluprovodnikovie termoelektricheskie materiali na osnove Bi_2Te_3 , «Nauka», Moskva 1972, s.319. (in Russian)
- [9] I.V. Gasenkova, T.E. Svechnikova. Issledovanie strukturi monokristallov tverdikh rastvorov na osnove tellurida vismuta. Dokladi VIII mejgosudarstvennogo seminara (2002g.) – Termoelektriki i ikh primeneniya, s. 145-150. (in Russian)
- [10] T.A. Smorodina, N.N. Sheftal, A.P. Tsuranov. Vkhodenie primesnikh tsentrov v kristallichесkiy sloy poluprovodnika, I. Nauka, 1986, s.171. (in Russian)
- [11] D. Maer, D. Eyidi, O. Eibl. Proc. Sixth European Workshop on Thermoelectrics. Freiburg im Breisgau. 2001. p.32.
- [12] B.I. Smirnov. Dislokatsionnaya struktura i uprochnenie kristallov, Izd. «Nauka», 1981, s.27. (in Russian)

F.K. Ələsgərov, S.Ş. Gəhrəmanov, K.Ş. Gəhrəmanov

BİSMUT TELLURUN QEYRİ-BİRCİNSLİ SƏTHİNDƏ (0001) NANOLAYLI FRAQMENTLƏRİN FORMALAŞMASI

İşdə göstərilmişdir ki, və (0001) səthində legirə olunmamış Bi_2Te_3 və $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{<Cu,Ni>}$ fraktal aqreqatların formalaşmasında aşqarlardan başqa kristallik defektlərin də rolü vardır. Analiz dislokasiyaların və aşqarların yiğma komplekslərinin qarşılıqlı təsirinə aşkar etmişdir ki, bu təsir nəticəsində də dislokasiyon fraktal halqları möhkəmlənir.

Ф.К. Алескеров, С.Ш. Каҳраманов, К.Ш. Каҳраманов

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОСЛОЕВЫХ ФРАГМЕНТОВ НА НЕОДНОРОДНОСТЯХ ПОВЕРХНОСТИ (0001) В ТЕЛЛУРИДЕ ВИСМУТА

В работе показано, что в формировании фрактальных агрегатов на поверхности (0001) в нелегированных Bi_2Te_3 и $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{<Cu,Ni>}$ участвуют, кроме примесей, и дефекты кристаллической структуры. Анализ выявил взаимодействие между дислокациями и скоплениями примесных комплексов, приводящее к закреплению дислокационных фрактальных колец.

Received: 19.12.07

Cu₃Fe_{0,5}Se₂ MONOKRİSTALLARININ RENTGENOQRAFIK TƏDQİQİ VƏ MAQNİT QAVRAYICILIĞI

G.M. AĞAMİRZƏYEVA, Q.M. CƏFƏROV, S.K. ORUCOV, Q.H. HÜSEYNOV

Azərbaycan MEA Fizika İnstitutu

Az-1143, Bakı, H. Cavid, 33

CuFeSe₂ polikristal nümunələrinin qaz fazadan və ərintidən kristallaşma prosesində formallaşması monokristalların rentgenoqrafik tədqiqatı zamanı sistemdə rombik qəfəsdə kristallaşan yeni fazanın əmələgəlməsi müşahidə edilmişdir. Alınan monokristalların kimyəvi analizinə görə tərkib Cu₃Fe_{0,5}Se₂-yə uyğundur. Onun qəfəs sabitləri; $a=7,980\text{ Å}$, $b=7,8\text{ Å}$, $c=13,3331\text{ Å}$, $V_{qsf}=831,08\text{ Å}^3$, $\rho_{rent}=6,17\text{ qr/sm}^3$, fəza qrupu $Pnma$, $Z=8$. $35\text{ K} < T \leq 400\text{ K}$ intervalında və $H=1$; 2 Tl maqnit sahələrində maqnit qavrayıcılığı tədqiq edilmiş və $T_N=350\text{ K}$ -də maqnit faza keçidinin baş verməsi müşahidə edilmişdir ki, bu da Cu₃Fe_{0,5}Se₂-nin kvazibirölkülü antiferromaqnit sistemlərə xas olan xassəyə malik olmasına göstərir.

Giriş

Məlumdur ki, müasir elektron texnikası üçün prespektiv materiallar tərkibində 3d, 4f elementləri olan, materiallara tələb böyükdür. Onu da qeyd etmək lazımdır ki, bu tip birləşmələrin böyük əksəriyyəti yarımkəcərici xassəyə malikdir və 3d, 4f səviyyələrinin dolma qaydasından asılı olaraq maqnit və seqnetoelektrik xassələrə də malik olurlar. Elə bu səbəbdən də son vaxtlar xalkopiritin Se, Te-lu kimyəvi və quruluş analoglarına maqnit yarımkəcərici birləşmələr olduqlarına görə maraq artdılmışdır. Qeyd etmək lazımdır ki, təkcə 1992-c ildə CuFeSe₂-nin alınma texnologiyasına, kristal quruluşuna və maqnit xassələrinə bir neçə məqalə həsr edilmişdir [1,5]. Birinci işdə, CuFeS₂, Cu(Ga,In)_{1-x}Fe_xSe₂ homoloji sıradə fazaəmələgəlmə prosesinin rentgenoqrafik tədqiqatı nəticəsində müəyyən edilmiş, onun kristal quruluşuna baxılmış və maqnit qavrayıcılığı tədqiq edilmişdir. Müəlliflər görə [1] CuFeSe₂ zəif maqnit xassəsinə malikdir və onun kristal quruluşu xalkopiritdən fərqli olmaqla yanaşı elektrik keçirmə mexanizmi metallik xarakterə uyğundur. Onların təklif etdiyi quruluş modelinə görə Cu və Fe atomları P42c fəza qrupu çərçivəsində (qəfəs sabitləri $a=5,53\text{ Å}$, $c=11,05\text{ Å}$ -ə) uyğun olaraq (0 0 0), (0 1/2 0) vəziyyətlərdə paylanırlar və bu da quruluşda metal-metal əlaqəsi yaradır.

Digər müəlliflərin [2] CuFeSe₂-nin kristal quruluşuna həsr edilən məqalədə isə iş [1]-dən fərqli olaraq atomların kristal qəfəsdə paylanması iki variantda yerinə yetirilmişdir:

Variant. I	Cu(1)-də	2(a)	0, 0, 1/4
	Cu(2)-də	2(e)	0, 0, 0
	Fe-da	4(m)	0, 1/2, 0
Variant. II	Fe(1)-də	2(a)	0, 0, 1/4
	Fe(2)-də	2(e)	0, 0, 0
	Cu-da	4(m)	0, 1/2, 0

Qeyd etmək lazımdır ki, hər iki işin quruluş tədqiqatları eyni fəza qrupu (P42c) və qəfəs sabitləri ($a=5,53\text{ Å}$, $c=11,05\text{ Å}$) çərçivəsində aparıldıqdan nəticə etibarilə bir-birindən o qədər də fərqlənmirlər. Burada vacib bir məsələni də qeyd etməyə ehtiyac duyulur ki, bu da hər iki işdə tədqiq edilən nümunələrin kimyəvi tərkib analizinin aparılmamasıdır. Bu məsələnin vacibliyini sübut edən iş [3,4]-də alınan sintez nümunələrinin rentgenfaza və monokristalların kimyəvi analiz nəticələrinə nəzər salaq. Göstərilən işdə sintez olunmuş CuFeSe₂ polikristal nümunələrindən qaz fazadan alınan monokristalların rentgenoqrafik və kimyəvi analizlərinin nəticələri araşdırılmış və iş [5]-də onlardan biri haqqında qısa xülasə çap etdirilmişdir. Qeyd olunan eksperimental nəticələrin yenidən araşdırılması göstərmişdir ki, CuFeSe₂-nin kristallaş-

ma prosesi bir sıra faktlara bağlıdır. Belə ki, qaz fazadan kristallaşma prosesində daşıyıcı kimi I₂-nin iştirakı ilə aşağıda göstərilən monokristalların alınması reallaşır. Müşahidə edilən 4 müxtalif tip morfolojiyalı kristalların rentgen-faza analizi tetraedr və lövhə formalı kristalların tetroqonal, polioktaedr formalı kristalların kubik və zəncirvari tetraedrik formaların isə rombik fazalar olması müəyyən edilmişdir. Kristalloqrafik hesabatlar göstərmişdir ki, birinci kristallar I42d simmetriyalı xalkopirit, ikinci kristallar P42c simmetriyah kristallar, kubiklər Cu_{1,2}I₂, [6] sonuncu kristallar isə quruluşu müəyyən edilməmiş fazadır. Maraqlıdır ki, aparılan kimyəvi analizin nəticələri göstərmişdir ki, ikinci kristallarda anion çatışmazlığı var və bu defekt təxminən 6-8% arasındadır. Bizə belə gelir ki, xalkopirit varianti quruluşunun dəyişməsi bilavasitə bununla əlaqədardır.

Onu da qeyd etmək lazımdır ki, xalkopiritdə (CuFeS₂) təzahür edən bir sıra unikal xassələrin mövcud olması xalkopirit analoglarına da diqqəti artırmışdır, elə bu səbəbdən də yuxarıda qeyd edilən məqalələrlə yanaşı CuFeSe₂-n fiziki xassələrinə də bir sıra məqalələr həsr olunmuşdur. Qeyd edək ki, bu məqalələrdə [6-9] əsas etibarilə CuFeSe₂-nin müxtalif üsullarla sintez prosesi, monokristalların göyərdilməsi, elektrofiziki xassələri, Messbauer və neytron difraksiyaları ilə Fe atomlarının valent halları, maqnit xassələri, spin-dalğa sixlığı məsələləri və s. işıqlandırılmışdır. Qeyd edilən tədqiqat işlərinin hamisində mübahisə doğuran bir fikir aşilanır ki, Fe atomları bu sistemdə 3⁺ valent halindadır. Lakin maqnit momentinin kiçik qiymətə malik olması ($1,75\mu_B$) və müxtalif müəlliflərin eksperiment nəticələrindəki uyğunluqlar bir qədər tamamlanmamış kimi görünür. Belə ki, maqnit momentinin kiçik qiymətə malik olmasının CuFeSe₂-də yüksək kovalentliklə izah edilməsi, bu kristallarda metallik keçiriciliklə uyğunlaşır. Belə ki, [10]-cu işdə Cr, Fe üçün alınan maqnit momentinin üçvalentli Cr, Fe atomlarına uyğunsuzluğu təkcə yüksək kovalentliklə yanaşı bu tip materialların maqnit yarımkəcərici olduqları üçün 3d elektronlarının bir hissəsinin keçiricilik zonasına keçməsi ilə izah edilir ki, bizə görə bu variant 3d elementlərinin valentlikləri dəqiq qəbul ediləndir.

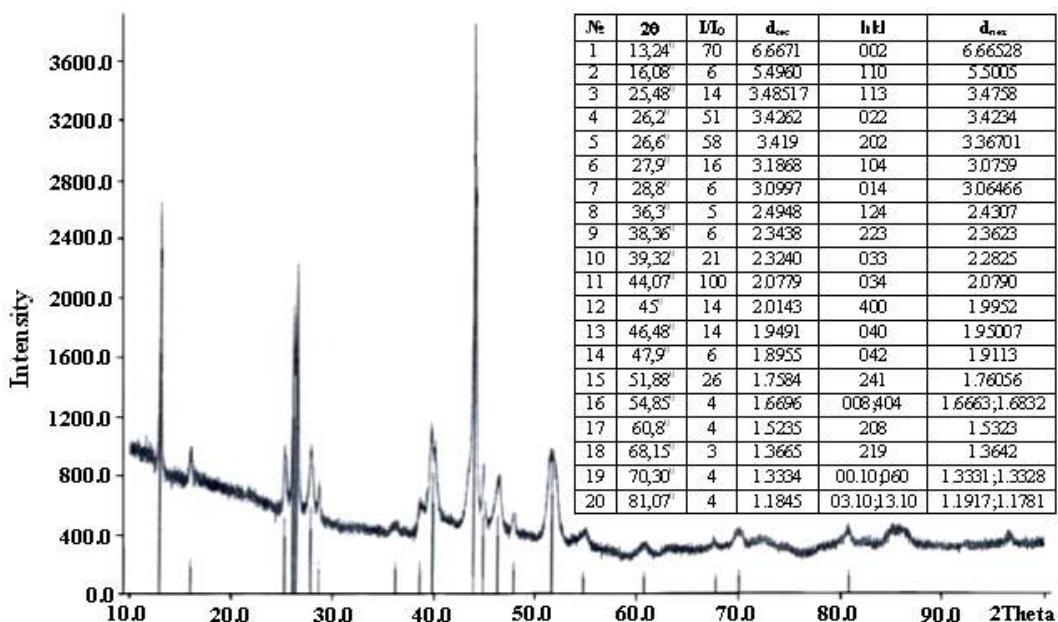
Bu məqalə Cu-Fe-Se sisteminde reallaşan Cu₃Fe_{0,5}Se₂ monokristallarının alınması, quruluş xüsusiyyətləri, maqnit qavrayıcılığı və alınan nəticələrin müzakirəsinə həsr edilmişdir.

Eksperimental hissə və nəticələrin təhlili

Giriş hissədə CuFeSe₂-nin qaz fazadan kristallaşma prosesində reallaşan fazaların rentgenoqrafik tədqiqat nəticələrinin mahiyyətindən müfəssəl məlumatlar vermişdir. Onu da qeyd etmişdir ki, sistemdə reallaşan fazalardan biri (dör-

düncüsü) yenidir və [4]-cü işdə o, psevdokub, [5]-ci işdə isə monoklin faza kimi şərh edilmişdir. Bu məsələnin dəqiqləşməyə ehtiyacını nəzərə alaraq bu fazanın ərintidən də monokristallarının alınmasını vacib bilərkən CuFeSe_2 -ni yenidən sintez etdiq (5qr). Bricmen üsulu ilə kristallaşma prosesinə başladıq. Bunun üçün seçilən üsula qoyulan tələblərə əməl etməklə təcrübə qoyuldu. Aparılan təcrübələri bir neçə dəfə təkrar etsək də, həmişə soyuma prosesinin $\sim 870\text{K}$ ətrafında ampulanın çatlaması nəticəsində prosesi başa çatdırmaq mümkün olmadı. Bu çatınliyi aradan qaldırmaq üçün 2-qat ampula sisteminə keçdiq və prosesi təkrarladıq. Proses bitdikdən sonra ampula peçdən götürüldü və məlum oldu ki, 5 qr-lıq kütlənin bir hissəsi çatlamış birinci ampuladan çıxaraq ikinci ampulanın dibinə (soyuq zona) tökülmüş, metallik parlıtıya malik monokristallar şəklində kristallaşmışdır. Alınan monokristalların və birinci ampulada kristallaşan kütlənin rentgenoqrafik tədqiqatı göstərmişdir ki, birinci ampulada qalan kristallik kütlə qaz fazadan alınan birinci üç fazanın qarışığından ibarət kütlədir. Ikinci ampulada kristallaşan kütlə isə bir fazadan ibarətdir və onlardan alınan rentgen difraksiya mənzərəsi birinci ampuladakılardan fərqlidir. Tədqiq edilən monokristalların ümumi görünüşü şək.1-də verilmişdir.

Kristallaşma prosesinə ümumi yanaşmadan məlum olmuşdur ki, qaz fazadan kristallaşma prosesi kimi ərintidən də kristallaşma zamanı təxminən 870K temperaturda parçalanma baş verir və nəticədə götürülən kütlənin bir hissəsi qaz şəklində sublimasiya olunur, ampulanın boş hissəsinə yiğilərəq yüksək təzyiq yaradır, nəticədə ampula çatlayır qaz halında olan sublimat sistemdən ayrıılır.



Şəkil 2. $\text{Cu}_2\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ monokristallarından alınmış rentgendifraksiya mənzərsi. Əlavədə hesablanmış kristalloqrafik məlumatların cədvəli.

Şəkil 2-yə əlavədə isə həmin difraksiya mənzərəsindən hesablanmış kristalloqrafik məlumatlar verilmişdir. $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ monokristallarından alınan difraksiya mənzərəsinin və hesablanmış kristalloqrafik məlumatların təhlili göstərmişdir ki, tədqiq edilən monokristallar rombik qəfəsə malikdir və qəfəsin parametrləri: $a=7,980\text{\AA}$, $b=7,80\text{\AA}$, $c=13,333\text{\AA}$, $V_{\text{qf}}=831,08\text{\AA}^3$ fəza qrupu Pnma, $Z=8$, $\rho_{\text{ren}}=6,17 \text{ gr/sm}^3$ kimidir.

Məlumdur ki, alınan qəfəs sabitləri Cu-S sistemində formalasaq və qeyristexiometrik faza kimi qəbul edilən bir-



Şəkil 1. $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ monokristallarının ümumi dörünüşü (böyüdülmüş 3 dəfə)

Ilk növbədə sublimasiya nəticəsində alınan monokristalların tərkibinin hansı elementlərdən təşkil olmasını müəyyən etmək lazım idi. Bunun üçün EDX (Energy Dispersive X-ray Analysis) analiz üsulu seçildi və nəticədə monokristalların kimyəvi tərkibinin atomar faiz ilə $54,52\pm38\%$ Cu, $10,02\pm0,77\%$ Fe və $35,46\pm4,0\%$ Se-dən ibarət olması müəyyənləşdi ki, bu da $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ -yə uyğun olduğunu təsdiq edir.

Növbəti etapda alınan monokristalların simmetriyası və qəfəs sabitlərinin təyin edilməsi lazım idi. Rentgenoqrafik tədqiqatlar üçün eksperimental əsaslar, ilk növbədə monokristallarda kristal qəfəsin ümumi səpilmə mənzərəsini müşahidə etməkdən ibarətdir. Bunun üçün avtodifraktometrde (CuK_α -şüalanma, Ni-filtr) tədqiq edilən $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ monokristallarından $10^\circ < 2\theta < 85^\circ$ intervalında rentgendifraksiya alınmışdır. Alınan difraksiya mənzərəsi şək.2-də verilmişdir.



ləşmələrdən biri - Anilit- $\text{Cu}_7\text{S}_4=2\text{Cu}_3^{1+}\text{Cu}_{0.5}^{2+}\text{S}_2$ üçün xarakterikdir ($a=7,89$; $b=7,84$; $c=11,01\text{\AA}$; $Z=4$; $\rho=5,68\text{q/sm}^3$) [11].

$\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ üçün müəyyən edilmiş kristalloqrafik sabitlər Cu_3CuS_2 ilə müqayisə edildikdə məlum olur ki, onlar arasında tam analogiya olsa da müəyyən fərq də var. Bu fərq $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ qəfəsinin həcmi Anilitə (Cu_3CuS_2) nisbətən bir qədər böyükdür. Bu isə, biza belə gelir ki, kükürd atomlarının ion radiusunun ($1,83\text{\AA}$) Se atomlarına nisbətən ($1,92\text{\AA}$) kiçik

$\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ MONOKRİSTALLARININ RENTGENOQRAFIK TƏDQİQİ VƏ MAQNİT QAVRAYICILIĞI

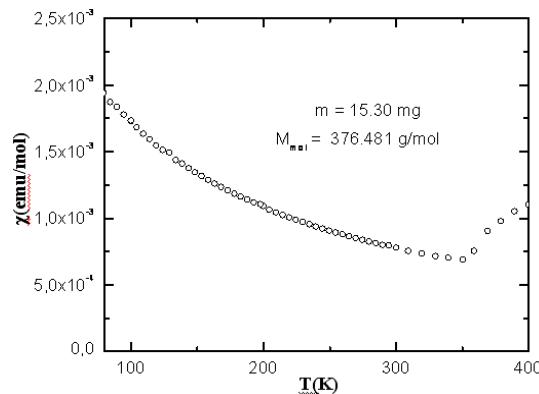
ilə bağlıdır. Beləliklə də, hesab etmək olar ki, hər iki qətəsim kristal quruluşu izostruktur sayıla bilər.

Məlumdur ki, Anilitin- Cu_3CuS_2 quruluşunda kükürd atomlarının kubik kip yerləşmə qaydası ilə əmələ gətirdiyi karkasda oktaedrik boşluqlar vakantdır və mis atomları əsasən tetraedr və üçbucaqlarda məskunlaşmışlar. Bu baxımdan $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ -də 2 valentli dəmir atomlarının oktaedrik boşluqlarda statistik vəziyyətdə paylanması şərait yaranır.

$\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ -nin maqnit qavrayicılığı

$\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ monokristallarının maqnit qavrayicılığı 80-400K temperaturunda maqnit sahəsinin 2Tl qiymətində rəqqaslı SKVID-maqnitometrde tədqiq edilmişdir. Şəkil 3-də tədqiq edilən kristalın maqnit qavrayicılığının temperaturdan asılılıq əyrisi verilmişdir.

Aparılan maqnit ölçüləri nəticələrindən məlum olmuşdur ki, $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ monokristallarının maqnit qavrayicılığının temperatur asılılığı mahiyyətcə kvazibölgülü antiferromaqnitlərə xas olan xarakterə uyğundur [12].



Şəkil 3. $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ monokristallarının magnit qavrayicılığının temperatur asılılığı

Qavrayicılıq əyrisinin temperaturdan asılılığından göründüyü kimi $T=350\text{K}$ -dən aşağı ($T_N=350\text{K}$) sistem antiferromaqnit keçidinə məruz qalır, buda maqnit nizamlanmasında ferromaqnitlərdən fərqli olaraq spinlərin paralel düzülüşünə uyğundur.

-
- | | |
|---|---|
| [1] <i>J. Lamazares, F. Gonzales-Jimenez, E. Jaimes et.al. J. of Magnetism and Magnetic Materials. 1992, v. 104-107, p. 997-998.</i> | [6] <i>J.C. Woolley, A.M. Lamarche, G. Lamarche et al. J.of Magnetism and Magnetic Materials. 1996, v.164, p. 154-162.</i> |
| [2] <i>J.M. Delegado, G. Diaz de Delegado. Mat. Res. Bull. 1992, v. 27, p. 367-373.</i> | [7] <i>Eun Chung Choi, Hang Nam Oak, Kyung Seon Baek., et al. J.of the Korean Physical Society, 1996, v. 29, №6, p.789-791.</i> |
| [3] <i>A.I. Najafov, G.G. Guseinov, O.Z. Alekperov, J.of Phsics and Chemistry of Solids. 2003, №64, p.1873-1875.</i> | [8] <i>F.Gonzales-Jimenes, E.Jaimes, A.Rivas. et.al. Physica 1999, B259-261, p.987-989.</i> |
| [4] <i>A.İ. Nadjafov,G.G. Guseynov, T.S. Mamedov i. dr. Izv. NAN 2002, №5, s.63-68. (in Russian).</i> | [9] <i>Qingyi Lu, Junqing Hu, Kaibin Tang. et.al. J. of Crystal Growth, 2000, v. 217, p. 271-273.</i> |
| [5] <i>Yu.G. Asadov, G.M. Agamirzoyeva,G.G. Guseynov i dr. «Magnitniye svoystva monokristallov $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$». XII Nacionalnaya konferenciya po rostu kristallov NKRK-2006. Tezisi dokladov. Moskva, s.317. (in Russian)</i> | [10] <i>R.A. Sadikhov, V.N. Zarickiy, Dj. Mezom i.dr. Kristallografiya, 2001, t. 46, №1, s.28-32. (in Russian).</i> |
| | [11] <i>By Kichiro Koto, Nobuo Morimoto. Acta Cyst. 1970, B26, p. 915-924.</i> |
| | [12] <i>S. Tiwary, S. Vasudevan. Phys. Rev. B, 1997, v.56, p.7821.</i> |

G.M. Agamirzoeva, G.M. Jafarov, S.K. Orujov, Q.Q. Quseinov

X-RAY DIFFRACTION AND MAGNETIC SUSCEPTIBILITY OF $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ SINGLE CRYSTALS

By X-ray diffraction analysis of single crystal phases of obtained samples of CuFeSe_2 synthesis from gas phase and melt during the crystallization the formation of $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ composition single crystals has been revealed. Rhombic lattice constants: $a=7.980\text{\AA}$, $b=7.8\text{\AA}$, $c=13.3331\text{\AA}$, $V_{lat}=464.1\text{\AA}^3$, $\rho=6.17\text{gr/cm}^3$, sp.gr. $Pnma$, $Z=4$.

Magnetic susceptibilities in interval temperature $35\text{K} \leq T \leq 400\text{K}$ and $H=1; 2$ Tl magnetic fields have been measured. It is established that magnetic transition at $T_N=350\text{K}$ takes place. Analysis of magnetic experiments allows us to establish that $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ shows the properties which are character for one-dimensional antiferromagnetic systems.

Г.М. Агамирзоева, К.М. Джапаров, С.К. Оруджов, Г.Г. Гусейнов

РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И МАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛОВ $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$

При рентгенографическом исследовании монокристаллических фаз, полученных в процессе кристаллизации образцов, синтеза CuFeSe_2 из газовой фазы и расплава выявлены образования монокристаллов состава $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$. Константы ромбической решетки: $a=7.980\text{\AA}$, $b=7.8\text{\AA}$, $c=13.3331\text{\AA}$, $V_{lat}=831.08\text{\AA}^3$, $\rho_{renm}=6.17\text{gr/cm}^3$, пр.гр. $Pnma$, $Z=4$.

В температурном интервале $35\text{K} \leq T \leq 400\text{K}$ и $H=1; 2$ Tl магнитных полях измерены магнитные восприимчивости. Установлено, при $T_N=350\text{K}$ происходит магнитный фазовый переход. Анализ магнитных экспериментов позволил установить, что $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$ проявляет свойства, характерные для одномерных антиферромагнитных систем.

Received: 17.01.08